



42^a



**Reunião Anual
Sociedade Brasileira de Química**



EIXOS MOBILIZADORES EM QUÍMICA

de 27 a 30/05/2019

Joinville, SC

PROGRAMA E RESUMOS



Realização:

Sociedade Brasileira de Química

42^a Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química

PROGRAMA E RESUMOS

**Joinville, SC
27 a 30 de maio de 2019**

DIRETORIA DA SBQ

Presidente: *Norberto Peporine Lopes* (FCFRP-USP)
Presidente Sucessor: *Romeu Cardozo Rocha Filho* (UFSCar)
Vice-Presidente: *Rossimiriam P. de Freitas* (UFMG)
Secretário Geral: *Fernando de Carvalho da Silva* (UFF)
Secretário Adjunto: *Luiz Gonzaga de França Lopes* (UFC)
Tesoureiro da SBQ: *Valdemar Lacerda Júnior* (UFES)
Tesoureira Adjunta: *Elisa Souza Orth* (UFPR)
Diretora Executiva: *Dirce Maria Fernandes Campos* (SBQ)

CONSELHO CONSULTIVO DA SBQ

Aldo José G. Zarbin (UFPR)
Claudia Moraes de Rezende (UFRJ)
Fernando Galembeck (UNICAMP)
Paulo Cezar Vieira (UFSCar)
Shirley Nakagaki Bastos (UFPR)
Vanderlan da Silva Bolzani (IQAr-UNESP)
Watson Loh (UNICAMP)

CONSELHO FISCAL DA SBQ

Andre Galembeck (CETENE)
Glaura Goulart Silva (UFMG)
Sergio de Paula Machado (UFRJ)

SOCIEDADE BRASILEIRA DE QUÍMICA - SBQ
Av. Prof. Lineu Prestes, 748
Instituto de Química da USP, bloco 3 superior
Cidade Universitária, São Paulo - SP
fone (11) 3032-2299 – fax (11) 3814-3602
endereço eletrônico: diretoria@sbq.org.br
sítio da internet: <http://www.s bq.org.br>
endereço postal:
Caixa Postal 26.037, 05513-970 - São Paulo - SP

Copyright© 2019 Sociedade Brasileira de Química

Todas as informações dos resumos publicadas neste livro foram reproduzidas de cópias fornecidas pelos autores. O conteúdo dos resumos é de exclusiva responsabilidade de seus autores. A SBQ, seus diretores e funcionários, a comissão organizadora da 42ª RASBQ e seus assessores *ad hoc* não se responsabilizam por consequências decorrentes de uso de quaisquer dados, afirmações e opiniões inexatos (ou que conduzam a erros) publicados neste livro.

COMISSÃO ORGANIZADORA DA 42ª RASBQ

Fernando de Carvalho da Silva (UFF) - Secretário Geral da SBQ - Presidente da CO 42ª RASBQ
Norberto Peporine Lopes (FCFRP-USP) - Presidente da SBQ
Valdemar Lacerda Júnior (UFES) - Tesoureiro da SBQ
Dirce Maria Fernandes Campos (SBQ) - Diretora Executiva da SBQ
Juliano Smanioto Barin (UFSM) - Divisão de Alimentos e Bebidas
Katia Bernardo Gusmão (UFRGS) - Divisão de Catálise
Paulo Olivi (FFCLRP-USP) - Divisão de Eletroquímica e Eletroanalítica
Márlon Herbert F. B. Soares (UFG) - Divisão de Ensino de Química
Gustavo Fernandes S. Andrade (UFJF) - Divisão de Físico-Química
Erick Leite Bastos (IQUSP) - Divisão de Fotoquímica
Maria Fátima das Graças Fernandes da Silva (UFSCar) - Divisão de Produtos Naturais
Cassiana Carolina Montagner (IQ-UNICAMP) - Divisão de Química Ambiental
Márcia Foster Mesko (UFPEl) - Divisão de Química Analítica
Giovanna Machado (CETENE) - Divisão de Química de Materiais
Víctor Marcelo Deflon (IQSC-USP) - Divisão de Química Inorgânica
Carolina Horta Andrade (UFG) - Divisão de Química Medicinal
Cristiano Raminelli (UNIFESP) - Divisão de Química Orgânica

COMISSÃO CIENTÍFICA DA 42ª RASBQ

Fernando de Carvalho da Silva (UFF) - Secretário Geral da SBQ - Presidente da CO 42ª RASBQ
Norberto Peporine Lopes (FCFRP-USP) - Presidente da SBQ
Romeu Cardozo Rocha Filho (UFSCar) - Presidente Sucessor da SBQ
Rossimiriam P. de Freitas (UFMG) - Vice-Presidente da SBQ
Luiz Gonzaga de França Lopes (UFC) - Secretário Adjunto da SBQ
Valdemar Lacerda Júnior (UFES) - Tesoureiro da SBQ
Elisa Souza Orth (UFPR) - Tesoureira Adjunta da SBQ
Aldo José G. Zarkin (UFPR) - Conselho Consultivo da SBQ
Claudia Moraes de Rezende (UFRJ) - Conselho Consultivo da SBQ
Fernando Galembeck (UNICAMP) - Conselho Consultivo da SBQ
Paulo Cezar Vieira (UFSCar) - Conselho Consultivo da SBQ
Shirley Nakagaki Bastos (UFPR) - Conselho Consultivo da SBQ
Vanderlan da Silva Bolzani (IQAr-UNESP) - Conselho Consultivo da SBQ
Watson Loh (UNICAMP) - Conselho Consultivo da SBQ
Juliano Smanioto Barin (UFSM) - Divisão de Alimentos e Bebidas
Katia Bernardo Gusmão (UFRGS) - Divisão de Catálise
Paulo Olivi (FFCLRP-USP) - Divisão de Eletroquímica e Eletroanalítica
Márlon Herbert F. B. Soares (UFG) - Divisão de Ensino de Química
Gustavo Fernandes S. Andrade (UFJF) - Divisão de Físico-Química
Erick Leite Bastos (IQUSP) - Divisão de Fotoquímica
Maria Fátima das Graças Fernandes da Silva (UFSCar) - Divisão de Produtos Naturais
Cassiana Carolina Montagner (IQ-UNICAMP) - Divisão de Química Ambiental
Márcia Foster Mesko (UFPEl) - Divisão de Química Analítica
Giovanna Machado (CETENE) - Divisão de Química de Materiais
Víctor Marcelo Deflon (IQSC-USP) - Divisão de Química Inorgânica
Carolina Horta Andrade (UFG) - Divisão de Química Medicinal
Cristiano Raminelli (UNIFESP) - Divisão de Química Orgânica

COMISSÃO LOCAL DA 42ª RASBQ

Rogério Aparecido Gariani (UDESC) - Presidente da Comissão Local da 42ª RASBQ

Brenno Ralf Maciel Oliveira (UDESC)

Sérgio Henrique Pezzin (UDESC)

Samuel Rodrigues Mendes (UDESC)

Fernando Roberto Xavier (UDESC)

Aldo Sena de Oliveira (UFSC)

Patrícia Bulegon Brondani (UFSC)

Paulo Cesar de Jesus (FURB)

ASSESSORES AD HOC

Adalgisa R. de Andrade

Adalgisa Reis Mesquita

Aderson Zottis

Adilson Ben da Costa

Adolfo Horn Jr.

Adriana Karla Cardoso Amorim Reis

Adriana Nunes Correia

Adriana Passarella Gerola

Agustina Rosa Echeverría

Alam Gustavo Trovó

Alberto Jose Cavalheiro

Aldo Sena de Oliveira

Alessandra Stevanato

Alessandro Rodrigues

Alexandre Carneiro Silvino

Alexandre Orsato

Alfredo Luis M. L. Mateus

Aline Thais Bruni

Aloir Antonio Merlo

Altair Benedito Moreira

Alvaro José dos Santos Neto

Álvaro Takeo Omori

Alzir Azevedo Batista

Amadeu Moura Bego

Amauri Antonio Menegário

Ana Cláudia Kasseboehmer

Ana Luiza de Quadros

Ana Maria Pires

Ana Paula Silveira Paim

Anderson Joel Schwanke

Andre Alexandre Vieira

André Luiz dos Santos

André Mauricio de Oliveira

Andrea Monteiro Santana Silva

Angela Regina Araujo

Angelo de Fatima

Anita J. Marsaioli

Anne Helene Fostier

Antonio Euzebio Goulart de Sant'Ana

Antonio Gilberto Ferreira

Antonio Gustavo Sampaio Oliveira Filho

Antonio Jacinto Demuner

Antonio Rogério Fiorucci

Arnaldo Alves Cardoso

Arthur Eugen Kummerle

Artur de Jesus Motheo

Auro Atsushi Tanaka

Bernardo Almeida Iglesias

Bianca da Cunha Machado

Boniek Gontijo Vaz

Brenno Ralf Maciel Oliveira

Bruno Amaral Meireles

Bruno Araujo Cautiero Horta

Bruno Silva Leite

Caio Costa Oliveira

Camila Greff Passos

Camila Silveira da Silva

Carla Beatriz Grespan Bottoli

Carlos Alberto Manssour Fraga

Carlos Alberto Marques

Carlos Cezar da Silva

Carlos Magno Rocha Ribeiro

Carlos Mauricio R. de Sant'Anna

Carolina Guimarães de Souza

Carolina Horta Andrade

Cassiana Carolina Montagner

Cassius Vinicius Stevani

Catarina de Nigris Del Cistia

Cedric Stephan Graebin

Célia Machado Ronconi

Celio Pasquini

Christiane Philippini F. Borges

Cíntia Duarte de Freitas Milagre

Clarissa Piccinini Frizzo

Claudia Carvalhinho Windmoller

Claudia Longo

Claudia Moraes de Rezende

Cleder Alexandre Somensi

Cleônia Roberta Melo Araújo

Cristiano Raminelli

Daniel Lázaro Gallindo Borges

Daniel Pais Pires Vieira

Daniel Rodrigues Cardoso

Danielle Caroline Schnitzler

Danilo Gustavo Rodrigues Silva

Danilo Manzani

David Rodrigues da Rocha

Dayse Carvalho da Silva Martins

Débora Gonçalves

Denise Freitas Siqueira Petri

Denise Leal de Castro

Diego Pereira dos Santos

Diogo Ricardo Bazan Ducatti

Diogo Teixeira Carvalho

Dulce Helena Siqueira Silva

Ednei Gilberto Primel

Ednei Gilberto Primel

Eduardo Jorge Pilau

Eduardo José Nassar

Eduardo Mathias Richter

Eduardo Rolim de Oliveira

Elene Cristina Pereira Maia

Eliana Aparecida Silicz Bueno

Elisa Prestes Massena

Elizabeth Igne Ferreira

Emerson Schwingel Ribeiro

Emílio Carlos de Lucca Júnior

Emmanuel Vilaça Costa

Erick Leite Bastos

Erico Marlon de Moraes Flores

Etelvino José Henriques Bechara

Fabiano Severo Rodembusch

Fabio Alberto de Molfetta

Fábio Andrei Duarte

Fabio Henrique Barros de Lima

Fabio Luiz Navarro Marques

Fábio Peres Gonçalves

| | | |
|--------------------------------------|-----------------------------------|---|
| Fábio Rodrigo Piovezani Rocha | Jorge Luiz Sônego Mllani | Marco Aurélio Zezzi Arruda |
| Fávero Reisdorfer Paula | Jose Alves Dias | Marco Flôres Ferrão |
| Fernanda Andreia Rosa | José Luis de Paula Barros Silva | Marco Tadeu Grassi |
| Fernando de Carvalho da Silva | José Ribeiro Gregório | Marcos Alexandre Gelesky |
| Flavio Antonio Maximiano | Josef Wilhelm Baader | Maria Aparecida Ferreira C. Oliveira |
| Flávio Colmati Jr. | Josefredo Rodriguez Pliego Júnior | Maria Claudia Marx Young |
| Francine Pazini | Josué Carinhonha Caldas Santos | Maria Cristina A. Costa |
| Francisco Eduardo Aragão Catunda Jr. | Juliana Maria Sampaio Furlani | Maria Cristina Canela Gazotti |
| Francisco Trivinho Strixino | Juliana S. Fagundes Pereira | Maria Cristina Nonato |
| Frederico Silva Castelo Branco | Juliano Smanioto Barin | Maria da Paz Lima |
| Gilson de Freitas Silva | Julio Santos Reboucas | Maria das Graças A. Korn |
| Giovanna Machado | Jussara Lopes de Miranda | Maria das Gracias L. Brandao |
| Giovanni Wilson Amarante | Karen Wohnrath | Maria de Fatima Fontes Lelis |
| Gisele Simone Lopes | Katia Bernardo Gusmão | Maria do Carmo Rangel |
| Giuliano Cesar Clososki | Katia Jorge Ciuffi | Maria Domingues Vargas |
| Glaucia Ribeiro Gonzaga | Klenicy Kazumy de Lima Yamaguchi | Maria Elenir Nobre Pinho Ribeiro |
| Glaura Goulart Silva | Klester dos Santos Souza | Maria Eunice Ribeiro Marcondes |
| Grace Gosmann | Laudemir Carlos Varanda | Maria Fatima das G. F. da Silva |
| Graciela Arbilla de Klachquin | Laura Oliveira Péres | Maria Fernanda D'Oliveira Pimentel |
| Guilherme Andrade Marson | Leandro Ferreira Pedrosa | Maria Goretti de V. Silva |
| Guilherme Sippel Machado | Leonardo Luiz Gomes Ferreira | Maria Helena Roxo Beltran |
| Gustavo Fernandes S. Andrade | Letícia Malta Costa | Maria Lúcia Arruda de Moura Campos |
| Gustavo Henrique Goulart Trossini | Liane Marcia Rossi | Maria Luiza Miranda Rocco |
| Gustavo Pozza Silveira | Ligia Maria M. Valente | Maria Valnice B. Zanoni |
| Hector Henrique Ferreira Koolen | Lorrana Nara Naves Nobrega | Maria Vanda Marinho |
| Helio Anderson Duarte | Lourdes Campaner dos Santos | Marília Oliveira Fonseca Goulart |
| Hideko Yamanaka | Lucas Alonso Rocha | Mario Cesar Ugulino de Araujo |
| Hilma Alessandra R. do Couto | Lucas Pizzuti | Mario Geraldo de Carvalho |
| Hosana Maria Debonisi | Lucia Helena Mascaro Sales | Mario Roberto Senger |
| Humberto Marcio S. Milagre | Lucia Pinheiro Santos Pimenta | Márlon Herbert F. B. Soares |
| Ian Castro-Gamboia | Luciano Morais Lião | Marta Eloisa Medeiros |
| Iolanda da Cruz Vieira | Luis Octávio Regasini | Mary Ann Foglio |
| Irlon Maciel Ferreira | Luiz Antônio Soares Romeiro | Mauricio Moraes Victor |
| Irwin Rose Alencar de Menezes | Luiz Antonio Sodrê Costa | Maurícus Selvero Pazinato |
| Isis Martins Figueiredo | Luiz Fernando Cappa de Oliveira | Mauro Bertotti |
| Italo Odone Mazali | Luiz Gonzaga de França Lopes | Mauro Korn |
| Ivo Jose Curcino Vieira | Luiz Henrique Dall'Antonia | Maysa Furlan |
| Ivo Milton Raimundo Jr. | Luiz Sidney Longo Junior | Michael Jackson Vieira da Silva |
| Izilda Aparecida Bagatin | Luzineide Wanderley Tinoco | Michele Oberson de Souza |
| Jairo Kenupp Bastos | Magdalena Nascimento Rennó | Moacir Rossi Forim |
| Janaina da Silva Crespo | Mara Elisa Fortes Braibante | Nailton Monteiro do Nascimento Júnior |
| Jaqueline Nicolini | Marcela Mohallem Oliveira | Neide Hiroko Takata |
| Jean Marcel Ribeiro Gallo | Marcelo Gomes Speziali | Nelson Henrique Morgon |
| Jeanine Giarolla | Marcelo Santos Castilho | Nelson Ramos Stradiotto |
| João Batista Fernandes | Márcia Cristina Bisinoti | Nerilso Bocchi |
| João Batista Lopes Martins | Márcia Foster Mesko | Niege Araçari Jacometti Cardoso Furtado |
| João Marcos Madurro | Marcia Matiko Kondo | Nito Angelo Debacher |
| Joao Roberto Fernandes | Márcia Narcizo Borges | Nívea Cristina Guedes Munin |
| Joaquim de Araujo Nobrega | Márcio Peres de Araujo | Norberto Peporine Lopes |
| Joaquim Fernando Mendes da Silva | Marco André Fraga | Nyuara Araújo da Silva Mesquita |
| Jorge Cardoso Messeder | Marco Antonio Schiavon | Orlando Fatibello Filho |
| Jorge Luiz de Oliveira Domingos | Marco Antonio Utrera Martines | Osmar Damian Prestes |

| | | |
|---|----------------------------------|-------------------------------------|
| Ozelito Possidônio de Amarante Jr. | Roberto de Barros Faria | Tania Denise M. Salgado |
| Pablo Machado | Roberto Parise Filho | Telma Leda Gomes de Lemos |
| Paola de Azevedo Mello | Robson Ricardo Teixeira | Thiago Barcellos da Silva |
| Patrícia Mendonça Pauletti | Rodrigo Alejandro Abarza Muñoz | Thiago Teixeira Tasso |
| Paulo Alexandre Panarra Ferreira | Rodrigo Alejandro Abarza Muñoz | Timothy John Brocksom |
| Paulo Augusto Netz | Rodrigo Luiz Oliveira R. Cunha | Valderi Luiz Dressler |
| Paulo Cezar Vieira | Romeu Cardozo Rocha Filho | Valeria Almeida Alves |
| Paulo Gustavo Barboni Dantas Nascimento | Ronaldo Nascimento de Oliveira | Vanderlan da Silva Bolzani |
| Paulo Henrique G. Zarbin | Ronei Jesus Poppi | Vanessa Égea dos Anjos |
| Paulo Olivi | Roselena Faez | Vanessa End de Oliveira |
| Pedro Henrique Cury Camargo | Roseli Martins de Souza | Vanessa Gisele Pasqualotto Severino |
| Pedro Ivo Canesso Guimarães | Rosely Aparecida Peralta | Vânia Denise Schwade |
| Pedro Sérgio Fadini | Roy Edward Bruns | Vera Lucia Alves |
| Pérola de Castro Vasconcellos | Ruth Flávia Vera Villamil Jaimes | Vera Lucia Eifler Lima |
| Priscila Pereira Silva Caldeira | Sabrina Baptista Ferreira | Victor Marcelo Deflon |
| Rafael Cava Mori | Salette Linhares Queiroz | Vitor Francisco Ferreira |
| Rafael Pavão das Chagas | Samuel Silva da Rocha Pita | Vladimir C. Gomes Heleno |
| Raphael Salles Ferreira Silva | Sandra Regina Longhin | Vladimir Lavayen |
| Reinaldo Francisco Teófilo | Sebastião da Cruz Silva | Walace Doti do Pim |
| Renan Borsoi Campos | Selma Elaine Mazzetto | Warley de Souza Borges |
| Renato Henriques de Souza | Sergio Antonio Marques de Lima | Watson Loh |
| Renato Sanches Freire | Sergio de Paula Machado | Wendel Andrade Alves |
| Renato Zanella | Shirley Nakagaki Bastos | Wendell Guerra |
| Ricardo Andrade Rebelo | Silvia Cláudia Loureiro Dias | Wendell Karlos Tomazelli Coltro |
| Ricardo Jorgensen Cassella | Silvio do Desterro Cunha | Willian Xerxes Coelho Oliveira |
| Ricardo Queiroz Aucelio | Sofia Nikolaou | Yuri Alexandre Aoto |
| Roberto Carlos Campos Martins | Sônia Soares Costa | Zeki Naal |

EDITORIAL

Prezados(as) colegas,

Em 2019, a 42ª Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química (42ª RASBQ) será realizada na cidade de Joinville-SC no período de 27-30 de maio e congregará a maior comunidade de químicos do Brasil entre estudantes, professores e pesquisadores da área de química e afins de todo Brasil e do exterior. Com quase 600 mil habitantes, Joinville sediará pela primeira vez uma RASBQ e esperamos movimentar a cidade divulgando e disseminando a química pela “Cidade dos Príncipes”.

O evento será realizado no centro de convenções Expoville, possuindo mais de 210 mil m² de área total e cerca de 20 mil m² de área coberta, o maior do gênero do sul do Brasil, e está localizado a aproximadamente dois quilômetros do centro da cidade, onde há muitos hotéis, restaurantes, todas as facilidades e a 15 minutos do aeroporto.

Este ano, o tema da reunião será “Eixos Mobilizadores em Química” e nos levará, após 15 anos da publicação do primeiro documento na Química Nova, a refletir e avaliar sobre temas como o ensino de graduação e pós-graduação em Química (avaliação CAPES) e o modelo atual de financiamento à pesquisa.

A comissão organizadora da 42ª RASBQ, formada pelos Presidente, Secretário Geral, Tesoureiro, Diretora Executiva e os Diretores das 13 divisões científicas da SBQ já está trabalhando pela realização do evento desde agosto e já foram convidados importantes nomes da química brasileira e internacional para compor nossa grade de programação. São cientistas do mais alto gabarito com linhas de pesquisas de todas as áreas e de alto impacto. As 13 divisões científicas também já indicaram os minicursos que serão oferecidos e a novidade este ano será a realização de minicursos multidisciplinares envolvendo mais de uma divisão científica. Muitos workshops também já foram definidos.

A aceitação da comunidade SBQ sobre escolha da cidade de Joinville-SC para sediar o evento refletiu positivamente e estamos entusiasmados em fazer mais uma RASBQ de sucesso em 2019. Apesar dos desafios do momento atual, esperamos congregarmos mais de duas mil pessoas numa excelente oportunidade de fortalecer ainda mais a comunidade química brasileira. As inscrições se iniciarão muito em breve e as inscrições de resumos irão até 10 de fevereiro.

Esperamos todos em Joinville!

Fernando de Carvalho da Silva

Secretário Geral

Presidente da Comissão Organizadora da 42ª Reunião Anual da SBQ

Grade de Horários

| Segunda-Feira 27 de maio | Terça-Feira 28 de maio | Quarta-Feira 29 de maio | Quinta-Feira 30 de maio |
|--|---|--|--|
| 10:00 – 12:00 Workshops | 8:00 – 10:00 Minicursos | 8:00 – 10:00 Minicursos | 8:00 – 10:00 Minicursos |
| | 9:50 – 10:10 Intervalo, café | 9:50 – 10:10 Intervalo, café | 9:50 – 10:10 Intervalo, café |
| | 10:10 – 11:10 Conferências Convidadas | 10:10 – 12:10 Simpósio-I | 10:05 – 11:05 Conferências Convidadas |
| | 11:15 – 12:15 Conferências Convidadas | | 11:10 – 12:10 Conferências Convidadas |
| 12:00 – 14:00 Almoço | 12:15 – 14:00 Almoço | 12:10 – 14:00 Almoço | 12:10 – 14:00 Almoço |
| 14:00 – 17:00 Workshops | 14:00 – 17:50 Sessões Coordenadas | 13:00 – 14:00 ACS Publications | 14:00 – 17:50 Sessões Coordenadas |
| | | 14:00 – 15:50 Sessões Temáticas | |
| 15:30 – 15:50 Intervalo, café | 15:50 – 16:10 Intervalo, café | 15:50 – 16:10 Intervalo, café | 15:50 – 16:10 Intervalo, café |
| 19:30 – 20:00 Abertura | 18:00 – 20:20 Sessão de Painéis-I Lançamento de Livros | 16:00 – 18:00 Simpósio-II | 18:00 – 20:20 Sessão de Painéis II |
| | | 18:05 – 19:05 Assembleias Divisionais | |
| | | 19:10 – 20:10 Assembleias Regionais | |
| 20:00 – 21:00 Conferência de Abertura | 20:30 – 21:30 Sessão de Homenagens | 22:00 Festa 42ª RASBQ | 20:30 Assembleia Geral |
| 21:00 – 23:30 Coquetel de Abertura | | | 21:30 Coquetel de Encerramento |

SUMÁRIO

Segunda-feira - 27 de maio

| | | |
|-------------|---|----|
| 9:00-21:00 | Entrega de material..... | 11 |
| 10:00-17:00 | Workshops..... | 11 |
| 19:30-20:00 | Abertura da 42ª Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química..... | 13 |
| 20:00-21:00 | Conferência de Abertura..... | 13 |
| 21:00-23:30 | Coquetel de Abertura..... | 13 |

Terça-feira - 28 de maio

| | | |
|-------------|---------------------------------------|----|
| 8:00-10:00 | Minicursos..... | 14 |
| 8:30-17:00 | SBQ na Escola..... | 14 |
| 11:15-12:15 | Conferências Convidadas..... | 15 |
| 14:00-17:50 | Sessões Coordenadas..... | 15 |
| 18:00-20:20 | Sessão I de discussão de painéis..... | 22 |
| 18:00-20:00 | Lançamento de Livros..... | 22 |
| 20:30-21:30 | Sessão de Homenagens..... | 23 |

Quarta-feira – 29 de maio

| | | |
|-------------|------------------------------|----|
| 8:00-10:00 | Minicursos..... | 25 |
| 8:30-17:00 | SBQ na Escola..... | 25 |
| 10:10-12:10 | Simpósio-I..... | 25 |
| 13:00-14:00 | ACS Publications..... | 25 |
| 14:00-15:50 | Sessões Temáticas..... | 25 |
| 16:00-18:00 | Simpósio-II..... | 26 |
| 18:05-19:05 | Assembleias Divisionais..... | 26 |
| 19:10-20:10 | Assembleias Regionais..... | 26 |
| 22:00 | Festa 42ª RASBQ..... | 26 |

Quinta-feira - 30 de maio

| | | |
|-------------|-------------------------------|----|
| 8:00-10:00 | Minicursos..... | 27 |
| 8:30-17:00 | SBQ na Escola..... | 27 |
| 10:05-11:05 | Conferências Convidadas..... | 27 |
| 11:10-12:10 | Conferências Convidadas..... | 27 |
| 14:00-17:50 | Sessões Coordenadas..... | 27 |
| 18:00-20:20 | Sessão de Painéis II..... | 34 |
| 20:30-21:30 | Assembleia Geral..... | 34 |
| 21:30 | Coquetel de Encerramento..... | 34 |

Índice de Painéis

| | | |
|-----|---|----|
| AMB | Química Ambiental | 36 |
| ANA | Química Analítica | 39 |
| BEA | Química de Alimentos e Bebidas | 44 |
| BIO | Química Biológica | 45 |
| CAT | Catálise | 45 |
| COL | Química de Superfícies e Colóides | 47 |
| EDU | Ensino de Química | 47 |
| ELE | Eletroquímica e Eletroanalítica | 50 |
| EST | Química Estrutural | 52 |
| FIS | Físico-Química | 52 |
| FOT | Fotoquímica | 54 |
| HIS | História da Química | 54 |
| INO | Química Inorgânica | 54 |
| MAT | Química de Materiais | 58 |
| MED | Química Medicinal | 64 |
| ORG | Química Orgânica | 66 |
| QPN | Química de Produtos Naturais | 73 |
| QVE | Química Verde | 78 |
| TEC | Química Tecnológica | 79 |
| TEO | Química Teórica | 79 |

| | |
|---------------------------------------|----|
| <i>Índice de Autores</i> | 81 |
|---------------------------------------|----|

| | |
|--|-----|
| <i>Índice de Palavras-chave</i> | 104 |
|--|-----|

Segunda-feira - 27 de maio

9:00-21:00 ENTREGA DE MATERIAL (HALL DO PAVILHÃO A)

10:00-17:00 WORKSHOPS

Perspectivas da Química Analítica e de Produtos Naturais em Alimentos e Saúde (Sala 2 - Azaléia)

Coordenadores: *Márcia Foster Mesko (UFPE)*
Juliano Smanioto Barin (UFMS)
Maria Fátima das Graças Fernandes da Silva (UFSCar)

Palestrantes: *Osmar Damian Prestes (UFMS)*
Regina Vincenzi Oliveira (UFSCar)
Fábio Andrei Duarte (UFMS)
José Angelo Silveira Zuanazzi (UFRGS)
Suzana Lucy Nixdorf (UEL)
Letícia Malta Costa (UFMG)
Taifo Mahmud (Oregon State University)

Química e Luz: Fronteiras e Desafios (Sala 3 - Ipê)

Coordenadores: *Carolina H. Andrade (UFG)*
Cristiano Raminelli (UNIFESP)
Erick L. Bastos (USP)
Victor M. Deflon (USP-SC)

Palestrantes: *Shirley Nakagaki Bastos (UFPR)*
Igor Dias Jurberg (UNICAMP)
Fernando Heering Bartoloni (UFABC)
Natalia Mayumi Inada (IFSC-USP)
Kleber Thiago de Oliveira (UFSCar)
Bernardo Almeida Iglesias (UFMS)
Leticia Christina Pires Gonçalves (Technische Universität Wien - TU Wien)
Antonio Claudio Tedesco (FFCLRP-USP)

Técnicas Avançadas de Caracterização de Materiais – Projeto SIRIUS

(Sala 4 – Bromélia)

Coordenadores: *Italo Odone Mazali (UNICAMP)*
Kátia Bernardo Gusmão (UFRGS)

Palestrantes: *Harry Westfahl Jr. (LNLS)*
Ingrid David Barcelos (LNLS)
Nathaly Lopes Archilha (LNLS)
Amelie Claire Rochet (LNLS)
Tulio Costa Rizuti da Rocha (LNLS)

25 anos da Divisão de Química Ambiental: uma perspectiva de norte a sul (Sala 8 – Lírio)

Coordenadoras: *Cassiana C. Montagner (UNICAMP)*
Maria Lúcia Arruda de Moura Campos (FFCLRP-USP)
Vanessa Egéa dos Anjos (UEPG)

Palestrantes: *Mauricio dos Santos Matos (FFCLRP-USP)*
Nívea Cristina Guedes Munin (UFAM)
Gisele da Rocha (UFBA)
Valéria Regina Bellotto (UnB)
Ricardo Soares (INEA)

Roberta Cerasi Urban (UFSCar)
Danielle Caroline Schnitzler (UTFPR)
Wilson de Figueiredo Jardim (UNICAMP)

Integração das Secretarias Regionais da SBQ (Sala 17 – Gérbera)

Coordenador: *Luiz Gonzaga de França Lopes (UFC)*
Palestrantes: *Valdemar Lacerda Júnior (UFES)*
Janaina Heberle Bortoluzzi (UFAL)
Eliane de Oliveira Silva (UFBA)
Adonay Rodrigues Loiola (UFC)
João Batista Lopes Martins (UnB)
Maria Tereza Weitzel Dias Carneiro Lima (UFES)
Danielle Cangussu de C. Gomes (UFG)
Dênis Pires de Lima (UFMS)
Hallen Daniel Rezende Calado (UFMG)
Kátia Messias Bichinho (UFPB)
Luiz Henrique Dall'Antonia (UEL)
Claudete Fernandes Pereira (UFPE)
Sabrina Baptista Ferreira (UFRJ)
Hugo Tubal Schmitz Braibante (UFMS)
Taícia Pacheco Fill (UNICAMP)
Daltamir Justino Maia (UNICAMP)
Paulo Cesar de Jesus (FURB)
Róbson Ricardo Teixeira (UFV)

XVII Workshop de Pós-Graduação em Química (Sala 5 – Tulipa)

Coordenadora: *Rossimíriam Pereira de Freitas (UFMG)*
Palestrantes: *Aldo José G. Zarbin (UFPR)*
Adriano Lisboa Monteiro (UFRGS)
Norberto Peporine Lopes (FCFRP-USP)
Carlos Gilberto Carlotti Júnior (USP)

Jovens Pesquisadores: futuros líderes nos setores acadêmico e empresarial

(Sala 6 – Hortência)

Coordenadoras: *Marília Valli (UNESP)*
Paula Carolina Pires Bueno (FCFRP-USP)
Palestrantes: *Norberto Peporine Lopes (FCFRP-USP)*
Carlos Henrique de Brito Cruz (IFI-UNICAMP / Diretor Científico da FAPESP)
Marina Rocchi M. Mattar (Dir. de Relações Institucionais e Sustentabilidade da Abiquim)
Guilherme Julião Zocolo (Pesquisador da Embrapa Agroindústria Tropical)

JBCS: 30 anos (Sala 9 – Girassol)

Coordenador: *Paulo Cezar Vieira (FCFRP-USP)*
Palestrantes: *Norberto Peporine Lopes (FCFRP-USP)*
Roberto Manuel Torresi (IQUSP)
Adriano L. Monteiro (UFRGS)
Maria Valnice B. Zanoni (IQAr-UNESP)
Jean Marcel R. Gallo (UFSCar)
Wallans T. P. dos Santos (UFVJM)

19:30-20:00 **ABERTURA DA 42ª REUNIÃO ANUAL DA SOCIEDADE BRASILEIRA DE QUÍMICA**
(Sala 1 – Orquídea)

20:00-21:00 **CONFERÊNCIA DE ABERTURA** (Sala 1 – Orquídea)
“Naftoquinonas: ocorrência, usos medicinais e importância biológica”
Vitor Francisco Ferreira (UFF)

21:00-23:30 **COQUETEL DE ABERTURA**

Terça-feira - 28 de maio

8:00-10:00 MINICURSOS

- 1. Catálise uma visão integrada** (Sala 5 – Tulipa)
 - *Liane M. Rossi* (USP)
 - *Pedro Miguel Vidinha Gomes* (USP)
- 2. Planejamento didático-pedagógico na atuação e formação de professores: introdução à implementação de Unidades Didáticas Multiestratégicas no Ensino de Química** (Sala 8 – Lírio)
 - *Amadeu Moura Bego* (UNESP)
- 3. RMN Multinuclear: fundamentos e aplicações** (Sala 7 – Jasmim)
 - *Antonio Gilberto Ferreira* (UFSCar)
- 4. Tutorial sobre cálculos de estrutura eletrônica** (Sala 17 – Gérbera)
 - *Antonio Gustavo Sampaio de Oliveira Filho* (FFCLRP-USP)
 - *Ana Paula de Lima Batista* (USP)
 - *Yuri Alexandre Aoto* (UFABC)
- 5. Espectrometria de massas: fundamentos e aplicações** (Sala 6 – Hortência)
 - *Boniek Gontijo Vaz* (UFG)
 - *Amauri Antônio Menegário* (UNESP)
 - *Eduardo Jorge Pilau* (UEM)
- 6. Planejamento de Fármacos Baseado em Fragmentos (FBDD) e Técnicas de Triagem em Larga Escala (HTS/HCS)** (Sala 9 – Girassol)
 - *Floriano Paes Silva Junior* (FIOCRUZ)
 - *Mário Roberto Senger* (FIOCRUZ)
 - *Rafael Ferreira Dantas* (FIOCRUZ)
- 7. Métodos experimentais para a elucidação de mecanismos de reações orgânicas** (Sala 3 – Ipê)
 - *Ronaldo A. Pilli* (UNICAMP)
 - *Rodrigo A. Cormanich* (UNICAMP)
 - *Bruno M. Paz* (UNICAMP)
- 8. O uso da eletroquímica para um meio ambiente sustentável** (Sala 16 – Antúrio)
 - *Adalgisa Rodrigues de Andrade* (FFCLRP-USP)
- 9. Nanomateriais Plasmônicos** (Sala 4 – Bromélia)
 - *Diego Pereira dos Santos* (UNICAMP)
 - *Daniel Grasseschi* (UFRJ)
- 10. Química Forense: novos métodos analíticos aplicados na análise de drogas de abuso, documentoscopia e balística forense** (Sala 2 – Azaléia)
 - *Wanderson Romão* (IFES)

8:30-17:00 SBQ NA ESCOLA

10:10-11:10 - CONFERÊNCIAS CONVIDADAS

- AIM-ing for Catalyst Synthesis with Single-Atom Precision** (Sala 4 – Bromélia)
- *Joseph T. Hupp* (Northwestern University)

Harnessing redox-directed phytochemicals for skin cancer chemoprevention and pro-oxidant chemotherapy (Sala 5 – Tulipa)
- *Georg T. Wondrak* (University of Arizona)

Synthesis of natural and unnatural products (Sala 8 – Lírio)
- *Edward Anderson* (Universidade de Oxford)

Aplicações analíticas de emulsões e microemulsões: dos procedimentos clássicos às novas abordagens (Sala 9 – Girassol)
- *Ricardo Jorgensen Cassella* (UFF)

GC x GC com modulador de fluxo e sem criogenia: uso e aplicações com FID , SQ e QTOF (Conferência empresa) – (Sala 7 Jasmim)
- *Romão Beserra JR* (Especialista de Produtos Agilent)

11:15-12:15 CONFERÊNCIAS CONVIDADAS

Phenylphenalenones - structure, biosynthesis and biological function
(Sala 4 – Bromélia)
- *Bernd Schneider* (Max Planck Institute for Chemical Ecology)

Antropoceno: how we became a force of nature (Sala 5 – Tulipa)
- *Graciela Arbilla de Klachquin* (UFRJ)

Semiconductors Heterojunctions for Enhanced Photocatalytic Solar Fuels Production (Sala 9 – Girassol)
- *Abdessadek Lachgar* (Wake Forest University)

Real-time, Bioorthogonal Imaging of Intracellular Drug Concentrations
(Sala 8 – Lírio)
- *Alison Hulme* (Universidade de Edimburgo)

14:00-17:50 SESSÕES COORDENADAS

QUÍMICA AMBIENTAL I (Sala 3 – Ipê)

Coordenadora: *Cassiana Carolina Montagner* (IQ-UNICAMP)

14:00 – 14:25 “Contribuições recentes para o desenvolvimento da difusão em filmes finos por Gradiente de Concentração (DGT): especiação redox de telúrio”

Marco Tadeu Grassi (UFAM)

14:25 – 14:30 Discussão

14:30 – 14:45 “O papel das águas superficiais como fonte ou sumidouro de etanol, peróxido de hidrogênio e acetaldéido presentes na baixa troposfera”

Caroline Scaramboni (FFCLRP-USP)

14:45 – 14:50 Discussão

14:50 – 15:05 “Extração sequencial e especiação química do Arsênio em amostras de sedimentos de lagoas alcalinas da Nhecolândia – Pantanal (MS)”

Adriana Felix de Souza (UNICAMP)

15:05 – 15:10 Discussão

15:10 – 15:25 “Characterization of ozone episodes and ozone precursors in Irajá District, Rio de Janeiro”

Cleyton Martins da Silva (UFRJ)

15:25 – 15:30 Discussão

15:30 – 15:45 “Avaliação da contaminação antropogênica por esteróis em sedimentos do Rio Capibaribe nos municípios de Santa Cruz e Toritama/PE”

Bruna Ramos de Souza Gomes (UFRPE)

- 15:45 – 15:50 Discussão
- 15:50 – 16:10 Intervalo
- 16:10 – 16:35 “uGAS-MONITOR: a portable and low-cost 3D printed platform for in situ air quality monitoring using uPAD’s coupled to smartphones”
João Flávio da Silveira Petrucci (UFU)
- 16:35 – 16:40 Discussão
- 16:40 – 16:55 “Use of two Tillandsia species as air quality biomonitors at an important Brazilian highway”
Karmel Beringui de Oliveira da Silva (PUC-Rio)
- 16:55 – 17:00 Discussão
- 17:00 – 17:15 “Water and sediment recovery from water-based drilling fluid waste”
Laine Badaró Pereira (UFES)
- 17:15 – 17:20 Discussão
- 17:20 – 17:45 “Natural thallium in the West region of Bahia (Brazil): a risk to geoenvironmental health?”
Oldair Donizeti Leite (UTFPR)
- 17:45 – 17:50 Discussão e Encerramento

QUÍMICA ANALÍTICA I (Sala 2 – Azaléia)

Coordenadores: *Josué Carinhanha Caldas Santos (UFAL)*

Wendell Karlos Tomazelli Coltro (UFG)

- 14:00 – 14:25 “Evolução dos dispositivos de detecção de quimiluminescência em sistema de análise em fluxo”
Boaventura Freire dos Reis (CENA-USP)
- 14:25 – 14:30 Discussão
- 14:30 – 14:45 “Classificação de petróleos pela Análise discriminante por mínimos quadrados parciais (PLS-DA)”
Francine Dalapícola dos Santos (UFES)
- 14:45 – 14:50 Discussão
- 14:50 – 15:05 “Multivariate image analysis for fast determination of total solid soluble in mangos (*Mangifera indica*) using the PhotoMetrix-PRO 1.1.3”
Ionara Xavier Bento (IFRN)
- 15:05 – 15:10 Discussão
- 15:10 – 15:25 “Forensic electroanalysis: Direct use of the graphite sheet as a swab and working electrode for determination of explosive residues”
Sílvia Vaz Fernandes de Castro (UFU)
- 15:25 – 15:30 Discussão
- 15:30 – 15:45 “Metabolomic approach in the phytopathology of Asian soybean rust using techniques based on mass spectrometry, molecular networking and multivariate analysis”
Evandro Aparecido da Silva (UEM)
- 15:45 – 15:50 Discussão
- 15:50 – 16:10 Intervalo
- 16:10 – 16:35 “A arte do controle sistemático da matéria: quimiometria aplicada a nanoestruturas e polimorfos”
Claudete Fernandes Pereira (UFPE)
- 16:35 – 16:40 Discussão
- 16:40 – 16:55 “Microwave-Assisted Solid Sampling System for the analysis of Polymeric Samples using FF-AAS”
Alessandra Schneider Henn (UFESM)
- 16:55 – 17:00 Discussão
- 17:00 – 17:15 “Evaluation antibiotics removal from synthetic sewage by a consortium microalgae and bacteria in LED photobioreactors by HPLC-MS”
Daniel Aparecido da Silva Rodrigues (UFOP)

- 17:15 – 17:20 Discussão
17:20 – 17:45 “Aplicação de métodos cromatográficos na caracterização de analitos provenientes de fontes renováveis”
Janaina Heberle Bortoluzzi (UFAL)
17:45 – 17:50 Discussão e Encerramento

QUÍMICA DE ALIMENTOS E BEBIDAS (Sala 17 – Gérbera)

Coordenador: *Juliano Smanioto Barin* (UFSM)

- 14:00 – 14:25 “Impactos da mudança climática na composição química de alimentos e bebidas”
Ieda Spacino Scarminio (UEL)
14:25 – 14:30 Discussão
14:30 – 14:45 “Electronic nose based on ionogel doped with iron (III) oxide particles applied to detection of honey adulteration”
Wellington Belarmino Gonçalves (IQUSP)
14:45 – 14:50 Discussão
14:50 – 15:05 “Sequential determination of calcium and magnesium in water and milk using flow batch system and detection by webcam”
Eduarda Aguiar Severo (UTFPR)
15:05 – 15:10 Discussão
15:10 – 15:25 “Green analytical method for halogens and sulfur determination in pet foods by ion chromatography with conductivity and mass spectrometry detection”
Filipe Soares Rondan (UFPEL)
15:25 – 15:30 Discussão
15:30 – 15:45 “Spectrophotometric method for quantification of the reducing capacity of teas based on the formation of Fe(II)/1,10-phenanthroline complex”
Aline Freire Gouveia de Amorim (FMABC)
15:45 – 15:50 Discussão
15:50 – 16:10 Intervalo
16:10 – 16:35 “Metodos rápidos e simples para determinação de conservantes, aditivos e medicamentos veterinários em alimentos”
Ednei Gilberto Primel (FURG)
16:35 – 16:40 Discussão
16:40 – 16:55 “Caracterização dos voláteis presentes na polpa de uvaia (*Eugenia pyriformis* Cambess) usando o método de microextração em fase sólida”
Luisa Del Carmen Barrett Reina (UFMT)
16:55 – 17:00 Discussão
17:00 – 17:15 “Behavior of Macro and Micronutrients in Erva Mate Infusion after Cd Bioaccumulation in Clonal Mini-Garden”
Camila Maria Aguiar da Costa Alves (UFSM)
17:15 – 17:20 Discussão
17:20 – 17:45 “Quantitative analysis using a flatbed scanner and Automated Digital Image Analysis: Total Reducing capacity of Beers using the Folin-Ciocalteu assay”
Endler Marcel Borges de Souza (FAM)
17:45 – 17:50 Discussão e Encerramento

ENSINO DE QUÍMICA (Sala 9 – Girassol)

Coordenador: *Márlon Herbert Flora Barbosa Soares* (UFG)

- 14:00 – 14:25 “Desenvolvimento da competência representacional por meio de simulação de experimentos”
Guilherme Andrade Marson (IQUSP)
14:25 – 14:30 Discussão

- 14:30 – 14:45 “A presença e inserção da mulher cientista em um Programa de Pós-Graduação em Química: reflexões sobre as questões de gênero”
Leice Milla Ribeiro de Novais (UFPR)
- 14:45 – 14:50 Discussão
- 14:50 – 15:05 “Contribuições da educação midiática no combate às fake news para o processo de ACT no ensino de química”
Renan de Paiva Vettori (UFPR)
- 15:05 – 15:10 Discussão
- 15:10 – 15:25 “Teaching of Analytical Chemistry for the course of Zootechnics: Proposal of contextualized experimental activities”
Darlíana Mello Souza (UFMS)
- 15:25 – 15:30 Discussão
- 15:30 – 15:45 “Development of skills in chemistry teaching by situation-problem”
Camila Alexandra Rodrigues (FEUSP)
- 15:45 – 15:50 Discussão
- 15:50 – 16:10 Intervalo
- 16:10 – 16:35 “O uso de aplicativos para Android como ferramenta pedagógica no ensino de Química”
Maria Goretti de V. Silva (UFC)
- 16:35 – 16:40 Discussão
- 16:40 – 16:55 “Use of mini-course on thermal analysis as a tool for the contextualization of chemistry in the classroom”
Fernanda Faria Martins (IFRJ-CAMPUS DUQUE DE CAXIAS)
- 16:55 – 17:00 Discussão
- 17:00 – 17:15 “Percepções dos professores de Química sobre a inclusão digital nas escolas do sertão pernambucano: um estudo de caso”
Bruno Silva Leite (UFRPE)
- 17:15 – 17:20 Discussão
- 17:20 – 17:45 “Teaching density in a plural perspective on learning: a case study in higher education”
Amadeu Moura Bego (IQAr-UNESP)
- 17:45 – 17:50 Discussão e Encerramento

FÍSICO-QUÍMICA/QUÍMICA DE SUPERFÍCIES E COLOIDES/QUÍMICA TEÓRICA (Sala 8 – Línio)

- Coordenador: *Gustavo Fernandes Souza Andrade* (UFJF)
- 14:00 – 14:25 “Chlorate-iodine-nitrous acid oscillating reaction”
Roberto de Barros Faria (UFRJ)
- 14:25 – 14:30 Discussão
- 14:30 – 14:45 “Stability of silica nanoparticles modified with both hydrophobic and hydrophilic silanes”
Beatriz Palma Andrade Santos (UNICAMP)
- 14:45 – 14:50 Discussão
- 14:50 – 15:05 “Sugar Decoration of Polyplexes: A Nonviral Vector Alternative for Gene Delivery”
Morgana Sofia Zilse (UFSC)
- 15:05 – 15:10 Discussão
- 15:10 – 15:25 “Evaluating nucleation process on inorganic scaling”
Filipe Signorelli (IQ-UNICAMP)
- 15:25 – 15:30 Discussão
- 15:30 – 15:45 “Lipid binding interactions of chitosan: parameters modulating the maximum insertion pressure in lipid monolayers”
Rafael de Oliveira Pedro (IFSC-USP)
- 15:45 – 15:50 Discussão
- 15:50 – 16:10 Intervalo

- 16:10 – 16:35 “Free energy profile of a model palladium catalyzed nucleophilic fluorination of phenyl bromide”
Josefredo Rodriguez Pliego Júnior (UFSJ)
- 16:35 – 16:40 Discussão
- 16:40 – 16:55 “Ab Initio Investigation of Nano-interfaces formed by Fen and (ZrO₂)₁₃ Nanoclusters”
Larissa Zibordi Besse (IQSC-USP)
- 16:55 – 17:00 Discussão
- 17:00 – 17:15 “Computational study of saccharide solvation using minimum-distance distribution functions”
Rafael Alcides Vicente (UNICAMP)
- 17:15 – 17:20 Discussão
- 17:20 – 17:45 “1,2,4-triazole as organocatalyst for organophosphates degradation: a kinetic and computational study”
Juliano Monteiro Fernandes (UTFPR)
- 17:45 – 17:50 Discussão e Encerramento

QUÍMICA INORGÂNICA I (Sala 4 – Bromélia)

- Coordenador: *Sidney José Lima Ribeiro* (IQAr-UNESP)
- 14:00 – 14:25 “Characterization of graphene-like materials from sugarcane bagasse”
Antonio Salvio Mangrich (UFPR)
- 14:25 – 14:30 Discussão
- 14:30 – 14:45 “Manganese(III) porphyrin as catalysts for norfloxacin degradation in aqueous medium: products identification and cytotoxicity assay”
Alexandre Moreira Meireles (UFMG)
- 14:45 – 14:50 Discussão
- 14:50 – 15:05 “Complexes of Ln³⁺ (La³⁺, Sm³⁺) containing a Bis(hydrazone): synthesis, characterization and photophysical study”
Iara Alice Teixeira Gaia (UFTM)
- 15:05 – 15:10 Discussão
- 15:10 – 15:25 “[Ln(18C6)(L'/L'')]Cl₃ and [Ln(18C6)(μ-L'')]Ni(dbm)₂] complexes: synthesis and photoluminescent study”
Rodolpho Alessandro Nesta Silva (IQAr-UNESP)
- 15:25 – 15:30 Discussão
- 15:30 – 15:45 “Investigação de um Complexo Cobalto(III)-Esculetina como Plataforma de Entrega Controlada de Fármacos em Ambiente Hipóxico”
Marcos Vinicius Palmeira de Mello (UFF)
- 15:45 – 15:50 Discussão
- 15:50 – 16:10 Intervalo
- 16:10 – 16:35 “Hybrid material for controlled of drugs release”
Andréilson Wellington Rinaldi (UEM)
- 16:35 – 16:40 Discussão
- 16:40 – 16:55 “Study of the Second-Sphere Coordination Effects with Copper (II) Complexes through Intercalating Group Insertion”
Bruna Luiza Auras (UFSC)
- 16:55 – 17:00 Discussão
- 17:00 – 17:15 “Platinum(II)-pyrazole complexes: structure and DNA binding evaluation”
Ana Luiza Andrade Querino (UFMG)
- 17:15 – 17:20 Discussão
- 17:20 – 17:45 “Cellular uptake of a Cu(I)-phosphine complex in breast tumor and non-tumor cells”
Legna Andreina Colina Vegas (UFSCar)
- 17:45 – 17:50 Discussão e Encerramento

QUÍMICA DE MATERIAIS I (Sala 5 – Tulipa)

Coordenador: *Ítalo Odone Mazali* (UNICAMP)

- 14:00 – 14:25 “Stimuli-Responsive Nanovalves and Nanodevices for Drug Delivery”
Celia Machado Ronconi (UFF)
- 14:25 – 14:30 Discussão
- 14:30 – 14:45 “Novel mixed transition metal oxide: RuxWyOz - Synthesis and application”
Caroline Brambilla de Aquino (UPM)
- 14:45 – 14:50 Discussão
- 14:50 – 15:05 “Design of a crumpled graphene/copper composites for electrochemical sensing of hydrogen peroxide”
Ana Walkilaine Barbosa do Nascimento (UFGD)
- 15:05 – 15:10 Discussão
- 15:10 – 15:25 “Synthesis and characterization of gold-rhodium dendritic nanoparticles”
Maria Paula de Souza Rodrigues (IQUSP)
- 15:25 – 15:30 Discussão
- 15:30 – 15:45 “Voltammetric sensing of nifedipine using a new silsesquioxane and cobalt(II) phthalocyanine modified electrode”
João Paulo Winiarski (UFSC)
- 15:45 – 15:50 Discussão
- 15:50 – 16:10 Intervalo
- 16:10 – 16:35 “Lanthanide-based luminescent materials applied to optical probes”
Fernando Aparecido Sigoli (IQ-UNICAMP)
- 16:35 – 16:40 Discussão
- 16:40 – 16:55 “Synthesis, characterization and nanotoxicity of 3D-graphene nanofilters for endocrine disruptors removal from water”
Mayara Bitencourt Leão (UNIPAMPA)
- 16:55 – 17:00 Discussão
- 17:00 – 17:15 “SiO₂-NH₂/β-cyclodextrin as a platform for protoporphyrin IX photosensitizer in the context of photodynamic therapy”
Gleudson Igor Zanetti Figueiredo (UFRJ)
- 17:15 – 17:20 Discussão
- 17:20 – 17:45 “Plasma treatment for Polyaniline functionalization on Carbon Fiber electrodes”
Carla Dalmolin (UDESC)
- 17:45 – 17:50 Discussão e Encerramento

QUÍMICA ORGÂNICA I (Sala 6 – Hortência)

Coordenador: *Giovanni Wilson Amarante* (UFJF)

- 14:00 – 14:25 “20 Anos do MesoLab: sinfonia de moléculas em dominós, one-pot e multicomponentes”
Marcus Cesar Mandolesi Sá (UFSC)
- 14:25 – 14:30 Discussão
- 14:30 – 14:45 “Switching diastereoselectivity in catalytic enantioselective (3+2) cycloadditions between azomethine ylides and activated alkenes”
Guilherme da Silva Caleffi (UFRJ)
- 14:45 – 14:50 Discussão
- 14:50 – 15:05 “Porphyrins as photoredox catalysts in Csp²-H arylations: batch and continuous flow approaches”
Nathalia Salgado Silva (UFSCar)
- 15:05 – 15:10 Discussão
- 15:10 – 15:25 “Development of a comprehensive study on base-controlled regioselective functionalization and C-H borylation of indolizines”
Camila Rodrigues de Souza Bertallo (FCFRP-USP)

- 15:25 – 15:30 Discussão
- 15:30 – 15:45 “Síntese de calcogeno-cianoidrinas opticamente ativas via resolução cinética enzimática mediada por lipase”
Daniel Kochany Filipak (UFPR)
- 15:45 – 15:50 Discussão
- 15:50 – 16:10 Intervalo
- 16:10 – 16:35 “Isocumarinas e diidroisocumarinas: substâncias inspiradoras para o planejamento de novos fármacos”
Rosemeire Brondi Alves (UFMG)
- 16:35 – 16:40 Discussão
- 16:40 – 16:55 “Towards the multi-step flow synthesis of the URAT1 inhibitor Lesinurad”
Mariana Celestina Frojuello C. B. Damião (UNICAMP)
- 16:55 – 17:00 Discussão
- 17:00 – 17:15 “Acidochromism of push-pull nitroquinoline compounds: experimental theoretical approach”
Giovanny Carvalho dos Santos (UNESP-BAURU)
- 17:15 – 17:20 Discussão
- 17:20 – 17:45 “Busca por novos nematocidas de origem natural”
Antonio Jacinto Demuner (UFV)
- 17:45 – 17:50 Discussão e Encerramento

QUÍMICA DE PRODUTOS NATURAIS I (*Sala 7 – Jasmim*)

Coordenadora: *Maysa Furlan* (IQAr-UNESP)

- 14:00 – 14:25 “Metabólitos secundários de Asteraceae: isolamento e identificação, desrepliação e atividade biológica”
Maria Helena Sarragiotto (UEM)
- 14:25 – 14:30 Discussão
- 14:30 – 14:45 “Using new tools for the metabolomic study and dereplication of marine actinomycetes extracts”
Eduarda Antunes Moreira (FCFRP-USP)
- 14:45 – 14:50 Discussão
- 14:50 – 15:05 “Dereplication of cytotoxic extracts of endophytic fungi obtained from *Casearia arborea* (Salicaceae) using molecular network approach”
Augusto Leonardo dos Santos (UNIFESP-Diadema)
- 15:05 – 15:10 Discussão
- 15:10 – 15:25 “Isolamento e identificação de novas saponinas do “Mandacaru” (*Cereus jamacaru*)”
Lucas Silva Abreu (UFPB)
- 15:25 – 15:30 Discussão
- 15:30 – 15:45 “Pentacyclic triterpenes and the in vitro leishmanicidal of *Vochysia divergens* Pohl stem extract”
Letícia Pereira Pimenta (UNIFRAN)
- 15:45 – 15:50 Discussão
- 15:50 – 16:10 Intervalo
- 16:10 – 16:35 “Determinação Estrutural de Produtos Naturais e importância Científica e Acadêmica”
Mario Geraldo de Carvalho (UFRRJ)
- 16:35 – 16:40 Discussão
- 16:40 – 16:55 “Identificação de piperamidas em extratos hexânico e diclorometânico dos resíduos agroindustriais de pimenta do reino (*Piper nigrum* L.)”
Danielle dos Reis Lucas (UFES)
- 16:55 – 17:00 Discussão
- 17:00 – 17:15 “New phenylphenalene isolated from *Eichhornia crassipes*.”
Mayra Fonseca Costa (IQAr-UNESP)

- 17:15 – 17:20 Discussão
17:20 – 17:45 “Biosynthesis of Aminocyclitol-containing Natural Products”
Taifo Mahmud (Oregon State University)
17:45 – 17:50 Discussão e encerramento

18:00-20:20 Sessão I de Discussão de Painéis (Pavilhão A)

Atenção: os painéis deverão ser fixados no período das 12:00 às 14:00 e retirados a partir das 20:20 até às 9:00 do dia seguinte.

| | |
|-------------------|-------------------|
| AMB-001 a AMB-044 | ANA-001 a ANA-063 |
| BEA-001 a BEA-010 | BIO-001 a BIO-005 |
| CAT-001 a CAT-020 | COL-001 a COL-009 |
| EDU-001 a EDU-036 | ELE-001 a ELE-028 |
| FIS-001 a FIS-017 | FOT-001 a FOT-006 |
| HIS-001 a HIS-002 | INO-001 a INO-051 |
| MAT-001 a MAT-072 | MED-001 a MED-030 |
| ORG-001 a ORG-090 | QPN-001 a QPN-054 |
| QVE-001 a QVE-010 | TEO-001 a TEO-010 |

18:00-20:00 Lançamento de Livros (Pavilhão A)

Título: “Introdução à Química Experimental - 3ª edição”

Autores: Roberto Ribeiro da Silva, Nerilso Bocchi, Romeu C. Rocha-Filho e Patrícia Fernandes L. Machado

Editora: EdUFSCar – Editora da Universidade Federal de São Carlos

Título: “Potenciometria: aspectos teóricos e práticos”

Autores: Orlando Fatibello-Filho, Tiago Almeida Silva, Fernando Cruz de Moraes, Bruno Campos Janegitz

Editora: EdUFSCar – Editora da Universidade Federal de São Carlos

Título: “Temáticas para o Ensino de Química: contribuições com atividades experimentais”

Autores: Mara E. Fortes Braibante e Hugo T. Schmitz Braibante (orgs.)

Editora: Editora CRV

Título: “Substâncias Carboniladas e Derivados - 2ª Edição”

Autores: Paulo Costa, Ronaldo Pilli e Sergio Pinheiro

Editora: EditSBQ

Título: “Show de Química – aprendendo química de forma lúdica e experimental - 3ª Edição”

Autor: Honerio Coutinho de Jesus

Editora: Editora Livraria da Física – LF, São Paulo

Título: “Experimentos para Laboratório de Físico-Química”

Autores: Elton Sitta, José Mario Aquino, Manoel G.P. Homem, Sonia R. Biaggio

Editora: EdUFSCar

Título: “Métodos de Preparo de Amostras para Análise Elementar - 2ª Edição”

Editado: Francisco José Krug e Fábio Rodrigo Piovezani Rocha

Editora: EditSBQ

- Título: **“Didatização Lúdica no Ensino de Ciências/Química: teorias de aprendizagem e outras interfaces”**
Autores: Maria das Graças Cleophas e Márlon Herbert Flora Barbosa Soares
Editora: Livraria da Física
- Título: **“Coleção Química no Cotidiano - Volume 9 - Nitrogênio: o sétimo elemento”**
Autores: Luiz Cláudio de Almeida Barbosa e Reinaldo Bertola Cantarutti
Editora: *EditSBQ*
- Título: **“Coleção Química no Cotidiano - Volume 10 – Sódio”**
Autores: Valdir Florêncio da Veiga Junior, Júlia de Cássia Lopes Zimmermann, Lucas Mathias Armando, Gabriel Dias Fonseca e Filipe Kayodê Felisberto dos Santos
Editora: EditSBQ
- Título: **“Coleção Química no Cotidiano - Volume 11 - Carbono”**
Autor: Aldo J.G. Zarbin
Editora: EditSBQ
- Título: **“Coleção Química no Cotidiano - Volume 12 - Oxigênio”**
Autor: Carlos A. L. Filgueiras
Editora: EditSBQ
- Título: **“Coleção Química no Cotidiano - Volume 13 - Enxofre: do elemento às moléculas sulfuradas bioativas”**
Autores: Lídia Moreira Lima e Eliezer J. Barreiro
Editora: EditSBQ
- Título: **“Coleção Química no Cotidiano - Volume 14 - Nióbio: o elemento do século XXI”**
Autores: Guilherme Camelier Almeida, José C. Barros e Robson de Souza Monteiro
Editora: EditSBQ
- Título: **“Multi jogos Tabela Periódica”**
Autores: Marcos Hirata Kobori e Ana Maria Pires
- Título: **Guia Prático de Escalonamento de Tecnologias- da bancada à planta piloto: discussões sobre como inovar com sua pesquisa e se aproximar da indústria**
Autores: Priscila Maria Teixeira Gonçalves de Souza, Lorena Viana de Souza, Arthur Gabriel da Silva, Marcelo Gomes Speziali, Elimar Pires Vasconcelos, Marcella Rocha Franco, Rochel Montero Lago, Vinicius Gomide de Castro, Glaura Goulart Silva e Maria Paula Duarte de Oliveira

20:30-21:30 **SESSÃO DE HOMENAGENS** (Sala 1 – Orquídea)

Medalha Simão Mathias
- *Vitor Francisco Ferreira* (UFF)
- *César Zucco* (UFSC)

Prêmio Química Nova
- *Boniek Gontijo Vaz* (UFG)

JBCS Medal of Honor
- *Joaquim de Araújo Nobrega* (UFSCar)

Prêmio Revista Virtual de Química
- *Luiz Pereira Ramos* (UFPR)

Prêmio "Hans Viertler"
- *Luis Octávio Regasini* (UNESP-Rio Preto)

Prêmio QNInt "Jailson Bittencourt de Andrade"
- *Alfredo Luis Martins Lameirão Mateus* (UFMG)

CNPq-SBQ-RSC Brazilian Chemistry Certificate of Distinction
- *Dirce Pozebon* (UFRGS)
- *Eufrânio N Silva Jr.* (UFMG)

Quarta-feira – 29 de maio

8:00-10:00 MINICURSOS

8:30-17:00 SBQ NA ESCOLA

10:10-12:10 SIMPÓSIO-I (Sala 1 – Orquídea)

Eixos mobilizadores da química

Coordenador: *Norberto Peporine Lopes* (FCFRP-USP)

Palestrantes: *Jorge A. Guimarães* (UFRGS)

Fernanda Furlan (BASF)

Jailson B. de Andrade (UFBA)

13:00-14:00 ACS PUBLICATIONS (Sala 7 – Jasmim)
- *John Fourkas* (University of Maryland)

14:00-15:50 SESSÕES TEMÁTICAS

Água para um desenvolvimento sustentável (Sala 2 – Azaléia)

Coordenadores: *Giovanna Machado* (CETENE)

Cassiana Carolina Montagner (UNICAMP)

Paulo Olivi (FFCLRP-USP)

Italo Odone Mazali (UNICAMP)

Pedro Henrique Cury Camargo (IQUSP)

Palestrantes: *Artur de Jesus Motheo* (IQSC-USP)

Raquel Fernandes Pupo Nogueira (IQAr-UNESP)

Wilson de Figueiredo Jardim (UNICAMP)

A Química para o combate ao Câncer (Sala 3 – Ipê)

Coordenadores: *Carolina H. Andrade* (UFG)

Cristiano Raminelli (UNIFESP)

Victor M. Deflon (IQSC-USP)

Palestrantes: *Leticia Veras Costa Lotufo* (ICB-USP)

Fernando Antônio Santos Coelho (UNICAMP)

Roberto Santana da Silva (FCFRP-USP)

Imageamento Químico (Sala 5 – Tulipa)

Coordenadores: *Márcia Foster Mesko* (UFPEl)

Juliano Smanioto Barin (UFMS)

Erick Leite Bastos (IQUSP)

Palestrantes: *Marco Aurelio Zezzi Arruda* (UNICAMP)

Renato Arruda Mortara (UNIFESP)

Adilson Ben da Costa (UNISC)

Tabela Periódica (Sala 4 – Bromélia)

Coordenadora: *Claudia M. Rezende* (UFRJ)

Palestrantes: *Robson de Souza Monteiro* (Catalysis Consultoria Ltda)

Luis Roberto Brudna Hölzle (UNIPAMPA)

Severino Alves Junior (UFPE)

SciFinder[®], a sua ferramenta de acesso à informação científica (Sala 6 – Hortência)
- *Gabriel Kaetan Baio Ferreira* (American Chemical Society – ACS)

16:00-18:00 SIMPÓSIO-II (Sala 1 – Orquídea)

Multiplicando referências femininas

Coordenadoras: *Rossimiriam P. de Freitas* (UFMG)

Elisa Orth (UFPR)

Palestrantes: *Alice Rangel de Paiva Abreu* (Professora Emérita da UFRJ)

Nadya Pesce da Silveira (UFRGS)

Silmara das Neves (IQX-Inove Qualix)

Vanderlan da Silva Bolzani (IQAr-UNESP)

Lançamento do Prêmio Vanderlan da Silva Bolzani e premiação

Premiadas: *Maria Domingues Vargas* (UFF)

Dirce Maria Fernandes Campos (SBQ)

18:05-19:05 ASSEMBLEIAS DIVISIONAIS

Divisão de Química Ambiental (*Sala 2 – Azaléia*)

Divisão de Química Analítica (*Sala 3 – Ipê*)

Divisão de Ensino de Química (*Sala 4 – Bromélia*)

Divisão de Química de Materiais (*Sala 5 – Tulipa*)

Divisão de Química Medicinal (*Sala 6 – Hortêncina*)

Divisão de Química Inorgânica (*Sala 7 – Jasmim*)

Divisão de Química Orgânica (*Sala 8 – Lírio*)

Divisão de Produtos Naturais (*Sala 9 – Girassol*)

Divisão de Catálise (*Sala 13 – Acácia*)

Divisão de Eletroquímica e Eletroanalítica (*Sala 14 – Violeta*)

Divisão de Fotoquímica (*Sala 15 – Rosa*)

Divisão de Física Química e Química Teórica (*Sala 16 – Antúrio*)

Divisão de Química de Alimentos Bebidas (*Sala 17 – Gérbera*)

19:10-20:10 ASSEMBLEIAS REGIONAIS

22:00 FESTA 42ª RASBQ (Hall do Expoville)

Quinta-feira - 30 de maio

8:00-10:00 MINICURSOS

8:30-17:00 SBQ NA ESCOLA

10:05-11:05 CONFERÊNCIAS CONVIDADAS

A cor da ciência: formação escolar e a descolonização do currículo

(Sala 9 – Girassol)

- *Anna Maria Canavarro Benite* (UFG)

Metallic nanomaterials and their applications in single-molecule spectroscopy

(Sala 5 – Tulipa)

- *Alexandre G. Brolo* (University of Victoria)

Biomimetic magneto-actuated electrochemical sensors and biosensors

(Sala 8 – Lírio)

- *Maria Isabel Pividori* (Universidade Autônoma de Barcelona)

Designing zeolites for target catalytic applications (Sala 4 – Bromélia)

- *Manuel Moliner Marín* (Instituto de Tecnología Química de Valência)

11:10-12:10 CONFERÊNCIAS CONVIDADAS

Photoprocess and nanotechnology as a powerful tool for the treatment of neurodegenerative disorders and brain cancer (Sala 8 – Lírio)

- *Antonio Claudio Tedesco* (FFCLRP-USP)

The color chromophores of fruits, flowers and mature red wines: from inspiration to application (Sala 9 – Girassol)

- *Frank Herbert Quina* (USP)

The role of chemistry in addressing global bio- and agro-security challenges

(Sala 4 – Bromélia)

- *Peter K. Dorhout* (Kansas State University, ex-presidente da ACS)

Nanotopographic Control of Cytoskeletal Dynamics (Sala 5 – Tulipa)

- *John Fourkas* (University of Maryland)

14:00-17:50 SESSÕES COORDENADAS

QUÍMICA AMBIENTAL II (Sala 3 – Ipê)

Coordenadora: *Danielle Caroline Schnitzler* (UTFPR)

14:00 – 14:25 “Evaluation of 2,4D drift occurrence through foliar determination of the herbicide and metabolites by LC-MS/MS and GC-MS/MS”

Osmar Damian Prestes (UFMS)

14:25 – 14:30 Discussão

14:30 – 14:45 “Profile of volatile compounds from pyrolytic liquids of sea-almond fruits and licuri coconut shell”

Pamella Christina Ortega de Oliveira (UFF)

14:45 – 14:50 Discussão

14:50 – 15:05 “Characterization of humic-like material extracted of process water from hydrothermal carbonization and interaction with Cu(II)”

Vinicius Sarracini Santos (IBILCE-UNESP)

- 15:05 – 15:10 Discussão
 15:10 – 15:25 “Síntese e caracterização de resina polimérica à base de tiuréia, formaldeído e melanina para aplicação ambiental”
Emerson dos Santos Freire (UFAL)
- 15:25 – 15:30 Discussão
 15:30 – 15:45 “Perfluorooctanesulfonic Acid (PFOS) Degradation by Heterogeneous Photocatalysis (TiO₂/UV) Using Factorial Design influence of meteorological conditions in their concentrations”
Rafaely Ximenes de Sousa (IQSC-USP)
- 15:45 – 15:50 Discussão
 15:50 – 16:10 Intervalo
 16:10 – 16:35 “Estudo da poluição aquática em área de floresta inundável próximo ao perímetro urbano: uso de diferentes indicadores de poluição”
Nívea Cristina Guedes Munin (UFAM)
- 16:35 – 16:40 Discussão
 16:40 – 16:55 “Hydrothermal synthesis of maghemite bauxite mining residues from Amazon Region”
Bruno Apolo Miranda Figueira (UFOPA)
- 16:55 – 17:00 Discussão
 17:00 – 17:15 “Microwave-enhance Advanced Oxidation Process: a different proposal to evaluate the microwave radiation effect”
Pedro Ivo Isá Barrenha (IQSC-USP)
- 17:15 – 17:20 Discussão
 17:20 – 17:45 “Matrix effects on the degradation of a mixture of pharmaceuticals by heterogeneous photocatalysis”
Alam Gustavo Trovó (UFU)
- 17:45 – 17:50 Discussão e Encerramento

QUÍMICA ANALÍTICA II (Sala 2 – Azaléia)

Coordenadores: *Márcia Foster Mesko* (UFPEl)

Wendell Karlos Tomazelli Coltro (UFG)

- 14:00 – 14:05 Abertura
Márcia Foster Mesko (UFPEl)
- 14:05 – 14:25 “O passado da química analítica brasileira”
Celio Pasquini (IQ-UNICAMP)
- 14:25 – 14:45 “Panorama atual da Química Analítica no Brasil”
Maria das Graças A. Korn (UFBA)
- 14:45 – 15:05 “Novos desafios da Química Analítica”
Renato Zanella (UFSM)
- 15:05 – 15:40 Discussão
 15:40 – 15:50 Encerramento e homenagens
 15:50 – 16:10 Intervalo
 16:10 – 16:35 “Label free assays for identification of enzyme ligands”
Quezia Bezerra Cass (UFSCar)
- 16:35 – 16:40 Discussão
 16:40 – 16:55 “Hydrocarbon semi-quantification in petroleum by comprehensive two-dimensional gas chromatography: a rapid assessment”
Dayane Magalhães Coutinho (UFRJ)
- 16:55 – 17:00 Discussão
 17:00 – 17:15 “Determinação Quantitativa de Corantes Artificiais em Alimentos por meio de Eletroforese em Gel e Detecção por Imagem Digital”
Maria Luíza de Andrade Rodrigues (UnB)
- 17:15 – 17:20 Discussão
 17:20 – 17:45 “Estratégias ambientalmente amigáveis para a determinação de contaminantes e parâmetros de qualidade de bebidas e alimentos”
Alex Domingues Batista (UFU)
- 17:45 – 17:50 Discussão e Encerramento

QUÍMICA INORGÂNICA II (Sala 4 – Bromélia)

Coordenadora: *Shirley Nakagaki Bastos* (UFPR)

14:00 – 14:25 “Development of Target Molecules: Applications in Sensors and Bioinorganic”

Izilda Aparecida Bagatin (UNIFESP-DIADEMA)

14:25 – 14:30 Discussão

14:30 – 14:45 “Síntese, estrutura cristalina e propriedades magnéticas de compostos tetra- e heptanucleares contendo ligante b-dicetonato e íons Coll e Nill”

Esther Saraiva Areas (UFF)

14:45 – 14:50 Discussão

14:50 – 15:05 “Ruthenium/nitrosyl/amino acids complexes inhibit MDA-MB-231 breast cancer tumor cell growth and migration”

Caio Cesar Candido (UNIFAL)

15:05 – 15:10 Discussão

15:10 – 15:25 “One synthesis, multiple materials: from molybdenum sulfide to oxide”

Ariane Schmidt dos Santos (UFPR)

15:25 – 15:30 Discussão

15:30 – 15:45 “Building up an hexacopper(II)-pyrazolato/oxamate magnetic complex with rare ethylenedioxiide (-OCH₂CH₂O-) as bridge between copper units”

Willian Xerxes Coelho Oliveira (UFMG)

15:45 – 15:50 Discussão

15:50 – 16:10 Intervalo

16:10 – 16:35 “Ligantes Aminofosfínicos: uma plataforma versátil para o desenvolvimento de metalodrogas de rutênio”

Márcio Peres de Araujo (UFPR)

16:35 – 16:40 Discussão

16:40 – 16:55 “Buffer-dependent and ligand effect in the nitrosyl-nitrite interconversion of ruthenium complexes”

Rafaella Rebecchi Rios (FCFRP-USP)

16:55 – 17:00 Discussão

17:00 – 17:15 “Synthesis, characterization and reactivity of nitrosyl complexes as vasodilators”

Iury Araújo Paz (UFC)

17:15 – 17:20 Discussão

17:20 – 17:45 “Química de Coordenação de Pirazolinias 1,3,5-trissubstituídas com Metais de Transição dos Grupos 10 e 11: Prospecção de Novos Materiais Luminescentes e Compostos Biologicamente Ativos”

Gleison Antonio Casagrande (UFMS)

17:45 – 17:50 Discussão e Encerramento

CATÁLISE (Sala 16 – Antúrio)

Coordenador: *Adonay Rodrigues Loiola* (UFC)

14:00 – 14:25 “Biodiesel obtained from catalysts based on Ca²⁺/serpentine”

Sara Silveira Vieira (UFMG)

14:25 – 14:30 Discussão

14:30 – 14:45 “High Energy Ball-Milling synthesis of CuO nanoparticles and its catalytic performance for nitroarenes reduction”

Aline Lucchesi Schio (UCS)

14:45 – 14:50 Discussão

14:50 – 15:05 “Investigating synergistic effect in gold nanoparticles and CeO₂ nanorods for photocatalytic production of imines”

Mauricio Samuel Homsí (IQUSP)

15:05 – 15:10 Discussão

- 15:10 – 15:25 “The challenge of reactions with sterically hindered terpenes: metathesis of β -pinene with dimethyl maleate”
Luciana Sarmento Fernandes (UFABC)
- 15:25 – 15:30 Discussão
- 15:30 – 15:45 “Supramolecular aggregates of cetyltrimethyl ammonium, polyacrylic acid and alkyl imidazole applied in dephosphorylation reactions”
William Demos (UFSC)
- 15:45 – 15:50 Discussão
- 15:50 – 16:10 Intervalo
- 16:10 – 16:35 “Kinetic evaluation of the effect of stabilizers on the catalytic activity of Ru-NPS in hydrogenation and nitroaromatic reduction reactions”
Laíze Zaramello (UFSC)
- 16:35 – 16:40 Discussão
- 16:40 – 16:55 “Au/TiO₂ Catalyst to CO₂ Conversion to Higher Alcohols”
Tomaz Neves Garcia (IQUSP)
- 16:55 – 17:00 Discussão
- 17:00 – 17:15 “Gold supported on strontium surface-enriched CoFe₂O₄ nanoparticles: a strategy for the selective oxidation of benzyl alcohol”
Laise Nayra dos Santos Pereira (UFPI)
- 17:15 – 17:20 Discussão
- 17:20 – 17:45 “Multicomponent Synthesis of Highly Stereoselective Pyrrolidine Derivatives”
Rafaely Nascimento Lima (UFSCar)
- 17:45 – 17:50 Discussão e Encerramento

ELETROQUÍMICA E ELETROANALÍTICA (Sala 8 – Lírio)

Coordenadora: *Susana Inés Córdoba de Torresi* (IQUSP)

- 14:00 – 14:25 “Evaluation of electrochemiluminescence activity of luminol functionalized AgNPs for application as ECL labeling”
Hideko Yamanaka (IQAr-UNESP)
- 14:25 – 14:30 Discussão
- 14:30 – 14:45 “Evaluation of green synthesized 1-benzyl-4-phenyl-1H-1,2,3-triazole as corrosion inhibitor for mild steel in acidic medium”
Caio Machado Fernandes (UFF)
- 14:45 – 14:50 Discussão
- 14:50 – 15:05 “Electrochemical characterization of PEDOT and PEDOT-AuNPs modified electrodes and its application as an impedimetric sensor”
Débora Paulus Soares (UFPR)
- 15:05 – 15:10 Discussão
- 15:10 – 15:25 “All Conductive Polymer based supercapacitors”
Thiago Takeshi Obana (IQUSP)
- 15:25 – 15:30 Discussão
- 15:30 – 15:45 “Synthesis and characterization of graphene by ultrasound method for the generation of H₂O₂”
Thays de Souza Lima (UNIFESP-Diadema)
- 15:45 – 15:50 Discussão
- 15:50 – 16:10 Intervalo
- 16:10 – 16:35 “Electro-Active Photonic Device for Bioanalytical Applications”
Klester dos Santos Souza (UFRGS)
- 16:35 – 16:40 Discussão
- 16:40 – 16:55 “Platform of antibody immobilization based on carboxymethylated cashew gum”
Airis Maria Araujo Melo (UECE)
- 16:55 – 17:00 Discussão

- 17:00 – 17:15 “Arrays of copper microelectrodes prepared from disposable electronic chips”
Giane Silva Higino (IPM)
- 17:15 – 17:20 Discussão
- 17:20 – 17:45 “CeO₂ nanowires as effective host of sulfur as cathode for lithium-sulfur batteries”
Susana Chauque (IQUSP)
- 17:45 – 17:50 Discussão e Encerramento

QUÍMICA DE MATERIAIS II (Sala 5 – Tulipa)

Coordenadora: Ana Maria Pires (FCT-UNESP)

- 14:00 – 14:25 “Effect of morphology in the solution of amyloidogenic model peptides as asymmetric catalysts for aldol reactions”
Wendel Andrade Alves (UFABC)
- 14:25 – 14:30 Discussão
- 14:30 – 14:45 “Synthesis and Characterization of Polymeric Carbon Nitrides (PCNs) Doped with Sulfur”
Ingrid Fernandes Silva (UFMG)
- 14:45 – 14:50 Discussão
- 14:50 – 15:05 “Obtaining silica from freshwater sponges (“cauxi”) of the Tapajós river (Amazon region)”
Nayara Aparecida Fonseca Couto (UFOPA)
- 15:05 – 15:10 Discussão
- 15:10 – 15:25 “Facile one-step electrodeposition fabrication of amorphous MoS₂ films for hydrogen evolution reaction”
Marina Medina da Silva (UFSCar)
- 15:25 – 15:30 Discussão
- 15:30 – 15:45 “Multicolor Emission through Bi-directional Energy Transfer in Nd³⁺ - Sensitized Gd³⁺ -based Core/Shell/Shell Upconverting Nanoparticles”
York Estewin Serge Correales (IQAr-UNESP)
- 15:45 – 15:50 Discussão
- 15:50 – 16:10 Intervalo
- 16:10 – 16:35 “Solar cell of a new hybrid MWCNT@P3HT: construction and characterization”
Hallen Daniel Rezende Calado (UFMG)
- 16:35 – 16:40 Discussão
- 16:40 – 16:55 “Synthesis of mesoporous silica of type MCM - 41 functionalized with amines for CO₂ adsorption”
Luciene da Silva Castro (UFMG)
- 16:55 – 17:00 Discussão
- 17:00 – 17:15 “Development of new compounds derived from the 1-methyl-1Hbenzo[d][1,2,3]triazole center for application as OLED carrier layers”
Nícolas Oliveira Decarli (UFSC)
- 17:15 – 17:20 Discussão
- 17:20 – 17:45 “Highly ordered surface of electrospun PCL fiber decorated with a bioactive protein (BMP-7) for bone tissue engineering”
Elayaraja Kolanthai (IQUSP)
- 17:45 – 17:50 Discussão e Encerramento

QUÍMICA MEDICINAL E QUÍMICA BIOLÓGICA (Sala 9 – Girassol)

Coordenadora: Carolina Horta Andrade (UFG)

- 14:00 – 14:25 “Identificação de Protótipos N-Sulfonilidrazônicos Inibidores de Serina-Treonina Cinases”
Carlos Alberto Manssour Fraga (UFRJ)

- 14:25 – 14:30 Discussão
- 14:30 – 14:45 “Mechanism-based design of anti-virulence drugs against *Pseudomonas aeruginosa*”
Thamires Quadros Froes (UFBA)
- 14:45 – 14:50 Discussão
- 14:50 – 15:05 “Design, Synthesis and Antiparasitic Effects of New Piperine-Nitroimidazole Hybrids”
Afonso Santine Magalhães Mesquita Velez (UFRRJ)
- 15:05 – 15:10 Discussão
- 15:10 – 15:25 “Halogenation as a strategy to improve antiplasmodial activity of new 3-alkylpyridine marine alkaloids”
Camila de Souza Barbosa (UFSJ)
- 15:25 – 15:30 Discussão
- 15:30 – 15:45 “Synthesis and Pharmacological evaluation of pomalidomide derivatives useful to treat sickle cell anemia”
Thais Regina Ferreira de Melo (FCFRP-USP)
- 15:45 – 15:50 Discussão
- 15:50 – 16:10 Intervalo
- 16:10 – 16:35 “NuBBE Database, a diverse source of natural products for drug design”
Marília Valli (IQ-UNESP)
- 16:35 – 16:40 Discussão
- 16:40 – 16:55 “Synthesis, cholinesterase inhibition and molecular modeling study of lophine-benzylamine hybrids”
Viktor Saraiva Câmara (UFRGS)
- 16:55 – 17:00 Discussão
- 17:00 – 17:15 “New hybrid trifluoromethylquinolines as antiplasmodium agents”
Marília Oliva Gandi (FIOCRUZ)
- 17:15 – 17:20 Discussão
- 17:20 – 17:45 “NBOMes/NBOHs: Synthesis and Studies on their Interactions with HSA/DNA”
Angelo de Fatima (UFMG)
- 17:45 – 17:50 Discussão e Encerramento

QUÍMICA ORGÂNICA II (Sala 6 – Hortência)

Coordenadora: *Fernanda Andreia Rosa* (UEM)

- 14:00 – 14:25 “ $1\text{ C} + 1\text{ N} + 1\text{ O} + 3\text{ H} = \text{Formamida}$. O que estamos fazendo com seus átomos?”
Leandro Helgueira de Andrade (IQUSP)
- 14:25 – 14:30 Discussão
- 14:30 – 14:45 “Imido-yl-substituted sulfoxonium ylides as metal-carbene precursors in C-H functionalization reactions for the synthesis of indoles”
Clarice Alves Dale Caiuby (IQSC-USP)
- 14:45 – 14:50 Discussão
- 14:50 – 15:05 “Synthesis of naphthyridines with potential tubulin inhibitory activity”
Beatriz Moura Donolato (UNICAMP)
- 15:05 – 15:10 Discussão
- 15:10 – 15:25 “Synthesis of 1,2,3-triazole derivatives of 4,4'-dihydroxybenzophenone and evaluation of their elastase inhibitory”
Bianca Lana de Sousa (UFV)
- 15:25 – 15:30 Discussão
- 15:30 – 15:45 “[3,3]-Sigmatropic rearrangement of allylaryl ether followed by [3+2]-1,3-dipolar cycloaddition applied to the synthesis of liquid crystals”
Luma Fritsch (UFRGS)
- 15:45 – 15:50 Discussão

- 15:50 – 16:10 Intervalo
- 16:10 – 16:35 “Nuclear Magnetic Resonance for Reaction Monitoring”
Claudio Francisco Tormena (IQ-UNICAMP)
- 16:35 – 16:40 Discussão
- 16:40 – 16:55 “Eletrossíntese de selenetos de diorganoíla”
Anne Gabrielle Meirinho (UDESC)
- 16:55 – 17:00 Discussão
- 17:00 – 17:15 “Enantioselective synthesis of endocyclic enelactams via Heck-Matsuda reactions”
Ingedy Bastos Braga (UFV)
- 17:15 – 17:20 Discussão
- 17:20 – 17:45 “Synthesis of chalcogen-functionalized heterocycles and their applications as optical sensors and OLEDs”
Paulo Henrique Schneider (UFRGS)
- 17:45 – 17:50 Discussão e Encerramento

QUÍMICA DE PRODUTOS NATURAIS II (Sala 7 – Jasmim)

- Coordenador: *Emmanoel Vilaça Costa* (UFAM)
- 14:00 – 14:25 “Estudos químicos e biológicos combinados para identificação e compreensão de cultivares resistentes e suscetíveis a insetos pragas”
Moacir Rossi Forim (UFSCar)
- 14:25 – 14:30 Discussão
- 14:30 – 14:45 “Chemical characterization by LC-MS/MS and antimicrobial activity on crude extracts of *Humiria balsamifera* (Aubl)”
Antonio José Cantanhede Filho (IFMA)
- 14:45 – 14:50 Discussão
- 14:50 – 15:05 “Desenvolvimento de método por CLAE-DAD para comparação do perfil químico de *Senna trachypus* H & B de cinco localidades do Ceará”
Maria Gleiziane Araújo Franca (UFC)
- 15:05 – 15:10 Discussão
- 15:10 – 15:25 “Chemical and biological study of the endophytic fungus *Anthostomella brabeji* (Xylariaceae), cultivated in the presence of metallic elicitors”
Giulia Polinário (IQAr-UNESP)
- 15:25 – 15:30 Discussão
- 15:30 – 15:45 “Comparison of biomimetic oxidation of isoorientin and orientin using Jacobsen’s catalyst and [Mn (3MeOSalen)Cl] as a novel catalyst”
Leandro de Santis Ferreira (UFRN)
- 15:45 – 15:50 Discussão
- 15:50 – 16:10 Intervalo
- 16:10 – 16:35 “Acetylcholinesterase and beta-secretase co-immobilized in agarose beads: development of off-line assay for ligand screening”
Carmen Lucia Cardoso (FFCLRP-USP)
- 16:35 – 16:40 Discussão
- 16:40 – 16:55 “Compostos bioativos de fungo da Amazônia Paraense”
Andrey Moacir do Rosario Marinho (UFPA)
- 16:55 – 17:00 Discussão
- 17:00 – 17:15 “Chemical structure of a partially 3-O-methylated heterogalactan from medicinal mushroom *Pholiota nameko*”
Letícia Silva de Mello (UFG-Catalão)
- 17:15 – 17:20 Discussão
- 17:20 – 17:45 “Evaluation of the cytotoxic activity and investigation of the chemical profile of fungi derived from the ascidian *Aplidium accarense*”
Ana Helena Januário (UNIFRAN)
- 17:45 – 17:50 Discussão e Encerramento

FOTOQUÍMICA (Sala 17 – Gérbera)

Coordenador: *Erick Leite Bastos* (IQUSP)

- 14:00 – 14:25 “Silk fibroin hydrogels for potential applications in photodynamic therapy”
Jose Eduardo Ulloa Rojas (FSA)
- 14:25 – 14:30 Discussão
- 14:30 – 14:45 “Azobenzene Dyad with Selective Photoisomerization: An Example of Photocontrolled Molecular Bit”
Adrian Kreuz (IQUSP)
- 14:45 – 14:50 Discussão
- 14:50 – 15:05 “Photooxidation behavior of Hantzsch Ester in aqueous media and envisioned restrain on macrocyclic complexation”
Giovana Schmitt Wecker (UFSC)
- 15:05 – 15:10 Discussão
- 15:10 – 15:25 “Síntese e caracterização de um novo complexo polipiridínico de rutênio(II) derivado da 1-metil-indol-2,3-diona com alta luminescência”
Pedro Henrique Luciano da Silva (UFF)
- 15:25 – 15:30 Discussão
- 15:30 – 15:45 “Study of interaction between liposomes and porphyrins functionalized with L,L-diphenylalanine for photodynamic therapy”
Sandra Valeria Vassiliades (UFABC)
- 15:45 – 15:50 Discussão
- 15:50 – 16:10 Intervalo
- 16:10 – 16:35 “Aspectos Estruturais no Comportamento Foto-Switch de Moléculas Contendo Azobenzenos”
Gianluca Camillo Azzellini (IQUSP)
- 16:35 – 16:40 Discussão
- 16:40 – 16:55 “dipBeet: a nature-inspired water-soluble red-orange dye”
Rayani Almeida de Lima (UFABC)
- 16:55 – 17:00 Discussão
- 17:00 – 17:15 “Synthesis and characterization of a novel Ru(II) complex containing a dipyrido[3,2-a:2',3'-c]phenazine(dppz)-coumarin conjugate as ligand”
Mikaelly Oliveira Batista de Sousa (UFF)
- 17:15 – 17:20 Discussão
- 17:20 – 17:45 “Synthesis and characterization of gold nanostructures and porphyrins functionalized with L,L-diphenylalanine for photodynamic therapy”
Marcella Alvisi Reis (UFABC)
- 17:45 – 17:50 Discussão e Encerramento

18:00-20:20 SESSÃO DE PAINÉIS II (Pavilhão A)

Atenção: os painéis deverão ser fixados no período das 09:30 às 11:30 e retirados a partir das 15:00 até às 19:00.

| | |
|-----------------|-----------------|
| AMB-045 a FINAL | ANA-064 a FINAL |
| BEA-011 a FINAL | BIO-006 a FINAL |
| CAT-021 a FINAL | EDU-037 a FINAL |
| ELE-029 a FINAL | EST-001 a FINAL |
| FIS-018 a FINAL | FOT-007 a FINAL |
| INO-052 a FINAL | MAT-073 a FINAL |
| MED-031 a FINAL | ORG-091 a FINAL |
| QPN-055 a FINAL | QVE-011 a FINAL |
| TEC-001 a FINAL | TEO-011 a FINAL |

20:30-21:30 ASSEMBLEIA GERAL (Sala 1 – Orquídea)

21:30 COQUETEL DE ENCERRAMENTO

Expositores



AGILENT Technologies Brasil Ltda.
www.agilent.com



Altmann S.A. Importação e Comércio
www.altmann.com.br/



AuTec - Equipamentos de Laboratório Ltda.
www.autech.com.br/



Bruker do Brasil Com. Rep. de Prod. Cient.
www.bruker.com



BÜCHI Brasil Ltda.
www.buchi.com/en/worldwide/brasil



dpUNION Instrumentação Analítica e Científica Ltda
dpunion.com.br/



HORIBA Scientific
www.horiba.com/br/scientific/



Maxcrom Instrumentos Científicos Ltda.
allcrom.com.br



MBRAUN Inc.
www.mbraun.com



www.merckmillipore.com/br/pt
www.sigmaaldrich.com



METROHM Pensalab Instrumentação Analítica Ltda.
www.metrohm.com.br/



NOVA ANALÍTICA Imp. e Exp. Ltda.
www.analiticaweb.com.br



Peak Comércio de Instrumentos Científicos Ltda.
www.peakscientific.com/



PerkinElmer do Brasil Ltda.
www.perkinelmer.com.br/



Quantum Design International - Latin America
qd-latam.com



Renishaw Latino Americana Ltda.
www.renishaw.com/



Royal Society of Chemistry, RSC
www.rsc.org



Shimadzu do Brasil Comércio Ltda.
www.shimadzu.com.br



Superlab Instrumentação Analítica Ltda.
www.superlab.com.br/



Thermo Fisher Scientific Brasil Instrumentos de Processo Ltda.
www.thermofisher.com



THE SCIENCE OF WHAT'S POSSIBLE.[®]
Waters Comercial Ltda.
www.waters.com/waters/home.htm



Pensalab Equipamentos Industriais S.A.
www.pensalab.com.br/

- AMB-001** Evaluation of the behavior of asbestos tiles from different environments. Aquino, L. G. S. A. (UTFPR); Schnitzler, D. C. S. (UTFPR).
- AMB-002** Evaluation of the presence of pesticides trifluralin, atrazine, alachlor and chlorpyrifos by GC-MS/MS in soil samples from Contestado Settlement - Lapa - PR. Morro, F. G. (UTFPR); Schnitzler, D. C. (UTFPR).
- AMB-003** Synthesis and characterization of Octahedral Molecular Sieve (Rb-OMS2) using Mn mining Residues from Amazon Region (Brazil). Gomes, H. I. O. (UFOPA); Bastos, K. F. (UFOPA); Barreto, I. A. R. (UFOPA); Lavra, T. C. C. (IFMA); Figueira, B. A. M. (UFOPA); Costa, M. L. (UFPA).
- AMB-004** Matrix effects on the degradation of a mixture of pharmaceuticals by heterogeneous photocatalysis. Paniagua, C. E. S. (UFU); Gonçalves, B. R. (UFU); Marson, E. O. (UFU); Amildon Ricardo, I. (UFU); Paiva, V. A. B. (UFU); Trovó, A. G. (UFU).
- AMB-005** Pesticide determination by cloud point extraction. Sousa, P. A. R. (UFG-Catalão); Lima Neto, J. L. (UFG-Catalão); Tavares, L. Q. (UFG-Catalão); Junior, M. G. (UFG-Catalão); Coelho, L. M. (UFG-Catalão).
- AMB-006** Hydrothermal synthesis of maghemite from bauxite mining residues from Amazon Region. Nascimento, R. S. (UFOPA); Marinho, K. L. L. (UFOPA); Figueira, B. A. M. (UFOPA); Barreto, I. A. R. (UFPA); da Costa, M. L. (UFPA).
- AMB-007** Influência da salinidade na complexação de arsenito por substâncias húmicas de turfa. ANUNCIACÃO, D. S. (UFAL); COSTA, A. S. P. N. (UFAL); BOTERO, W. G. (UFAL); SANTOS, J. C. C. (UFAL).
- AMB-008** Extração sequencial e especiação química de Arsênio em amostras de sedimentos de lagoas alcalinas da Nhecolândia - Pantanal (MS). Souza, A. F. (UNICAMP); Fostier, A. H. (UNICAMP); Hernández, A. H. (UNICAMP).
- AMB-009** Effect of Cu²⁺ in CuMgFe-CO₃ layered double hydroxide as catalysts in the degradation of the antibiotic sulfatiazole in heterogeneous photo Fenton process. Costa, N. M. (IQAr-UNESP); Gonçalves, R. G. L. (IQAr-UNESP); Mantilla, H. D. R. (IQAr-UNESP); Santilli, C. V. (IQAr-UNESP); Nogueira, R. F. P. (IQAr-UNESP).
- AMB-010** Herbicide resistance in Brazil: status, impacts and future perspectives. Alcántara-de la Cruz, R. (UFSCar); Amaral, G. S. (UFSCar); Fernandes da Silva, M. F. G. (UFSCar).
- AMB-011** Development of a method of quantification of microcystin in fresh water using Chemical modified nodularins as internal standard. Carvalho, F. G. (FCF-USP); Dörr, F. A. (FCF-USP); Dörr, F. (FCF-USP); Junior, E. P. (FCF-USP).
- AMB-012** pH na água de chuva de uma região canavieira desde 2004. Florêncio, J. (FFCLRP-USP); Reis, D. C. O. (FFCLRP-USP); Campos, M. L. A. M. (FFCLRP-USP).
- AMB-013** Emerging contaminants in membrane bioreactor (MBR) wastewater treatment & reuse plant as performance indicators. Machado, R. G. (UFSCar); Ferreira, J. S. (UFSCar); Grosselli, G. M. (UFSCar); Urban, R. C. (UFSCar); Fadini, P. S. (UFSCar).
- AMB-014** Environmental assessment of impacted areas by metal and oxidative stress biomarker determinations in *Brillantaisia lamium* (Nees) Benth. Pereira, L. H. S. S. (PUC-RIO); Rocha, R. C. C. (PUC-RIO); Saint' Pierre, T. D. (PUC-RIO); Hauser-Davis, R. A. (FIOCRUZ); Nudi, A. H. (PUC-RIO); Gioda, A. (PUC-RIO).
- AMB-015** Thermal stability of Mg-buserite-type material using Mn mining residues from Carajás Province (Amazon Region). Marinho, K. L. L. (UFOPA); Nascimento, R. S. (UFOPA); Figueira, B. A. M. (UFOPA); Lavra, T. C. C. (UFMA); Mercury, J. M. R. (UFMA).
- AMB-016** Study of Biosorption Capacity of Banana Peels for Removal of Cationic Dye from Aqueous Medium using Monitoring by UV-Vis Spectroscopy. Silva, C. F. (IFGoiano-Campus Ceres); Rodrigues, L. V. S. (IFGoiano-Campus Ceres); Marques, F. A. (IFGoiano-Campus Ceres).
- AMB-017** Resíduos Lignocelulósicos da Bananicultura: Uma Revisão Sobre os Processos Químicos de Extração da Celulose. Pereira, N. R. L. (UNISUL); dos Anjos, F. E. (IFSC-Campus Florianópolis); Magnago, R. F. (UNISUL).
- AMB-018** Potassium recovery in biologically treated vinhoto. CARVALHO, T. N. (PUC-MG); PATTO, B. L. (PUC-MG); LEBRON, Y. A. R. (PUC-MG); MOREIRA, V. R. (PUC-MG); SANTO, L. V. S. (PUC-MG).
- AMB-019** Advanced Oxidation Processes (AOP) for treatment of tannery wastewater employing hydrogen peroxide 70%. Souza, E. A. (UFBA); Silva, L. A. (UFBA).
- AMB-020** Treatment of aqueous effluents of the leather industry by adsorption. De Oliveira, L. H. (UNOESC); Denbinski, L. G. (UNOESC); Mantovani, A. (UNOESC).
- AMB-021** Avaliação sazonal de águas subterrâneas como ferramenta na prospecção mineral. Lima, W. M. (IFGoiano-Campus Ceres); Fortes, G. A. C. (IFGoiano-Campus Ipameri); Costa, D. P. (IFG - Morrinhos).
- AMB-022** Investigation of the Availability of Elements in Coal Fly Ashes using EDTA Extraction and the ICP-MS Technique. Arpini, B. (UFRGS); Ferrão, M. F. (UFRGS); Maia, S. M. (UFRGS).
- AMB-023** Degradação do paraoxon pelo aminoácido L-cisteína. Cascarano, M. de M. (IBILCE-UNESP); Gonçalves, B. O. (IBILCE-UNESP); Pereira, L. F. (IBILCE-UNESP); Lima, M. F. (IBILCE-UNESP).
- AMB-024** Influência da Granulometria da Zeólita Clinoptilolita na Adsorção dos Íons Cu²⁺ e Zn²⁺. Fieszt, L. (UNIVALI); Andrade, E. (UNIVALI); Moraes, B. M. (UNIVALI); Anjos dos, B. (UNIVALI); Batista, G. M. (UNIVALI); Biavatti, M. L. (UNIVALI); Rodrigues, C. A. (UNIVALI); Machado, Marina da S. (UNIVALI).
- AMB-025** Remoção de Níquel de Efluentes Aquosos Sintéticos com Mordenita. Andrade de, E. (UNIVALI); Fieszt, L. (UNIVALI); Moraes, B. M. (UNIVALI); Batista, G. M. (UNIVALI); Biavatti, M. L. (UNIVALI); Rodrigues, C. A. (UNIVALI); Machado, M. da S. (UNIVALI).

- AMB-026** Utilização de biomassa de maracujá amarelo (*Passiflora edulis f. flavicarpa*) in natura como bioadsorvente de Cd e Pb em água. CAVALCANTE, T. Q. (UEFS); MELO, M. O. (UEFS)
- AMB-027** Identification, Structure Elucidation and Toxicity evaluation of Degradation By-Products of Fipronil in Chlorination Processes. Santo, D. R. E. (UFOP); Barros, A. L. C. (UFOP); Afonso, R. J. C. F. (UFOP); Domanski, T. (UFOP)
- AMB-028** Methylene Blue Adsorption in soil and humus - kinetic study and "spot" test. Costa, E. (UNICENTRO); Oliveira, I. K. P. (UNICENTRO); Caetano, I. K. (UNICENTRO)
- AMB-029** Perfluorooctanesulfonic Acid (PFOS) Degradation by Heterogeneous Photocatalysis (TiO₂/UV) Using Factorial Design. Furtado, R. X. S. (IQSC-USP); Zaiat, M. (EESC-USP); Azevedo, E. B. (IQSC-USP)
- AMB-030** Synthesis and characterization of analcime-type material without metakaolinization. Corrêa, M. C. N. (UFOPA); Pereira, S. A. C. (UFOPA); Figueira, B. A. M. (UFOPA); Nascimento, R. S. (UFOPA); Lavra, T. C. C. (IFMA); Mercury, J. M. R. (IFMA)
- AMB-031** Adsorção de íon amônio em efluentes aquosos sintéticos com zeólita Clinoptilolita. Sparenberg, D. D. (UNIVALI); Brandellero, M. V. (UNIVALI); Delavy, V. C. T. (UNIVALI); Marques, J. R. (UNIVALI); Fonseca, R. S. (UNIVALI); Batista, G. M. (UNIVALI); Rodrigues, C. A. (UNIVALI); Machado, M. S. (UNIVALI)
- AMB-032** Removal of Environmental Pharmaceutical Pollutants by an Ureasil-siloxane-PEO Hybrid. Andrade, G. P. (UNIFRAN); Araujo, M. D. (UNIFRAN); Marinho, A. H. O. (UNIFRAN); Jesus, N. A. M. (UNIFRAN); Molina, E. F. (UNIFRAN)
- AMB-033** Interactions of benzene and toluene with other pollutants and influence of meteorological conditions in their concentrations. Sanchez, D. Y. (IAG-USP); Fornaro, A. (IAG-USP)
- AMB-034** Profile of volatile compounds from pyrolytic liquids of sea-almond fruits and licuri coconut shell. Oliveira, P. C. O. (UFF); Romeiro, G. A. (UFF); Veloso, M. C. C. (UFF)
- AMB-035** Production of activated biochars from licuri coconut shell and their application as an adsorbent of isoniazid. Peixoto, B. S. (UFF); Mota, L. S. O. (UFF); Veloso, M. C. C. (UFF); Romeiro, G. A. (UFF); Moraes, M. C. (UFF)
- AMB-036** Use of sanitary landfill effluent for *Scenedesmus* sp. cultivation combined with non-thermal plasma to induce lipid production. Cubas, A. L. V. (); Souza, L. (UNISUL); Lima, A. S. (UNISUL); Matos, A. P. (UNISUL); Moecke, E. H. S. (UNISUL)
- AMB-037** Reverse micellar extraction of dyes based on fatty acids and reusable organic solvent. Bukman, L. (UEM); Souza, V. R. (UEM); Fernandes, N. R. C. (UEM); Caetano, W. (UEM); Batistela, V. R. (UEM); Hioka, N. (UEM)
- AMB-038** Natural thallium in the West region of Bahia (Brazil): a risk to geoenvironmental health?. Leite, O. D. (UTFPR); Santos, J. L. O. (UFOP); De Jesus, D. S. (IFBA); dos Santos, A. M. P. (UFBA); Janoni, C. R. (UFES); Flores, E. L. M. (UTFPR)
- AMB-039** Fe speciation in seawater from the Guaratuba Bay. Tereski, L. (UFPR); Sierpinski, S. F. D. (UFPR); Grassi, M. T. (UFPR)
- AMB-040** Characterization of volatile organic compounds in the city of Nilópolis (Rio de Janeiro) and the protected neighboring area of Gericinó. Arbilla, G. (UFRJ); André, M. (UFRJ); Silva, C. M. (UVA)
- AMB-041** Polycyclic Aromatic Hydrocarbons (PAHs) in soils of Awotan-Asunle (Nigeria) and São Paulo (Brazil): concentrations, sources and toxicity. Parra, Y. J. (IQUSP); Lima, P. A. A. A. (IGc-USP); Caumo, S. E. (IQUSP); Oyebayo, O. O. (University of Ibadan); Morinikeji, O. A. (University of Ibadan); Vasconcellos, P. C. (IQUSP)
- AMB-042** Characterization of ozone episodes and ozone precursors in Irajá District, Rio de Janeiro. Silva, C. M. (UVA); Mendes, D. (UVA); André, M. (UFRJ); Arbilla, G. (UFRJ)
- AMB-043** Síntese e caracterização de resina polimérica à base de tiourea, formaldeído e melamina para aplicação ambiental. FREIRE, E. S. (UFAL); ANUNCIACÃO, D. S. (UFAL)
- AMB-044** Use of life cycle assessment (LCA) for the development of sustainable synthesis of metal organic frameworks- MOFs to capture CO₂. Neto, J. M. B. (UFRJ); Souza, D. P. (UFRJ); Miranda, J. L. (UFRJ)
- AMB-045** Black Carbon (BC) Associated to Fine Particulate Matter (PM_{2.5}) in Ambient Air of a Brazilian Medium-Sized City. SOLCI, M. C. (UEL); SANTOS, D. R. F. (UEL); COSTA, J. M. S. (UEL); SILVA JUNIOR, C. R. (UEL); MANTOVANI, I. (UEL); PINTO, J. P. (UEL)
- AMB-046** Ultrasound and disposable pipette assisted extraction techniques for the determination of fecal contaminants in sediments by GC-MS. Morelli, D. C. (UFSC); Madureira, L. A. S. (UFSC)
- AMB-047** Tratamento de água residuária de lavanderia: avaliação da adsorção de surfactante aniônico em óxido de grafite. Corona, R. B. (UFES); Silva, M. (UFES); Pereira, L. B. (UFES); Santos, F. D. (UFES); Leite, J. S. D. (UFES); Sad, C. M. S. (UFES); Filgueiras, P. R. (UFES); Castro, E. V. R. (UFES)
- AMB-048** Speciation of Antimony in the Natural Waters: Development of a Device of the Diffusive Gradients in Thin Film using Biomass as Binding Phase. Anjos dos, V. E. (UEPG); Silva da, R. M. (UEPG); Viana, A. G. (UEPG)
- AMB-049** Avaliação da contaminação antropogênica por esteróis em sedimentos do Rio Capibaribe nos municípios de Santa Cruz e Toritama/PE. Gomes, B. R. S. (UFRPE); França, R. S. (UFAM); Val, A. L. (INPA); Bataglion, G. A. (UFAM); Moraes, A. S. (UFRPE); Santos, J. M. (UFRPE)
- AMB-050** Water and sediment recovery from water-based drilling fluid waste. Pereira, L. B. (UFES); Sad, C. M. S. (UFES); Silva da, M. (UFES); Santos dos, F. D. (UFES); Corona, R. B. (UFES); Leite, J. S. D. (UFES); Oliveira de, L. S. (UFES); Castro de, E. V. R. (UFES); Filgueiras, P. R. (UFES); Lacerda Jr., V. (UFES)
- AMB-051** Application of the rotational composite central design in the removal of hexavalent chromium by sugarcane straw. Salata, C. R. (FCAV-UNESP); Vicentini, T. S. (FCAV-UNESP); Pereira, G. T. (FCAV-UNESP); Saran, L. M. (FCAV-UNESP)

AMB-052 Deposição seca e úmida de nitrogênio reativo em Ribeirão Preto, SP. Reis, D. C. O. (FFCLRP-USP); Souza, M. A. (UNESP-Bauru); Forti, M. C. (INPE); Pacheco, F. S. (INPE); Campos, M. L. A. M. (FFCLRP-USP)

AMB-053 O papel das águas superficiais como fonte ou sumidouro de etanol, peróxido de hidrogênio e acetaldeído presentes na baixa troposfera. Scaramboni, C. (FFCLRP-USP); Campos, M. L. A. M. (FFCLRP-USP)

AMB-054 Magnetite nanoparticles functionalized with bilayer of amphiphilic anionic molecules for the removal of agrochemicals from water. Alves, D. S. (UFG); Lima, E. C. D. (UFG)

AMB-055 Method of ultra deep ore deposits detection. Guarieiro, L. L. N. (SENAI CIMATEC); Figueirêdo, I. S. (SENAI CIMATEC); Carvalho, M. P. (SENAI CIMATEC); Anjos dos, J. P. (SENAI CIMATEC); Fruchting, A. (SENAI CIMATEC); Baia, F. H. (SENAI CIMATEC)

AMB-056 Characterization of humic-like material extracted of process water from hydrothermal carbonization and interaction with Cu(II). Santos, V. S. (IBILCE-UNESP); Constantino, I. C. (IBILCE-UNESP); Bisinoti, M. C. (IBILCE-UNESP); Moreira, A. B. (IBILCE-UNESP); Ferreira, O. P. (UFC)

AMB-057 Interactions between organic ligands and Copper (II) studied by Time-Resolved Fluorescence and fluorescence quenching. SANTOS, J. V. (IBILCE-UNESP); FREGOLENTE, L. G. (IBILCE-UNESP); MOUNIER, S. (UTLN); HAJJJOUL, H. (UTLN); MOREIRA, A. B. (IBILCE-UNESP); FERREIRA, O. P. (UFC); BISINOTI, M. C. (IBILCE-UNESP)

AMB-058 Optimization the use of alkaline, acid, ionic liquid and oxidative pretreatments for conversion coconut residues in fermentable sugars. Rambo, M. K. D (UFT); Melo, P. M (UFT); Rambo, M. C. D (IFTO); Junior, C. C. S. (UFT)

AMB-059 Properties of hydrochar obtained from byproducts of the sugarcane industry: an evaluation of the use of phosphoric acid. Bento, L. R. (IBILCE-UNESP); Melo, C. A. (IBILCE-UNESP); Ferreira, O. P. (UFC); Moreira, A. B. (IBILCE-UNESP); Piccolo, A. (UNINA); Spaccini, R. (UNINA); Bisinoti, M. C. (IBILCE-UNESP)

AMB-060 Citrus peel and rice husk as biomass for solid biofuel. Magnago, R. F (UNISUL); Ezirio, M. J. A. (UNISUL); Saciloto, V. G. (UNISUL); Costa, S. C. (UNISUL)

AMB-061 DETERMINAÇÃO DE HIDROXILAMINA NA REAÇÃO DE REDUÇÃO CATALÍTICA DO NITRATO EM ÁGUA POR HPLC-DAD. Martins, V. G. (INT); Fraga, M. A. (INT); Vargas, T. S. (INT)

AMB-062 µGAS-MONITOR: A portable and low-cost 3D printed platform for in situ air quality monitoring using µPAD's coupled to smartphones. Freitas, C. S (UFU); Fernandes, G. M (UFU); Batista, A. D. (UFU); Petrucci, J. F. S. (UFU)

AMB-063 Use of two Tillandsia species as air quality biomonitors at an important Brazilian highway. Beringui, K. (PUC-RIO); Monteiro, F. (PUC-RIO); Perreira, L. H. S. S (PUC-RIO); Hauser-Davis, R. (FIOCRUZ); Maia, L. F. P. G. (UFRJ); Gioda, A. (PUC-RIO)

AMB-064 Spectrophotometric and spectrofluorimetric determination of atmospheric formaldehyde with 7-amino-4-hydroxynaphthalene-2-sulfonic acid. Neto, J. L. A. (IQAr-UNESP); Petrucci, J. F. S. (UFU); Cardoso, A. A. (IQAr-UNESP)

AMB-065 Seriam as Terras Pretas de índio marcadores ambientais da Idade Meghalayan ou da Época do Antropoceno?. Soares, R. S. (Inea-RJ); Maddock, J. E. L. M. (UFF); Campos, D. V. B. C. (Embrapa Arroz e Feijão); Madari, B. E. M. (Embrapa Arroz e Feijão); Machado, P. L. O. M. (Embrapa Arroz e Feijão); Santelli, R. E. S. (UFRJ)

AMB-066 Remoção de Corantes em Sistema Aquoso Binário Utilizando Biossorvente obtido a partir da Salvinia sp. Silva, C. V. O. (UFRJ); Stapelfeldt, D. M. A. (UFRJ)

AMB-067 Microwave-Enhanced Advanced Oxidation Processes: A Different Proposal to Evaluate the Microwave Radiation Effect. Barrenha, P. I. I. (IQSC-USP); Azevedo, E. B. (IQSC-USP)

AMB-068 Estudo da poluição aquáticas em área de floresta inundável próximo ao perímetro urbano: uso de diferentes indicadores de poluição. Munin, N. C. G (UFAM); Leonel, F. B (UFAM); Sales, K. R. B. (UFAM); Ramos, A. M. (UFAM)

AMB-069 Continuous methylene blue biosorption onto Fucus vesiculosus. Lebron, Y. A. R. (PUC-MG); Moreira, V. R. (PUC-MG); Patto, B. L. (PUC-MG); Carvalho, T. N. (PUC-MG); Santos, L. V. S. (PUC-MG)

AMB-070 Fitorremediação: um estudo da potencialidade da Canavalia ensiformis na descontaminação de solos com chumbo. Silva, J. M. G. (UTFPR); Beltrame, A. C. F. (UTFPR); Bertozzi, J. (UTFPR); Stevanato, A. (UTFPR)

AMB-071 Carbon/iron composites prepared from activated carbon and iron mining waste for the removal of emerging contaminant. Rios, R. D. F. (UFMG); Bueno, P. J. B. (UFMG); Moura, F. C. C. (UFMG)

AMB-072 Adsorção de Cd²⁺ em hidrogéis constituídos de quitosana: estudos dos modelos de isotermas não lineares. Vieira, T. (UDESC); Taffarel Cesco, C. (UDESC); Sghedoni Artifon, S. E. (UDESC); Paulino, A. T. (UDESC)

AMB-073 Investigation of changes in the polyphenolic profile of Lycopersicon esculentum (tomato) leaves caused by lead contamination. Mesquita, T. L. (UFRJ); Curti, M. V. (UFRJ); Paula, C. E. R. (UFRJ); Barboza, R. S. (UFRJ)

AMB-074 A new and simple visual technique based on passive sampler and reaction with formation of dye for determination of H₂S in ambient air. Catai, M. A (IQAr-UNESP); Cardoso, A. A (IQAr-UNESP); Rocha, C. G (IQAr-UNESP)

AMB-075 Evaluation of 2,4 D drift occurrence through foliar determination of the herbicide and metabolites by LC-MS/MS and GC-MS/MS. Prestes, O. D. (UFMS); Ribeiro, L. C. (UFMS); Santos, P. J. (UFMS); Kemmerich, M. (UFPEl); Demarco, M. (UFMS); Adaime, M. B. (UFMS); Zanella, R. (UFMS)

AMB-076 A highly sensitive electrochemical method for the determination of bioavailable lead in atmospheric aerosol. Silva Neto, H. A. (UFG); Cardoso, T. M. G. (UFG); Coltro, W. K. T. (UFG); Urban, R. C. (UFSCar)

- AMB-077** **Estudo da qualidade da água do rio Macacu, Rio de Janeiro.** Silva, I. F. O (IFRJ-Campus Rio de Janeiro); Nascimento, J. A. A (IFRJ-Campus Rio de Janeiro); Gonçalves, J. V. G. S. T. (IFRJ-Campus Rio de Janeiro); Magalhães, A. B. F. F. (IFRJ-Campus Rio de Janeiro); Martins, J. M. A. (S/VA); Mauad, C. R. (IFRJ-Campus Rio de Janeiro)
- AMB-078** **Evaluation of the degradation of cephalexin by advanced oxidative process in flow type reactor.** Hoehne, L. (UNIVATES); Altmayer, T. (UNIVATES); Reisdorfer, G. (UNIVATES); Kuhn, D. (UNIVATES); Schweizer, Y. A. (UNIVATES); Cordeiro, S. G. (UNIVATES); Ethur, E. M. (UNIVATES); Freitas de, E. M. (UNIVATES); Steffens, C. (URI)
- AMB-079** **Determination of the chemical composition and its distribution according to the particles sizes.** CACERES QUIJANO, M. F. (PUC-RIO); PORTO DE SOUSA JUSTO, E. (PUC-RIO); BERINGUI DE OLIVEIRA DA SILVA, K. (PUC-RIO); DIONISIO CALDERON, E. R. (PUC-RIO); GIODA, A. (PUC-RIO)
- AMB-080** **Determination of metal species in Hoplias intermedius fish tissues by inductively coupled plasma atomic emission spectrometry (ICP OES).** Cruz, L. A. D. D. (UTFPR); Schnitzler, D. C. (UTFPR)
- AMB-081** **Evaluation of gaseous mercury in the atmosphere of Salvador-BA.** Mota, E. R. (UFBA); Jesus de, R. M. (UFBA); Pereira, P. A. P. (UFBA); Da Rocha, G. O. (UFBA)
- AMB-082** **Evaluation of the Applicability of Pineapple Peels for Direct Removal of the Methylene Blue Dye from Aqueous Medium.** Rodrigues, L. V. S. (IFGoiano-Campus Ceres); Ferreira Silva, C. (IFGoiano-Campus Ceres); Marques, F. A. (IFGoiano-Campus Ceres)
- AMB-083** **TINGIMENTO EM BICROMIA DE TECIDO ACRÍLICO COM ÁGUA TRATADA COM RESÍDUO DA INDÚSTRIA BUNGE COMO ADSORVENTE.** Feller, J. C. (FURB); Barcellos, I. O. (FURB)
- AMB-084** **Chitosan-based hydrogel for adsorption of Cd²⁺: Equilibrium isotherm, kinetic and thermodynamic studies.** Vilela, P. B. (UDESC); Matias, C. A. (UDESC); Dalalibera, A. (UDESC); Paulino, A. T. (UDESC)
- AMB-085** **Optimization of Manganese removal in aqueous solution by Bacillus cereus.** Reis, F. D. (UFSJ); Oliveira, L. F. (UFOP); Cândido, G. C. (UFOP); Dias, S. C. (UFSJ); Leão, V. A. (UFOP)

ANA – Química Analítica

- ANA-001** **Caracterização química de produtos do coprocessamento de bio-óleo e resíduo de vácuo por desasfaltação a solvente.** Pontes, P. N. S. (UFRJ); Silva, S. R. V. S. (UFRJ); Ximenes, X. V. L. (PETROBRÁS); Pinho, P. A. R. (PETROBRÁS); Azevedo, A. D. A. (UFRJ)
- ANA-002** **Evaluation of normal versus reversed phase columns set for pyrolysis bio-oil analysis via GC×GC-TOFMS.** Silva, R. V. S. (UFRJ); Pereira, V. B. (UFRJ); Romeiro, G. A. (UFF); Azevedo, D. A. (UFRJ)
- ANA-003** **Valorização da palha de café por pirólise lenta e caracterização química dos produtos líquidos por GC×GC-TOFMS.** Soares, K. P. (UFRJ); Pontes, N. S. (UFRJ); Nunes, V. O. (UFRJ); Azevedo, D. A. (UFRJ); Silva, R. V. S. (UFRJ)
- ANA-004** **The challenge of individually quantifying macrocrystalline waxes in whole crude oil.** França, D. (UFRJ); Pereira, V. B. (UFRJ); Coutinho, D. M. (UFRJ); Ainstein, L. M. (UFRJ); Azevedo, D. A. (UFRJ)
- ANA-005** **Optimization of analytical method for determination of aminoglycosides in pharmaceutical formulations by CE-DAD.** Donegatti, T. A. (UFSCar-Campus Sorocaba); Pereira, E. A. (UFSCar-Campus Sorocaba)
- ANA-006** **Determination of the stability of toasted coffees using Headspace Solid Phase Microextraction and Gas Chromatography coupled to Mass Spectrometry.** Garcia, C. C. (UFF); Costa, M. C. (UFF); Oliveira, D. F. (IFRJ-Campus Rio de Janeiro); Assis, N. M. (IFRJ-Campus Rio de Janeiro); Silva Júnior, A. I. (IFRJ-Campus Rio de Janeiro); Pereira Netto, A. D. (UFF)
- ANA-007** **Central composite rotatable design approach for the optimization of bromine and iodine determination by IC-MS.** Scaglioni, P. T. (UFPEl); Novo, D. L. R. (UFPEl); Pereira, R. M. (UFPEl); Mello, P. A. (UFSC); Pereira, J. S. F. (UFRGS); Mesko, M. F. (UFPEl)
- ANA-008** **Hydrocarbon semi-quantification in petroleum by comprehensive two-dimensional gas chromatography: a rapid assessment.** Coutinho, D. M. (UFRJ); Machado, P. A. C. (UFRJ); França, D. (UFRJ); Pereira, V. B. (UFRJ); Ávila, B. M. F. (UFRJ); Vanini, G. (UFRJ); Azevedo, D. A. (UFRJ)
- ANA-009** **Aplicação da técnica SALLE-HPLC-UV/FD para determinação de aminas biogênicas em produtos alimentares de origem animal.** Francisco, K. C. A. (IQAR-UNESP); Brandão, P. F. (U.Porto); Ramos, R. M. (U.Porto); Gonçalves, L. M. (IQUSP); Cardoso, A. A. (IQAR-UNESP); Rodrigues, J. A. (U.Porto)
- ANA-010** **Assessment of analytical performance for polar compound characterization in crude oils by high resolution mass spectrometry.** Xavier, R. S. (UFRJ); Coutinho, D. M. (UFRJ); Vanini, G. (UFRJ); Barra, T. A. (UFRJ); França, D. (UFRJ); Azevedo, D. A. (UFRJ)
- ANA-011** **Optimization of a DLLME/magnetic ionic liquid-based technique for the determination of multiclass organic compounds in urine by HPLC-DAD.** Bernardi, G. (UFSC); Corazza, G. (UFSC); Will, C. (UFSC); Mafra, G. (UFSC); Nascimento, E. O. O. (UFSC); Merib, J. (UFCSPA); Carasek, E. (UFSC)
- ANA-012** **Synthesis of the oxide mixture Li₂O-ZrO₂-BaO-SiO₂ for use as a polar stationary phase in hydrophilic interaction liquid chromatography.** Silva, M. G. (UFAL); Vasconcelos Jr., J. A. (UFAL); Bortoluzzi, J. H. (UFAL)
- ANA-013** **Highly efficient upscalable processes to concentrate glycosylated diterpenes from coffee beans using Macroporous Polymeric Resins with detection by TLC-MS.** Oliveira, G. D. M. (IME); Santos, F. K. F. (IME); Rezende, C. M. (UFRJ); Veigar-Júnior, V. F. (IME)
- ANA-014** **Thermal analysis and quantitative characterization of compatibility between clotrimazole and itraconazole for microemulsion development for a new treatment of sporotrichosis.** Ferreira, P. G. (UFF); Lima, C. G. S. (UFF); Noronha, L. L. (UFF); Moraes, M. C. (UFF); Silva, F. C. (UFF); Viçosa, A. L. (FIOCRUZ); Futuro, D. O. (UFF); Ferreira, V. F. (UFF)

- ANA-015** Separação HILIC em cromatografia por injeção sequencial: estudo da retenção de bisfenol A e melamina e sua determinação em alimentos. Gama, M. R. (CENA-USP); Silva, C. F. (UFSJ); Rocha, F. R. P. (CENA-USP)
- ANA-016** Determinação de iodeto como impureza gerada na síntese de líquidos iônicos de aminoácidos por CZE-UV via injeção múltipla. Nascimento, M. P. (UFJF); Pereira, M. P. (UFJF); Bombonato, F. I. (UFJF); Marques, R. (UFJF); Oliveira, M. A. L. (UFJF)
- ANA-017** A comparison study of coprecipitation and solid-phase extraction for trace elements determination in seawater samples by ICP-MS. Dalfior, B. M. (UFES); Conceição, V. N. (UFES); Rasch, M. B. (UFES); Athayde, G. P. B. (UFES); Carneiro, M. T. W. D. (UFES)
- ANA-018** Method development for 2,4-D herbicide determination in air by active sampling and HPLC-ESI-MS/MS analysis. Kemmerich, M. (UFPEl); Ceolin, B. C. (UFPEl); Gomes, J. P. S. (UFPEl); Gehrke, V. R. (UFPEl); Camargo, E. R. (UFPEl); Ávila, L. A. de (UFPEl)
- ANA-019** Evaluation of single reaction chamber microwave system for digestion of refractory substances using hydrogen peroxide and nitric acid. Anschau, K. F. (UFSM); Silva, L. Z. (UFSM); Enders, M. S. P. (UFSM); Senger, C. M. (UFSM); Duarte, F. A. (UFSM); Muller, E. I. (UFSM)
- ANA-020** Graphene oxide application in dispersive microextraction in solid phase objectifying the preconcentration of metals in liquid samples. Lima Júnior, J. M. (UFABC); Mamián López, M. B. (UFABC); Domingues, S. H. (UPM); Gaubeur, I. (UFABC)
- ANA-021** Determination of Al, Ca, Cd, Cr, Cu, Fe, Hg, K, Mg, Na, Pb and Zn in chicken tissues by MIP OES and GF AAS. Pinto, A. M. T. P. (UFPEl); Boeira, A. C. S. (UFPEl); Lisboa, M. T. (UFPEl); Medina, A. L. (UFPEl); Ribeiro, A. S. (UFPEl); Vieira, M. A. (UFPEl)
- ANA-022** Development of an accurate analytical method for crude oil digestion and Hg determination by CVG-ICP-MS. Druzian, G. T. (UFSM); Nascimento, M. S. (UFSM); Picoloto, R. S. (UFSM); Flores, E. M. M. (UFSM); Mello, P. A. (UFSM)
- ANA-023** Evaluation of calibration strategies for Hg determination at ultra-trace level in eye shadow by electrothermal vaporization coupled to ICP-MS. Silva, J. S. (UFSM); Henn, A. S. (UFSM); Heidrich, G. M. (UFSM); Mello, P. A. (UFSM); Dressler, V. L. (UFSM); Flores, E. M. M. (UFSM)
- ANA-024** Successive Digestions for Pre-Concentration and Ultra-Trace Determination of Br and I. Cauduro, V. H. (UFSM); Doneda, M. (UFSM); Barin, J. S. (UFSM); Mello, P. A. (UFSM); Flores, E. M. M. (UFSM); Picoloto, R. S. (UFSM)
- ANA-025** Extração Líquido-Líquido por Partição à Baixa Temperatura de Bisfenol A em amostras de leite bovino. Teixeira, N. N. (CENA-USP); Melchert, W. R. (CENA-USP)
- ANA-026** Microwave-Assisted Solid Sampling System for the analysis of Polymeric Samples using FF-AAS. Vaz, J. M. (UFSM); Henn, A. S. (UFSM); Frohlich, A. C. (UFSM); Pedrotti, M. F. (UFSM); Paniz, J. N. G. (UFSM); Flores, E. M. M. (UFSM); Bizzi, C. A. (UFSM)
- ANA-027** Aplicação de aerogel de grafeno como fase extratora na determinação on-line de Cd²⁺ com detecção por FAAS. Lima, G. C. (UNIFAL); Borges, F. A. (UNIFAL); Castro, L. (UNIFAL); Lima, G. F. (UNIFAL); Luccas, P. O. (UNIFAL); Figueiredo, E. C. (UNIFAL)
- ANA-028** Evaluation of natural adsorbents applied to DPX (Disposable Pipette Extraction) for adsorption of metallic ions. Ferreira, M. M (UFG-Catalão); Alves, V. N. (UFG-Catalão)
- ANA-029** Stability of sulfur-containing drugs using the reduction of Fe(III) in buffered aqueous solution containing 2,2'-bipyridine. Marques, M. E. G. (FMABC); Santana, W. E. L. (FMABC); Moya, H. D. (FMABC)
- ANA-030** Evaluation of the peroxymonosulfate decomposition reaction in alkaline medium for application in determining the polyphenol content in teas. Santana, W. E. L. (FMABC); Marcelino, C. P. (FMABC); Moya, H. D. (FMABC)
- ANA-031** Simultaneous determination of endocrine disruptors triclosan and methylparaben in personal care products by UV-vis spectroscopy. Santana, E. R. (UFSC); Spinelli, A. (UFSC)
- ANA-032** Uso do quantum dots CuInS₂ funcionalizado com glutatona para determinar curcumina no açafrão-da-índia. Paula de, N. T. G. (UFPE); Araújo, A. L. S. (UFRPE); Freitas, D. V. (UFPE); Silva, R. R. (UFPE); Navarro, M. (UFPE); Lavorante, A. F. (UFRPE); Paim, A. P. S. (UFPE)
- ANA-033** Evaluation of for direct determination of thimerosal, an organic compound of mercury, by atomic fluorescence spectrometry. Oliveira, M. J. (UFAL); Cunha, F. A. S. (UFAL); Santos, J. C. C. (UFAL)
- ANA-034** Effect of different solvents in extraction step for determination of free glycerol content in biodiesel. FERREIRA, C. R. C. (UFRRJ)
- ANA-035** Simple and low-cost analytical procedure for determination of formaldehyde in milk using smartphone-based digital images. Silva, A. F. S. (CENA-USP); Martins, G. (UFU); Gonçalves, I. C. (CENA-USP); Batista, A. D. (UFU); Rocha, F. R. P. (CENA-USP)
- ANA-036** Multivariate image analysis for fast determination of total solid soluble in mangos (Mangifera indica) using the PhotoMetrix-PRO 1.1.3. Bento, I. X. (IFRN); Dantas, A. N. S. (IFRN)
- ANA-037** Determinação Quantitativa de Corantes Artificiais em Alimentos por meio de Eletroforese em Gel e Detecção por Imagem Digital. Rodrigues, M. L. A. (UnB); Neto, G. F. S. (UnB); Fonseca, A. (UnB)
- ANA-038** Spot test baseado em imagens digitais explorando extração líquido-líquido para a determinação de Ca e Mg em biodiesel. Soares, S. (CENA-USP); Fernandes, G. M. (UFU); Batista, A. D. (UFU); Rocha, F. R. P. (CENA-USP)
- ANA-039** Determinação de ácido ascórbico em sucos naturais utilizando imagem digital. Sacramento, I. S. A. P. (UFBA); Santos, J. H. (UFBA); Santos, L. O. (UFRB); Gomes, A. A. (UFRGS); Ferreira, S. L. C. (UFBA)
- ANA-040** A low-cost method for carbamazepine determination in pharmaceuticals formulations using image-based method. Lamarca, R. S. (IQAr-UNESP); Silva, F. T. O. (IQAr-UNESP); Nalin, M. (IQAr-UNESP); Lima Gomes, P. C. F. (IQAr-UNESP)

- ANA-041 Geographical traceability of South Brazilian red wines through fused spectroscopic data.** Schneider, M. P. (UFRGS); Bock, F. C. (UFRGS); Guerra, C. C. (Embrapa Uva e Vinho); Silva, L. L. (Embrapa Uva e Vinho); Ferrão, M. F. (UFRGS); Gomes, A. A. (UFRGS)
- ANA-042 Identificação de misturas biodiesel/diesel de acordo com a rota de síntese usando PLS-DA e espectroscopia NIR.** DANTAS, S. E. A. (UFRN); COSTA, G. B. (UFRN); SILVA, A. L. P. B. (UFRN); GUIMARÃES, L. M. C. (UFRN); FILHO, F. S. M. (UFRN); NETO, J. G. V. (UEPB); DINIZ, P. H. G. (UFBA); ALMEIDA, E. S. A. (UFPR)
- ANA-043 Análise screening de solos usando imagens digitais e quimiometria.** SILVA, A. L. P. B. (UFRN); GUIMARÃES, L. M. C. (UFRN); DANTAS, S. E. A. (UFRN); FILHO, F. S. M. (UFRN); DANTAS, V. S. (UFRN); COSTA, I. P. (UEPB); COSTA, G. B. (UFRN); XAVIER, M. B. (UFRN)
- ANA-044 Autenticação de óleos vegetais de soja transgênico e não transgênico utilizando imagens digitais e técnicas de reconhecimento de padrões.** GUIMARÃES, L. M. C. (UFRN); COSTA, I. P. (UEPB); DANTAS, S. E. A. (UFRN); SILVA, A. L. P. B. (UFRN); FILHO, F. S. M. (UFRN); DANTAS, V. S. (UFRN); BASÍLIO, M. M. (UFRN); COSTA, G. B. (UFRN); XAVIER, M. B. (UFRN); NETO, J. G. V. (UEPB)
- ANA-045 High-throughput system for determination of organic matter and clay in soil samples.** Santos, R. B. (UNISC); Helfer, G. A. (UNISINOS); Machado, G. S. (UNISC); Santos, R. O. (UNISC); Pappis, C. (UNISC); Baumann, L. (UNISC); Librelotto, M. (UNISC); Barbosa, J. L. V. (UNISINOS); Costa, A. B. (UNISC)
- ANA-046 Cartridge identification and classification of gunshot residues by x-ray fluorescence spectrometry and chemometric analysis.** Madeira, F. B. (UFRRJ); Castro, M. T. P. O. (UFRRJ); Barra, C. M. (UFRRJ); Canuto, A. V. S. (PCRJ); Tubino, M. (UNICAMP); Rocha Jr., J. G. (UFRRJ)
- ANA-047 Comparison of the performance of the multi-class classifiers in a forensic case.** Luna, A. S. (UERJ); Gois de, J. S. (UERJ); Andrade de, B. M. (UERJ); Robert, J. V. (UERJ); Nascimento do, M. C. L. (UERJ)
- ANA-048 Aplicação da Fluorescência de Raios X portátil para análise e classificação de amostras de filtro solar.** Oliveira, A. G. S. (UFPI); Barros, W. O. (UFPI); Silva, I. J. G. (IFPI); Farias Filho, B. B. (UFPI)
- ANA-049 Análise de Componentes Principais para Avaliação da Solubilidade de Fe, Zn, Cu, Mn, K, Mg e Ca em Extratos Aquosos de Amostras de Café Convencionais e Orgânicos.** Espinelli Junior, J. B. S. (FURG); Duarte da Silva, G. V. B. M. (FURG); Bastos, R. B. (FURG); Furlong, E. B. (FURG); Carapelli, R. (FURG)
- ANA-050 Classificação de petróleos pela Análise discriminante por mínimos quadrados parciais (PLS-DA).** Santos, F. D. (UFES); Tosato, F. (UFES); Santos, L. P. (UFES); Filgueiras, P. R. (UFES); Romão, W. (UFES-Vila Velha); de Oliveira, E. C. (PETROBRÁS); de Oliveira, L. S. (UFES); da Silva, M. (UFES); Sad, C. M. S. (UFES); Corona, R. R. B. (UFES); Pereira, L. B. (UFES); Leite, J. S. D. (UFES)
- ANA-051 Classification of omega-3 supplements using near infrared spectroscopy (NIRS) and principal components analysis.** Souza, J. C. (UFV); Hespanhol, M. C. (UFV); Pasquini, C. (UNICAMP)
- ANA-052 Metabolomic approach in the phytopathology of Asian soybean rust using techniques based on mass spectrometry, molecular networking and multivariate analysis.** Silva, E. (UEM); Leme, L. M. (UEM); Porto, C. (UnicEsumar); GRAÇA, J. P. (Embrapa Soja - Londrina); Flaussino, A. M. (Embrapa Soja - Londrina); Godoy, C. V. (Embrapa Soja - Londrina); Oliveira, M. F. (Embrapa Soja - Londrina); Hoffmann-Campo, C. B. (Embrapa Soja - Londrina); Nunes, E. O. (Embrapa Soja - Londrina); Pilau, E. J. (UEM)
- ANA-053 RELATIONSHIP BETWEEN pH AND SOIL ORGANIC MATTER (MOS) IN SOIL SAMPLES.** Moreira, N. S. (UFG); Santos dos, J. M. (IFGoiano-Campus Ceres)
- ANA-054 Nondestructive quantification of cassava starch in wheat flour for bread making by using digital images and PLS regression.** Medeiros Filho, F. S. (UFRN); Costa, G. B. (UFRN); Silva, A. L. P. B. (UFRN); Guimarães, L. M. C. (UFRN); Dantas, S. E. A. (UFRN); NETO, J. G. V. (UEPB); Diniz, P. H. G. (UFBA); Duarte, E. S. A. (UFPR); Almeida, V. E. (UFPB); Fernandes, D. D. S. (UFPB); Araújo, M. C. U. (UFPB)
- ANA-055 Identificação de perfil de petróleos pesados pela análise de propriedades físico-químicas e PCA.** Silva da, M. (UFES); Santos dos, F. D. (UFES); Corona, R. R. B. (UFES); Leite, J. S. D. (UFES); Pereira, L. B. (UFES); de Oliveira, L. S. (UFES); Sad, C. M. S. (UFES); Filgueiras, P. R. (UFES); de Castro, E. V. R. (UFES)
- ANA-056 Estudo do comportamento reológico de blends de petróleo.** Leite, J. da S. D. (UFES); Oliveira, L. S. de (UFES); Corona, R. R. B. (UFES); Silva, M. da (UFES); Santos, F. D. dos (UFES); Pereira, L. B. (UFES); Sad, C. M. S. (UFES); Filgueiras, P. R. (UFES); Castro, E. V. R. de (UFES)
- ANA-057 Sustainable production of biosurfactants using potato peel in liquid medium: a factorial design study.** Rodrigues, B. M. (PUC-Campinas); Gomes, W. E. (PUC-Campinas); Etchegaray, A. (PUC-Campinas); Mendes, R. K. (PUC-Campinas); Nogueira, A. B. (PUC-Campinas)
- ANA-058 Extraction of organic compounds in aqueous fraction of bio-oil.** Santos, L. M. (UFS); Gois, A. R. S. (UFS); Carvalho, L. C. (UFS); Freitas, L. S. (UFS); Cerqueira, S. C. A. (UFS)
- ANA-059 Quantitative analyses of coumarine in Mikania glomerata Sprengel syrup using 1H NMR.** Silva, S. M. (); Crocoli, L. C. (); Molon, V. B. (UCS)
- ANA-060 Desenvolvimento e aplicação de um sistema de foto-oxidação para o estudo das alterações da composição química do petróleo.** Oliveira, M. N. N. (UFRPE); Nascimento, R. M. (UFRPE); Silva, J. A. (UFRPE); Santos, J. M. (UFRPE)
- ANA-061 Application and characterization of zero-valent iron supported on attapulgite for the removal of metronidazole in water using oxone.** Coelho, R. M. (UFVJM); Franco, D. V. (UFVJM); Santos Filho, E. (UFVJM); Silva, L. M. (UFVJM)
- ANA-062 Avaliação de procedimentos de extração de pesticida carbamato seguindo os preceitos da química verde.** Bragaia, G. P. (ESALQ-USP); Melchert, W. R. (ESALQ-USP)
- ANA-063 Evaluation of the potential of Erythrosine B for protein determination in commercial vaccines.** Silva, F. C. S. S. (UFRJ); Silva, D. V. R. S. (UENF); Matos, A. B. M. (UERJ); Salgado, A. M. S. (UFRJ); Queiroz, M. C. Q. (UFRJ)

- ANA-064** A simple and fast method for Bisphenol S determination in thermal papers samples. Sousa, J. C. P. (UFG); Bernardo, R. A. (UFG); Gallimberti, M. (FCF-USP); Chaves, A. R. (UFG); Junior, F. B. (FCF-USP); Vaz, B. G. (UFG)
- ANA-065** A simple dispersive micro-solid phase extraction (D- μ -SPE) procedure for the simultaneous determination of polycyclic aromatic compounds in water samples. NASCIMENTO, M. M. (UFBA); DA ROCHA, G. O. (UFBA); DE ANDRADE, J. B. (UFBA)
- ANA-066** ANALYSIS OF FATTY ACIDS METHYL ESTERS FROM BIODIESEL BY GEL PERMEATION CHROMATOGRAPHY. Costa da, R. P. M. (UFRJ); Andrade de, D. F. (UFRJ); Santos dos, R. C. (UFRJ); Souza de, C. G. (UFRJ); d'Avila, L. A. (UFRJ)
- ANA-067** Evaluation of films of nanocomposite as sorbent materials for sample preparation. Batista, A. D. (); Nossol, E. (); Magalhaes, J. A. (UFU); Silva, S. C. (UFU)
- ANA-068** Disposable pipette monolithic extraction phase for dexamethasone determination in synovial fluid samples. Machado, L. S. (UFG); Bernardo, R. A. (UFG); Soares, F. Q. (IFG); Chaves, A. R. (UFG)
- ANA-069** Avaliação da alteração molecular na composição química de petróleo nos estágios iniciais de contato com ambientes terrestres e aquáticos. Santos, J. M. (UFRPE); Castiblanco, J. E. B. (UFS); Carregosa, J. C. (UFS); Wisniewski, A. (UFS)
- ANA-070** CAT-alytic and non-catalytic pyrolysis of the bean pod Caupi (*Vigna unguiculata*) for production bio-oil rich in phenols. Santos, R. M. (UFS); Bispo, D. F. (UFS); Granja, H. S. (UFS); Loeser, T. F. L. (UFS); Freitas, L. S. (UFS)
- ANA-071** Comprehensive study of the bio-oil obtained from slow pyrolysis of crambe seeds. Stelzer, K. T. (UFRJ); Pereira, V. B. (UFRJ); Silva, R. V. S. (UFRJ); Romeiro, G. A. (UFF); Azevedo, D. A. (UFRJ)
- ANA-072** Especificação química de bio-óleos de pirólise branda da torta das sementes de frutas tropicais brasileiras. Nunes, V. O. (UFRJ); Silva, R. V. S. (UFRJ); Azevedo, D. A. (UFRJ)
- ANA-073** Method development and validation by UFLC-PDA-FLD for determination of endocrine disruptors in water matrices. Vivas, M. (UFBA); Martinez, S. (UFBA); Andrade, J. (UFBA); Rocha, G. (UFBA)
- ANA-074** Otimização de método analítico para a determinação de clorpirifós em alfaves comercializados no município de Seropédica - RJ. Alves, D. P. (UFRRJ); Mariano Junior, D. R. (UFRRJ); Almeida, V. G. K. (UFRRJ)
- ANA-075** Glyphosate-cation clusters detection by mass spectrometry for quantitative analysis. Rivero, E. A. I. (UNIFESP-Diadema); Karpfenstein, R. (UNIFESP-Diadema); Silva, D. O. (UNIFESP-Diadema)
- ANA-076** Evaluation antibiotics removal from synthetic sewage by a consortium microalgae and bacteria in LED photobioreactors by HPLC-MS. Rodrigues, D. A. S. (UFOP); Freitas, M. G. (UFOP); Santiago, A. F. (UFOP); Afonso, R. J. C. F. (UFOP)
- ANA-077** Micro-extração assistida por ultrassom em reator cup horn em amostras de manjeriço (*Ocimum basilicum* L.) para determinação multielementar por ICP-MS. Teles, V. L. G. (UFMG); Souza, G. V. (UFMG); Augusti, R. (UFMG); Costa, L. M. (UFMG)
- ANA-078** Selective extraction of Cr(III) using *Luffa cylindrica* fibers magnetically impregnated. Gonçalves, D. C. B. (UFG-Catalão); Silva, C. A. S. (UFG-Catalão); Alves, V. N. (UFG-Catalão)
- ANA-079** Feasibility of microwave-induced combustion and inductively plasma mass spectrometry for bromine and iodine determination in human nail. Novo, D. L. R. (UFPel); Henn, A. S. (UFMS); Rondan, F. S. (UFPel); Balbinot, F. P. (UFPel); Rodrigues, E. F. (UFPel); Mesko, M. F. (UFPel)
- ANA-080** PRÉ-CONCENTRAÇÃO DE Cr (III) EM MATRIZES AQUOSAS POR EXTRAÇÃO EM FASE SÓLIDA E DPX. Silva, W. R. (UFU); Costa, B. E. S. (UFU); Coelho, N. M. M. (UFU)
- ANA-081** Estudo e desenvolvimento de método de extração de metais de diferentes tipos de óleos lubrificantes (mineral, semissintético e sintético) por extração induzida por quebra de emulsão. Fernandes, A. (UFF); Vinhal, J. O. (IFMA); Dutra, A. J. B. (UFRJ); Cassella, R. J. (UFF)
- ANA-082** Determinação de Ca, Fe, Na, Ni, V e Zn em amostras de óleo combustível industrial e marítimo na forma de emulsão empregando ICP OES. Carvalho, B. S. (UFMG); Costa, L. M. (UFMG)
- ANA-083** Determinação direta de Ca, Mg, Mn e Zn em alginatos odontológicos comerciais utilizando amostragem em suspensão por FIA - F AAS. CRUZ, G. F. B. (UFF); ROCHA, P. S. M. (UFF); CASSELLA, R. J. (UFF)
- ANA-084** Emulsion Breaking Extraction for the Determination of Tin in Edible Oil Samples by Graphite Furnace Atomic Absorption Spectrometry. Silva, A. F. (UFABC); Papai, R. (IPT); Gaubeur, I. (UFABC)
- ANA-085** Additivity of optical emissions applied to neodymium and praseodymium quantification in metallic didymium and (Nd,Pr)-Fe-B alloy samples by low-resolution atomic emission spectrometry. Papai, R. (IPT); Sousa, M. A. (IPT); Fonseca, K. T. (IPT); Almeida, G. A. (IPT); Silveira, J. R. F. (IPT); Silva, A. L. N. (IPT); Neto, J. B. F. (IPT); Santos, C. A. L. (IPT); Landgraf, F. J. G. (EPUSP); Luz, M. S. (IPT)
- ANA-086** Avaliação da aplicabilidade da estratégia de diluição de aerossol (HMI) em determinações por MP AES. Rocha, A. A. (UFF); Duyck, C. (UFF); Costa, L. G. B. A. (UFF); Lorençatto, R. (Agilent)
- ANA-087** Determinação de estanho em ossos de ratas Wistar por GFAAS acoplado a um gerador de hidretos. Oliveira, R. L. (UFES); Jesus, H. C. (UFES); Silva, I. V. (UFES); Graceli, J. B. (UFES); Costa, C. S. (UFES); Niño, O. M. S. (UFES)
- ANA-088** Determination of Ba, Cu, Pb and Zn in instant soup by MIP OES after sample preparation in low pressure closed system. Luckow, A. C. B. (UFPel); De Souza, A. O. (UFPel); Bonemann, D. H. (UFPel); Pereira, C. C. (UFPel); Nunes, A. M. (UFPel); Ribeiro, A. S. (UFPel)
- ANA-089** Fluorescent nanoprobe based on capped of N-acetyl-L-cysteine CdTe quantum dot for direct thimerosal quantification in vaccines. Tall, A. (UFAL); Costa, K. R. (UFAL); Santos, J. C. C. (UFAL); Goulart, M. O. F. (UFAL); Tapsoba, I. (UFAL)

- ANA-090** In-line photochemical conversion for determination of hydrochlorothiazide in pharmaceuticals and fast stability studies. Maringolo, V. (UFABC); Carvalho, A. Z. (UFABC); Rocha, D. L. (UFABC)
- ANA-091** Desenvolvimento de método espectrofotométrico para a determinação de hormônio em água de reuso. MACHADO, M. L. O. (UFABC); AKIBA, N. (UFABC); SANTOS, M. C. (UFABC); GAUBEUR, I. (UFABC)
- ANA-092** A novel and simple square wave voltammetric method for atorvastatin determination based on a lead probe signal suppression on a glass carbon electrode. Almeida de, L. G. (UFF); da Silva, W. A. (UFF); Aucélio, R. Q. (PUC-RIO); Pacheco, W. F. (UFF); Lepri, F. G. (UFF); Semaan, F. S. (UFF); Dornellas, R. M. (UFF)
- ANA-093** Desenvolvimento de dispositivos analíticos em plataformas de papel com caneta 3D para detecção de nitrito e glicose em amostras clínicas. Sousa, L. R. (UFG); Duarte, L. C. (UFG); Coltro, W. K. T. (UFG)
- ANA-094** Determinação de sacarina em chá diet empregando um polímero molecularmente impresso (MIP) para extração em fase sólida (SPE). Izabella F. Ferreira Domingues, I. F. F. D (UnB); Camila S. Dourado, C. S. D (UnB); Fabiana Casarin, F. C. (UnB); Erislene S. Almeida, E. S. A (UnB); Ana Cristi Basile Dias, A. C. B. D (UnB)
- ANA-095** Cella de fluxo com nova geometria para detecção de quimiluminescência empregando uma malha de transdução de sinal com novo design eletrônico. Lima, M. J. A. (CENA-USP); Marinho, O. R. (UFScar); Reis, B. F. (CENA-USP)
- ANA-096** Development of a low-cost DNA thermocycler (PCR). Blanes, L. (FIOCRUZ); Cunha, V. S. (FIOCRUZ); de Oliveira, V. K. (FIOCRUZ); Alexandrino, F. (FIOCRUZ); Morello, L. G. (FIOCRUZ); Marchini, F. K. (FIOCRUZ)
- ANA-097** Green nanosensor for the quantification of lidocaine in cocaine sample. Soares, T. S. (UFV); Chagas, F. O. (UFV); Maldaner, A. O. (INC/PF); Marinho, P. A. (INC/PF); Da Silva, L. H. M. (UFV); Hespagnol, M. C. (UFV)
- ANA-098** Forensic electroanalysis: Direct use of the graphite sheet as a swab and working electrode for determination of explosive residues. Castro, S. V. F. (UFU); Cardoso, R. M. (UFU); Santana, M. H. P. (SR/DPF/MG); Richter, E. M. (UFU); Munoz, R. A. A. (UFU)
- ANA099** Manganese fractionation in black tea infusions by square-wave voltammetry. Elias, A. C. (UFU); Castro, S. V. F. (UFU); Richter, E. M. (UFU); Sousa, R. M. F. (UFU); Munoz, R. A. A. (UFU); Gonçalves, S. G. (UFU)
- ANA-100** A reagentless procedure for determination of biodiesel in blends with diesel or vegetable oils. Soares, S. S. (CENA-USP); Rodrigo Piovezani Rocha, F. R. P. R. (CENA-USP)
- ANA-101** Correlation between the thermal behavior of trivalent lanthanides and yttrium isonicotinate and the lanthanide contraction. Nunes, W. D. G. (IFRO); Teixeira, J. A. (IFPR); Nascimento, A. L. C. S. (IQA-UNESP); Ionashiro, M. (IQA-UNESP); Caires, F. J. (FC-UNESP-Campus Bauru)
- ANA-102** Rifle projectiles identification by X-ray fluorescence and exploratory analysis of inorganic constituents. SAIDE, V. G. P. (UFRRJ); CANUTO, A. V. S. (PCRJ); BARRA, C. M. (UFRRJ); SHIMAMOTO, G. G. (UNICAMP); TUBINO, M. (UNICAMP); ROCHA Jr, J. G. (UFRRJ)
- ANA-103** Viability of oral pre-formulation consisting of ganciclovir and NaCl by TGA / DTG and DSC. COSTA, B. A. (UFG); BRITO, C. C. S. M. (UFG); MATOS, L. N. (UFG); BATISTA JUNIOR, A. C. (UFG); VELASCO, L. G. (UFG); LELES, M. I. G. (UFG)
- ANA-104** Study of the interaction between valsartan and salicylic acid: Mechanochemical synthesis, and characterization by TG-DTA, DSC, XRPD and FTIR. Dinhani, L. L. (UNESP-Bauru); Moura, A. (IQA-UNESP); Ferreira, L. T. (UNESP-Bauru); Caires, F. J. (UNESP-Bauru)
- ANA-105** Metabolomic Profile of Newborns Exposed to Zika Virus. Assunção, N. A. (UNIFESP-Diadema); Marques, F. A. (IFGoiano-Campus Ceres); Oliveira, R. V. (UFScar); Melo, U. S. (UNIFESP-Diadema); Caires-Junior, L. C. (UNIFESP-Diadema); Goulart, E. (UNIFESP-Diadema); Zatz, M. (UNIFESP-Diadema); Barreto, C. N. (UNIFESP-Diadema); Furtado, D. Z. S. (UNIFESP-Diadema); Zanlunqui, L. A. (UNIFESP-Diadema)
- ANA-106** Modelagem da remoção de azul de metileno por carvão ativado de borra de café em micro coluna de leito fixo. Ferreira, G. W. (UTFPR); Stevanato, A. (UTFPR); Bertozzi, J. (UTFPR)
- ANA-107** Synthesis, Thermal and Spectroscopic Studies of Fe(II) and Ni(II) Complexes. Zangaro, G. A. C. (IQA-UNESP); Carvalho, A. C. S. (IQA-UNESP); Ekawa, B. (IQA-UNESP); Nascimento, A. L. C. S. (IQA-UNESP); Nunes, W. D. G. (IFRO); Fernandes, R. P. (IQA-UNESP); Ionashiro, M. (IQA-UNESP); Caires, F. J. (FC-UNESP-Campus Bauru)
- ANA-108** Caracterização de amostras de solos provenientes do lixão da Cidade de Ceres-GO. Carmo, P. (IFGoiano-Campus Ceres); Santos, J. M. (IFGoiano-Campus Ceres)
- ANA-109** Reducing capacity of eye drops based on the scavenging of the free radical cation derived from N-(4-methoxyphenyl)-1,4-phenylenediamine. dos Santos, C. (FMABC); Leça, R. G. C. (FMABC); Moya, H. D. (FMABC)
- ANA-110** Optimization of a microextraction methodology with in situ adsorbent formation for Cr(III) determination in phytotherapeutic samples. Siqueira, A. G. (UFG-Catalão); Costa, B. E. S. (UFU); Alves, V. N. (UFG-Catalão)
- ANA-111** Optimization of a CV-ICP-MS system for quantification of Hg²⁺, applying it for total Hg and fractionation analysis. Ladeira, P. C. C. (UFABC); de Araújo, T. C. (UFABC); Batista, B. L. (UFABC)
- ANA-112** Microwave-assisted liquid-liquid extraction of phenolic compounds from the aqueous bio-oil fraction of guava seed. Gois, A. R. S. (UFS); Cerqueira, S. C. A. (UFS); Santos, L. M. (UFS); Freitas, L. S. (UFS)
- ANA-113** AVALIAÇÃO DO TEOR DE HISTAMINA EM AMOSTRAS DE PESCADO PROVENIENTES DA PESCA ARTESANAL DA REGIÃO SUL DO RS. Valim, D. Z. (FURG); Espinelli Junior, J. B. S. (FURG); de Souza, M. M. (FURG); Carapelli, R. (FURG)
- ANA-114** Evaluation of the results of the optimization in high performance liquid chromatography, using different experimental designs. Santos, L. (UFRJ); Silva, M. A. (UFRJ); Rhiel, C. A. da S. (UFRJ); Andrade, D. F. (UFRJ); Novaes, H. B. (UFRJ); Aguiar, P. F. (UFRJ)

ANA-115 COL-orimetric Method for Detect Methanol in Ethanol Fuel Fraud. Modesto, L. A. M. (IQAr-UNESP); Monteiro, M. R. (IQAr-UNESP); Flumignan, D. L. (IFSP-Matão)

ANA-116 Desenvolvimento e Otimização de Método para Determinação de Pb em Hortaliças por Espectrometria de Absorção Atômica em Forno de Grafite. Alves, L. (CEFET-MG); Jotta, V. F. M. (CEFET-MG); Rezende, P. S. (CEFET-MG)

ANA-117 Study of reaction conditions for the spectrophotometric determination of Total Organic Carbon (TOC) using KMnO₄ as oxidant. Sousa, E. B. (UFRRJ); Lã, O. R. (UFRRJ); Barra, C. M. (UFRRJ); Rocha Jr., J. G. (UFRRJ)

ANA-118 Análise de amostras de bijuterias contendo cádmio por potenciometria: avaliação de diferentes métodos de remoção de cobre. Dina, L. N. D. (UFTM); Alves, V. A. A. (UFTM); Silva, L. A. S. (UFTM)

ANA-119 BIO--carvão como adsorvente alternativo na remoção de ácidos naftênicos em água. Messias, M. S. (UFS); Nascimento, M. E. C. V. (UFS); Santos, R. M. (UFS); Damasceno, F. D. (UFS)

ANA-120 Compatibility of phenylephrine hydrochloride, paracetamol and chlorpheniramine maleate with talc by thermal analysis. Velasco, L. G. (UFG); Junior, A. C. B. (UFG); Costa, B. A. (UFG); Brito, C. C. S. M. (UFG); Matos, L. N. (UFG); Leles, M. I. G. (UFG)

ANA-121 Determinação espectrofotométrica de água em açúcares utilizando reação de descoloração do cloreto de cobalto. Carlos, W. A. (ESALQ-USP); Melchert, W. R. (ESALQ-USP)

ANA-122 Evaluation of photoderivatization as a tool for the fluorimetric determination of strobilurins. Valério, C. C. (IFRJ-Campus Realengo); Barbosa, E. F. (IFRJ-Campus Rio de Janeiro); Siqueira, D. E. U. S. (PUC-RIO); Almeida, J. (PUC-RIO); Aucélio, R. Q. (PUC-RIO); Macedo, R. C. (IFRJ-Campus Realengo); Cunha, A. L. M. C. (IFRJ-Campus Rio de Janeiro)

ANA-123 Removal of emerging contaminants from oil produced wastewater by using vermiculite modified by Fe₃O₄. Bartilotti Garcia, M. (IQAr-UNESP); Martínez-Huitle, C. A. (UFRN); Boldrin, M. V. (IQAr-UNESP)

BEA – Química de Alimentos e Bebidas

BEA-001 Behavior of Macro and Micronutrients in Erva Mate Infusion after Cd Bioaccumulation in Clonal Mini-Garden. Alves, C. M. A. C. (UFMS); Pardiniho, R. B. (UFMS); Vecchia, P. D. (UFMS); Pimentel, N. (UFMS); Bisognin, D. A. (UFMS); Duarte, F. A. (UFMS); Bolzan, R. C. (UFMS); Flores, É. M. M. (UFMS)

BEA-002 Evaluation of the black pepper drying step on the essential oil composition. RASCH, M. B. (UFES); JUVENATO, M. E. M. (UFES); HERINGER, O. A. (Tommasi Ambiental); VIEIRA, L. V. (UFES); BRANDÃO, G. P. (UFES); KUSTER, R. M. (UFES); CARNEIRO, M. T. W. D. (UFES)

BEA-003 Sequential determination of calcium and magnesium in water and milk using flow batch system and detection by webcam. SEVERO, E. A. (UTFPR); ROSA JUNIOR, M. Y. (UTFPR); CRUZ, S. L. G. S. (UTFPR); PAULA, P. L. (UTFPR); FLORES, E. L. M. (UTFPR); SANTOS, J. L. O. (UFOB); LEITE, O. D. (UTFPR)

BEA-004 Physical-chemical characterization of Bromelia antiacantha Bertol. fruits collected in Rio Grande do Sul. Marchi, M. I. (UNIVATES); Mann, M. A. (UNIVATES); Buhl, B. (UNIVATES); Scheibel, T. (UNIVATES); Dallazen, M. C. (UNIVATES); Hoehne, L. (UNIVATES); de Freitas, E. M. (UNIVATES); Ethur, E. M. (UNIVATES)

BEA-005 Stabilization of the free radical derived from the N,N,N',N'-tetramethyl-p-phenylenediamine and its use to quantify the antioxidant activity of teas. Nascimento do, F. F. D. (FMABC); Oliveira, L. B. (FMABC); Marcelino, C. P. (FMABC); Moya, H. D. (FMABC)

BEA-006 Quality Control of Functional Food Prepared with Quercetin. Ruela, H. S. (LFM); Fonseca, E. B. (LFM); Bueno, J. F. (LFM); da Silva, A. B. (LFM); da Rocha, N. S. (LFM); Ramos, Z. S. (LFM); de Figueiredo, C. D. M. (LFM)

BEA-007 Comparative study of simple and rapid methodologies for the detection of formaldehyde in milk. Paulino Neto, J. (Macofren Tecnologias Químicas); Onésio Ferreira Filho, A. (Macofren Tecnologias Químicas); Oliveira, B. (Macofren Tecnologias Químicas); Santana Oliveira, R. (Macofren Tecnologias Químicas); Oliveira, M. C. (Macofren Tecnologias Químicas); Gomes, N. (Macofren Tecnologias Químicas); Silva, C. E. (Macofren Tecnologias Químicas)

BEA-008 Desenvolvimento de leite em pó e composto lácteo de búfala zero lactose e caracterização das propriedades físico-químicas durante shelf-life. Paula, I. L. (UFJF); Scaldini, E. B. (UFJF); Francisquini, J. A. (UFV); Perrone, I. T. (UFJF); Oliveira, L. F. C. (UFJF); Stephani, R. (UFJF)

BEA-009 Utilização de SPME e GC-MS no combate a fraudes na comercialização de carne bovina. Souza, D. S. (UEM); Prado, R. M. (UEM); Pilau, E. J. (UEM); Vitoriano, A. P. G. (UniCesumar); Porto, C. (UniCesumar)

BEA-010 Aromatic profile of top-fermented beers submitted to the dry hopping process: effect of dry hopping time and hop processing type. Duan, Ceola (UDESC); Ricardo Dagnoni, Huelsmann (UDESC); José Augusto, da Col (UDESC); Martendal, Edmar (UDESC)

BEA-011 Evaluation of phytate, mineral and polyphenol contents in a sample of Lablab purpureus L. Sweet. Rocha, B. L. F. (IFBA); Santos, S. R. C. (UNEB); Lopes, M. V. (UNEB); Almeida, D. T. (UFBA); Santos, W. P. C. (IFBA); Greiner, R. (MRI)

BEA-012 COMPOSIÇÃO NUTRICIONAL DE MAÇÃS DAS CULTIVARES PRIMÍCIA E PRINCESA. Schweitzer, B. (EPAGRI); Sachini, R. (UDESC); Scapin, V. L. (UNIARP); Petri, J. L. (EPAGRI)

BEA-013 Green analytical method for halogens and sulfur determination in pet foods by ion chromatography with conductivity and mass spectrometry detection. Rondan, F. S. (UFPEl); Scaglioni, P. T. (UFPEl); Balbinot, F. P. (UFPEl); Vinci, F. S. (UFPEl); Cruz, L. B. (UFPEl); Mesko, M. F. (UFPEl)

BEA-014 Antioxidant capacity of teas measured using the consumption of the free radical derived from N-(4-methoxyphenyl)-1,4-phenylenediamine. Oliveira, L. B. (FMABC); Marcelino, C. P. (FMABC); Moya, H. D. (FMABC)

BEA-015 Spectrophotometric method for quantification of the reducing capacity of teas based on the formation of Fe(II)/1,10-phenanthroline complex. Amorim, A. F. G. (FMABC); Marcelino, C. P. (FMABC); Moya, H. D. (FMABC)

BEA-016 Caracterização dos voláteis presentes na polpa de uvaia (*Eugenia pyriformis* Cambess) usando o método de microextração em fase sólida. Da Silva, A. F. R. (UFMT); Silveira, N. S. (UFMT); Melo, J. O. F. (UFSJ); Silva, M. R. (UFMG); Augusti, R. (UFMG); Reina, L. D. C. B. (UFMT)

BEA-017 Electronic nose based on ionogel doped with iron (III) oxide particles applied to detection of honey adulteration. Gonçalves, W. B. (IQUSP); Teixeira, W. S. R. (IQUSP); Pereira, J. G. (FMVZ-UNESP-Botucatu); Gruber, J. (IQUSP)

BEA-018 Avaliação dos teores minerais de amoras (*Morus nigra* L.). Pereira, P. T. C. (UNIARP); Goelzer, A. K. (UNIARP); Scapin, V. L. (UNIARP); Sachini, R. (UDESC); Schweitzer, B. (EPAGRI)

BEA-019 Quantitative analysis using a flatbed scanner and Automated Digital Image Analysis: Total Reducing capacity of Beers using the Folin-Ciocalteu assay. Krepsky, L. M. (FURB); Ledesma, C. M. (FURB); Borges, E. M. (FURB)

BEA-020 Determination of Sulfites in wine and food by gas diffusion microextraction: using espectrocolorimetric iron-phenanthroline method. Pereira, L. B. (IQAr-UNESP); Francisco, K. C. A. (IQAr-UNESP); Cardoso, A. A. (IQAr-UNESP)

BEA-021 Determination of metallic contaminants in chia seed oil using a greener sample preparation procedure based on RP-DLLME. Flores, E. L. M. (UTFPR); Beato, M. O. (UTFPR); Leite, O. D. (UTFPR); Ferreira, A. H. (UTFPR)

BIO – Química Biológica

BIO-001 Interaction Studies of the Recreational Drugs 25I-NBOH and 25I-NBOMe with Human Serum Albumin (HSA): A Spectroscopic Approach. de Barros, W. A. (UFMG); Borges, G. M. (UFMG); Queiroz, M. P. (UFMG); Silva-Neto, L. (UFMG); Santos, J. C. C. (UFAL); Figueiredo, I. S. (UFAL); de Fátima, Â. (UFMG)

BIO-002 Immobilization of Human purine nucleoside phosphorylase on magnetic particles. Ximenes, I. A. T. (UFF); Moraes, M. C. (UFF)

BIO-003 Green Biosynthesis of Gold Nanoparticles using *Sargassum cymosum*: Effect of Temperature and Antimicrobial Activity. da Costa, L. H. (UNIVALI); Hemmer, J. V. (UNIVALI); Gerlach, O. M. S. (UNIVALI); Cruz, A. B. (UNIVALI); Ehrhardt, A. (UNIVALI); Tamanaha, M. S. (UNIVALI); Almerindo, G. I. (UNIVALI)

BIO-004 Preparation of beta-caryophyllene derivatives for evaluation of anxiolytic potential in the zebrafish model. Silva, L. O. (UFPA); Viana, J. S. (UFPA); Paes, S. S. (UFPA); Bezerra, F. A. S. (UFPA); Junior, M. L. L. (UFPA); Oliveira, D. G. (UFPA); Guilhon, G. M. S. P. (UFPA); Santos, L. S. (UFPA); Silva, W. L. L. (UFPA); Alves, C. N. (UFPA); Silva, A. M. H. O. (UFPA)

BIO-005 Extraction and partial characterization of lectin from *Lecythis pisonis* Camb. barks. Gonzatto, V. (UFPI); Albuquerque, L. P. (UFPI); Carvalho, E. P. (UFPI)

BIO-006 Interaction studies of recreational drugs with ctDNA by spectroscopic techniques simulating in vitro conditions. Nunes, C. S. (UFAL); Barros, W. A. (UFMG); Borges, K. R. (UFAL); Vital, C. A. (UFAL); Silva, M. M. (UFAL); Queiroz, M. P. (UFMG); Fátima, A. (UFMG); Santos, J. C. C. (UFAL); Figueiredo, I. M. (UFAL)

BIO-007 Expression of Methyltransferases hTrm9L e Trm112 from *Homo sapiens* for Future Structure Solution. Penteado, R. F. (UEPG); Iulek, J. (UEPG)

BIO-008 Chemical and biological evaluation of *Penicillium purpurogenum* extracts. Santiago, P. A. L. (UFAM); Junior, G. P. B. (FIOCRUZ); Leão, L. Q. S. (UFAM); Soares, E. R. (UFAM); Almeida, R. A. (UFAM); Nunomura, R. C. S. (UFAM); Aquino, P. F. (FIOCRUZ)

BIO-009 An ultrathin film membrane based on a nano-channeled reduced graphene oxide with enhanced antibacterial properties. Mancinelli, M. M. (UNIFE); Iorio de Castro, E. I. C. (UPM); Pedrotti, J. J. P. (UPM); Martucci, A. M. (UNIFE); Di Bonaventura, G. D. B. (UNICH); Rosatelli, G. R. (UNICH); Pompilio, A. P. (UNICH); Marchetti Maroneze, C. M. M. (UPM); Sousa, N. C. O. S. (UPM)

BIO-010 Exploring the rumen fluid metabolome using Molecular network. Almeida, R. T. R. (UEM); Zanzarin, D. M. (UEM); PRADO, R. M. (UEM); PORTO, C. (UnicEsumar); DOS SANTOS, G. T. (UEM); Huws, S. A. (QUEENUSU); PILAU, E. J. (UEM)

BIO-011 Influência de solventes orgânicos e sais de cloreto sobre a atividade da lipase de *Aspergillus niger* 11T53A14. Costa, M. C. C. (UERJ); Coelho, G. A. (UERJ); Lopes, L. G. (UERJ); Senra, J. D. (UERJ); Couri, S. (UERJ); Fontes-Sant'Ana, G. C. (UERJ)

CAT – Catálise

CAT-001 Properties of PLA polymers produced by heterogeneous catalytic polycondensation of D,L-lactic acid. Paiva, M. F. (UnB); França de, J. O. C. (UnB); Chafran, L. S. (UnB); Sales, M. J. A. (UnB); Dias, S. C. L. (UnB); Dias, J. A. (UnB)

CAT-002 Design of sustainable catalysts derived from gum arabic for organophosphate degradation: functionalization with hydroxamic acids. Takarada, W. H. (UFPR); Ferreira, J. G. L. (UFPR); Riegel-Vidotti, I. C. (UFPR); Orth, E. S. (UFPR)

CAT-003 Copper-Supported ZSM-5 Zeolite: Catalysts with High Catalytic Activity for Chemical Transformation of Limonene. Maffi, G. M. (UFPR); Schwanke, A. J. (UFRGS); Balzer, R. (UFPR)

- CAT-004 Optimization of short chain polyglycerols production for cosmetic applications.** Andrade, J. M. A (ISI Biomassa); Figueiredo, N. G. (INT); Filho, J. C. D (ISI Biomassa); Alves, B. J. (INT); Azevedo, P. V. N. (ISI Biomassa); Castro, L. F. (INT); Chiapetta, S. C. (INT); Gaspar, A. B. (INT); Machado, A. C. O (ISI Biomassa)
- CAT-005 Reactive dye degradation and decolorization: A convenient study applying two DyP-type peroxidases (TfuDyP and SviDyP).** Schreiber, C. S. (UFSC); Brondani, P. B. B. (UFSC); Souza, F. M. F. S (UFSC); Zapp, E. Z. (UFSC)
- CAT-006 Au-Pd selectivity-switchable oxidation catalyst: controlling the duality of the mechanism with a multivariate approach.** De Moura, E. M. (UFPI); Melo, I. E. M. S. (UFPI); De Sousa, S. A. A. (UFPI); Pereira, L. N. S. (UFPI); Oliveira, J. M. (UFPI); Castro, K. P. R. (UFPI); Costa, J. C. S. (UFPI); De Moura, C. V. R. (UFPI); Garcia, M. A. S. (UFPI)
- CAT-007 Desenvolvimento de um catalisador heterogêneo ácido para reação de esterificação a partir de um rejeito de minério de ferro.** Prates, C. D. (UFMG); Lago, R. M. (UFMG); Teixeira, A. P. C. (UFMG)
- CAT-008 Photocatalysis of Ciprofloxacin using tin titanate nanotube.** Costa, L. N. (UFPI); Matos, J. M. E. (UFPI)
- CAT-009 Synthesis of nickel hydroxide and the interactions with carbon nanotubes.** Bassani, J. C. (UFSC); Mezalira, D. Z. (UFSC)
- CAT-010 Sistemas catalíticos para a síntese de ditiocarbonatos e tritiocarbonatos cíclicos a partir de epóxidos e dissulfeto de carbono.** Ribeiro, S. L. da S. (UFG); Meireles, A. M. (UFMG); Das Chagas, R. P. (UFG); Barros, O. S. do R. (UFG); Martins, D. C. da S. (UFMG)
- CAT-011 Synthesis and Characterization of Cu/CNT Heterogeneous Catalyst for Application in Click Chemistry.** Maroli, C. (UFSC); Saba, S. (UFSC); Pimentel, T. (UFMS); Rafique, J. (UFMS); Mezalira, D. Z. (UFSC)
- CAT-012 CAT-alytic activity of Fe₃-xMxO₄ (0?x?0,16; M=V⁵⁺, W⁶⁺) nanoparticles applied in the heterogeneous solar photo-Fenton process.** Júnior, F. E. B (UFGD); Pinheiro, A. C. N (UFGD); Barros, W. R. P (UFGD)
- CAT-013 Synergistic effect of ruthenium complexes on the hydrogenation of 4-nitrophenol catalyzed by gold nanoparticles.** Pessoa, M. H. O. (UFU); Dinelli, L. R. (UFU); Bogado, A. L. (UFU)
- CAT-014 Síntese assistida por microondas de biaril-bases de Schiff.** Lopes Jr, M. A. A (UFRJ); Santos, D. C. (UFRJ); Souza, A. L. F. (UFRJ)
- CAT-015 Bimetallic Au-Pd nanoparticles for the light-driven Suzuki reaction.** Silva, V. A. S. (UFRJ); Ramos, V. S. (UERJ); Campos, J. B. (UERJ); Silva, A. A. (UERJ); Malta, L. F. B. (UFRJ); Senra, J. D. (UERJ)
- CAT-016 Layered double hydroxides as catalysts for the borylation of aryl halides.** Silva, L. C. L. L. F. (UFRJ); Neves, V. A. (UFRJ); Ramos, V. S. (UERJ); Silva, R. S. F. (IFRJ); Campos, J. B. (UERJ); Silva, A. A. (UERJ); Malta, L. F. B. (UFRJ); Senra, J. D. (UERJ)
- CAT-017 Renewable chemicals production through lignin hydrogenolysis.** Moreira, V. R. (PUC-MG); Lebron, Y. A. R. (PUC-MG); Patto, B. L. (PUC-MG); Carvalho, T. N. (PUC-MG); Santos, L. V. S. (PUC-MG); Foston, M. (PUC-MG)
- CAT-018 Cooperative catalysis for reductions and reductive aminations using formic acid as hydrogen source.** Florio, J. L. (IQUSP); Araújo, T. P. (IQUSP); Barbosa, E. C. M. (IQUSP); Quiroz, J. (IQUSP); Camargo, P. H. C. (IQUSP); Rossi, L. M. (IQUSP)
- CAT-019 Niobium on dealuminated BEA zeolite as efficient catalyst for dehydration of ethanol to diethyl ether.** Valadares, D. S. (UnB); Clemente, M. C. H. (UnB); Lacava, A. B. (UnB); Barbosa, L. S. (UnB); Martins, G. A. V. (UnB); Dias, J. A. (UnB); Dias, S. C. L. (UnB)
- CAT-020 Preparação de catalisador de ferro / carbono a partir de resíduo de biodiesel para oxidação de contaminantes orgânicos.** Gonçalves, M. (UNIFESP-SJC); Mendonça, T. A. P. (UNIFESP-SJC); Silva, A. C. F. (UNIFESP-SJC)
- CAT-021 Organotin(IV) catalysts: investigation in esterification of oleic acid and glycerol.** da Silva, M. A. (UFAL); dos Santos, A. S. S. (UFAL); Neto, A. J. S. (UFAL); Giertyas, C. J. (UFAL); Bortoluzzi, J. H. (UFAL); MENEGHETTI, M. R. (UFAL); MENEGHETTI, S. M. P. (UFAL)
- CAT-022 Influence assessment of the synthesis ferrite from mineral wastes in crystal violet dye degradation by Photo-Fenton process.** Biazati, L. B. (UFES); Lelis, M. F. F. (UFES); Castro, E. V. R. (UFES); Coutinho, B. A. (UVV); Dipalma, M. G. V. (UVV)
- CAT-023 Cloração do cicloexano com ácido tricloroisocianúrico catalisada por Cu(II) suportados em zeólitas.** Neves, E. S. (UENF); Maciel, J. S. (IFF); Horn, C. F. (UENF); Lube, L. M. (IFF); Horn Jr., A. (UENF)
- CAT-024 Magnetic nanocatalysts in a green route for short peptides production.** Ungaro, V. A. (IQUSP); Fairbanks, J. P. A. (IQUSP); Rossi, L. M. (IQUSP); Machini, M. T. (IQUSP)
- CAT-025 Whole-Cell Biocatalysts approach for Enantioselective Oxidation by Ab ADH enzyme from Psychrotrophic Arthrobacter sp. 7749.** Santos, L. P. (IQUSP); Sastre, D. E. (IFSC-USP); Kagohara, E. (IQUSP); Lobo, B. A. (IQUSP); Navarro, M. V. A. S. (IFSC-USP); Andrade, L. H. (IQUSP)
- CAT-026 Niobium-based modified materials and its particularities as semiconductors for photocatalysis.** Silva, I. F. B. (CEFET-MG); dos Santos, T. A. R. (UFMG); Rosmaninho, M. G. (UFOP); Moura, F. C. C. (UFMG)
- CAT-027 BIO--diesel obtained from catalysts based on Ca²⁺/serpentinite.** Vieira, S. S. (UFMG); Vieira, B. A. (UFMG); Santos, A. J. F. (UFMG); Teixeira, A. P. C. (UFMG); Araújo, M. H. (UFMG); Lago, R. M. (UFMG)
- CAT-028 High Energy Ball-Milling synthesis of CuO nanoparticles and its catalytic performance for nitroarenes reduction.** Schio, A. L. (UCS); Soares, M. R. F. (UCS); Barcellos, T. (UCS)
- CAT-029 Investigating synergistic effect in gold nanoparticles and CeO₂ nanorods for photocatalytic production of imines.** Homsí, M. S. (IQUSP); Geonmonond, R. S. (IQUSP); Rocha, G. F. S. R. (IQUSP); Silva, I. F. (UFMG); Tsang, E. (OX-UK); Camargo, P. H. C. (IQUSP); Teixeira, I. F. (IQUSP)
- CAT-030 The challenge of reactions with sterically hindered terpenes: metathesis of β -pinene with dimethyl maleate.** Fernandes, L. S. (UFABC); Bruneau, C. (CNRS); Fischmeister, C. (CNRS); Mandelli, D. (UFABC); Carvalho, W. A. (UFABC); dos Santos, E. N. (UFMG); Dixneuf, P. H. (CNRS)

- CAT-031** **Supramolecular aggregates of cetyltrimethyl ammonium, polyacrylic acid and alkyl imidazole applied in dephosphorylation reactions.** Demos, W. (UFSC).
- CAT-032** **Kinetic evaluation of the effect of stabilizers on the catalytic activity of Ru-NPS in hydrogenation and nitroaromatic reduction reactions.** Zaramello, L. (UFSC); Gonzalez, R. (CNRS); Philippot, K. (CNRS); Domingos, J. B. (UFSC)
- CAT-033** **Au/TiO₂ Catalyst to CO₂ Conversion to Higher Alcohols.** Neves-Garcia, T. (IQUSP); Vidinha, P. (IQUSP); Rossi, L. M. (IQUSP)
- CAT-034** **Gold supported on strontium surface-enriched CoFe₂O₄ nanoparticles: a strategy for the selective oxidation of benzyl alcohol.** Pereira, L. N. dos S. (UFPI); Ribeiro, C. E. S. (UFPI); Tofanello, A. (UFABC); Costa, J. C. S. (UFPI); Moura de, C. V. R. (UFPI); Garcia, M. A. S. (UFPI); Moura de, E. M. (UFPI)
- CAT-035** **Multicomponent Synthesis of Highly Stereoselective Pyrrolidine Derivatives.** Lima, R. N. (UFSCar); Pérez, R. E. (UFSCar); da Silva, V. A. F. (UFSCar); Broterson, Y. B. (UFSCar); Vicente, F. E. M. (UFSCar); Corrêa, A. G. (UFSCar); Rivera, D. G. (UH); Paixão, M. W. (UFSCar)
- CAT-036** **CO₂ Hydrogenation to Methanol and Dimethyl Ether (DME) over Modified-γ-Alumina Bifunctional Catalysts.** Almeida, G. C. (UFRJ); Carvalho, D. F. (UFRJ); Monteiro, R. S. (UFRJ); Mota, C. J. A. (UFRJ)
- CAT-037** **Optimization of catalytic oxidation of cyclohexane and benzyl alcohol mediated by an iron(+3) complex.** Xavier, F. R. (UDESC); Vailati, A. F. (UFSC); Huelsmann, R. D. (UDESC); Martendal, E. (UDESC); Peralta, R. A. (UFSC)
- CAT-038** **Designing Hybrid Nickel Catalysts for CO₂ Hydrogenation.** Arpini, B. H. (IQUSP); Braga, A. H. (IQUSP); Rossi, L. M. (IQUSP)
- CAT-039** **Preparation and characterization of palladium-based polymeric composite: application in coupling reaction with greener approaches.** Nishida, E. N. (UFSC); Zaramello, L. (UFSC); Leopoldino, E. C. (UFSC); Affeldt, R. F. (UFSC); Centurion, H. A. (UFSC-USP); Gonçalves, R. V. (UFSC-USP); Souza, B. S. (UFSC)
- CAT-040** **Development of Nickel Catalysts embedded in N-doped Carbon for selective hydrogenation of alkynes to alkenes.** Ferreira da Costa, J. V. (IQUSP); Arpini, B. H. (IQUSP); Rossi, L. M. (IQUSP)

COL – Química de Superfícies e Colóides

- COL-001** **Formulation and characterization of oil-in-water emulsions containing Selol stabilized by folic acid-modified Pluronic F-127 copolymer.** Ferreira, S. F. A. (UFG); Lima, E. C. D. (UFG)
- COL-002** **Stability of silica nanoparticles modified with both hydrophobic and hydrophilic silanes.** Santos, B. P. A. (UNICAMP); Bertran, C. A. (UNICAMP)
- COL-003** **Balance between CTAB-dye and CTAB-polymer interactions determining partition behavior of anionic dye in aqueous two-phase systems.** Reis, W. J. (UFOP); Penido, J. A. (UFOP); Ferreira, G. M. D. (UFOP); Mageste, A. B. (UFOP)
- COL-004** **Synthesis and characterization of capsules based on conductive polymers.** Biazzi, J. C. (UFPR); Tonet, G. A. (UFPR); Vidotti, M. (UFPR); Riegel-Vidotti, I. C. (UFPR)
- COL-005** **Kinetic sorption of bovine serum albumin onto chemically modified chitosan.** dos Anjos, F. S. C. (UNIVASF); Cestari, A. R. (UFS)
- COL-007** **A calorimetric study on the formation of inclusion complexes between Brij surfactants and β-cyclodextrin.** Marques, I. A. (UFV); Agudelo, A. J. P. (UFV); Coelho, Y. L. (UFV); Moreau, P. S. (UFV); Pires, A. C. S. (UFV); da Silva, L. H. M. (UFV)
- COL-007** **The nano-bio interface on nanobioplasmonic catalysts: enzyme-gold nanoparticles interaction to enhance enzymatic activity under light.** Barros, H. R. (IQUSP); Torresi, S. I. C. (IQUSP); Camargo, P. H. C. (IQUSP)
- COL-008** **Synthesis of CdTe quantum dots: Evaluation of Reaction Parameters and of the Dependent Optical Properties.** Lima, L. C. O. (UNIFAL); Rosa, L. T. A. (UNIFAL); Aguiar, C. D. (UNIFAL); Aversa, I. S. (UNIFAL); Raphael, E. (UNIFAL); Virtuoso, L. S. (UNIFAL)
- COL-009** **Dye Adsorption Study from Aqueous Solution on a Hybrid Material.** Filippi, N. G. (UFSC); Volpato, H. A. M. (UFSC); Caro, M. S. P. (UFSC)

EDU – Ensino de Química

- EDU-001** **Lise Meitner e a fissão nuclear: buscando caminhos para a reflexão do papel da mulher na ciência.** Guimaraes, L. P. (IFRJ - Campus Nilópolis); DE CASTRO, D. L. (IFRJ - Campus Nilópolis)
- EDU-002** **A presença e inserção da mulher cientista em um Programa de Pós-Graduação em Química: reflexões sobre as questões de gênero.** Novais, L. M. R. (UFPR); Prado, I. P. (UFPR); Silveira, C. (UFPR)
- EDU-003** **Corrosion and Environment - Active Methodology in Chemistry Laboratory.** Vargas, M. S. N. (UFF); Hottz, C. M. (UFF); Maciel, V. E. M. (UFF); Amorim, V. (UFF); Amaral, M. C. (UFF); Oliveira, V. E. (UFF)
- EDU-004** **Percepções dos professores de Química sobre a inclusão digital nas escolas do sertão pernambucano: um estudo de caso.** Silva, B. R. F. (UFRPE); Silva Neto, S. L. (UFRPE); Leite, B. S. (UFRPE)
- EDU-005** **Fostering the development of representational competence skills: the case of computer-based simulation of acid-base titrations.** Araujo, Y. B. (IQUSP); Marson, G. A. (IQUSP)

- EDU-006 Teaching density in a plural perspective on learning: a case study in higher education.** ALMEIDA, D. C. A. R. (IQAr-UNESP); GODOI, D. R. M. (IQAr-UNESP); BEGO, A. M. (IQAr-UNESP)
- EDU-007 “OUR DAYLY CHEMISTRY”: THE USE OF A DIDACTIC SEQUENCE IN THE PERIODIC TABLE TEACHING.** RODRIGUES, A. P (UVA); LEITE, L. R (UVA)
- EDU-008 Baralho Da Tabela Periódica: Para O Ensino E Aprendizagem Das Propriedades Periódica E Aperiódica Da Tabela Periódica.** Silva, T. L. (UNIFESSPA); Rocha, J. M. L. (UEPA); Neto, F. C. S. (UEPA); Silva, T. R. (UEPA); Nascimento, R. R. C. (UEPA); Brito, E. A. (UEPA); Barreira, R. Q. (UEPA); Oliveira, E. B. (UEPA)
- EDU-009 Gelatina fluorescente: uma demonstração em comemoração ao Ano Internacional da Tabela Periódica 2019.** Barros, J. C. (UFRJ); Michel, R. C. (UFRJ); Goulart, J. S. (UFRJ); Jaconianio, Y. R. (UFRJ)
- EDU-010 Contribuições do NUPEC na profissionalização da carreira docente para as áreas de ensino de química das IES em Goiás.** Mesquita, N. A. S. (UFG); Soares, M. H. F. B. (UFG)
- EDU-011 Relato de uma Oficina de fotocatalise como forma de conscientização ambiental e aproximação entre Ensino Superior e Educação Básica.** Reis, VSR (UNEB); Reboças, LMR (UNEB); Penha, AFP (UNEB); Souza, MOGS (UNEB)
- EDU-012 O jogo de dominó como uma estratégia de ensino na área de química inorgânica.** Oka, T. N. (UFPR); Alberti, E. R. (UFPR); Machado, G. S. (UFPR)
- EDU-013 Uma abordagem de química utilizando a experimentação no ensino médio.** Silva, E. C. C. (FAMETRO); Melo, A. M. D. (FAMETRO); Barbosa, A. C. (FAMETRO); Fortes, A. Z. S. (FAMETRO); Ribeiro, D. C. (FAMETRO); Neta, D. R. S. (FAMETRO); Avelino, L. M. (FAMETRO); Sousa, M. S. (FAMETRO); Sena, Y. W. B. (FAMETRO); Silva, M. S. (FAMETRO); Souza, S. S. (FAMETRO); Costa, T. S. (FAMETRO); Medeiros, A. D. (FAMETRO); Rebelo, M. C. (FAMETRO)
- EDU-014 Ensino de química em centro de recuperação através de oficinas: uma experiência com alunos do ensino médio.** Oliveira, D. C. B. (UEPA); Silva, L. O. (UEPA)
- EDU-015 Realização e execução de um curso para conscientização da poluição atmosférica como prática de ensino de graduandos do PIBID.** Mendonça, M. L. T. G. (IFRJ); Cruz, R. P. (UFRRJ); Castilho, R. B. (UFRRJ); Marques, V. S. (UFRRJ); Costa, L. D. R. (UFRRJ); Marinho, S. F. M. (UFRRJ); Silva, M. B. C. (UFRRJ); Silva, I. O. (UFRRJ); Lima, T. R. Q. (UFRRJ); Sarmiento, J. P. (UERJ)
- EDU-016 As instituições de ensino superior brasileiras e suas relações geográficas.** Silva, L. C. (); Feliciano, J. M. O. (UFTM); Silva, L. C. (UFTM); Ornellas, J. F. (UFTM)
- EDU-017 Desafios e possibilidades de inclusão em IFES: Uma análise a partir de relatos de licenciandos em química da UFTM.** Sampaio dos Santos, M. S. S. (UFTM); Manoel Oliveira Feliciano, J. M. O. F. (UFTM); Caixeta Barboza, L. C. B. (UFTM)
- EDU-018 As mulheres no Ensino Superior de Química: um estudo sobre a representação feminina no cargo docente de uma Universidade Pública.** Ferreira, G. (UFPR); Souza, A. A. (UFPR); Araújo, I. P. (UFPR); Silveira, C. (UFPR)
- EDU-019 Contribuições da temática automedicação no ensino de química orgânica para o processo de act no ensino médio.** Serpe, A. P. (UFPR); Hellinger, R. (UFPR); Guimarães, O. M. (UFPR)
- EDU-020 A Short ARG (Alternate Reality Game) in High School.** Deus, T. C. (UFG); Mesquita, N. A. S. (UFG); Soares, M. H. F. B. (UFG)
- EDU-021 O uso de aplicativos para Android como ferramenta pedagógica no ensino de Química.** Soares, L. F. (UFC); Silva, M. G. V. (UFC)
- EDU-022 Contribuições do PIBID e a práxis pedagógica na formação inicial de estudantes de licenciatura em Química do Instituto Federal de São Paulo.** Oliveira, L. A. (IFSP); Ferreira, L. G. (IFSP); Bazon, P. C. (IFSP); Camilo, M. T. (IFSP); Romero, J. H. S. (IFSP)
- EDU-023 Cientifi-CIDADE e o uso de redes sociais para a divulgação científica.** Orsi, C. (UDESC); Pereira, C. D. (UDESC); Naidek, K. P. (UDESC); Oliveira, B. R. M. (UDESC)
- EDU-024 Construção de uma horta escolar: contextualização e interdisciplinaridade no ensino de Química.** Erchenberger, G. (IFSP); Rodrigues, V. S. (IFSP); Bueno, H. Q. (IFSP); Silva, R. L. (IFSP); Romero, J. H. S. (IFSP)
- EDU-025 Contributions “Do it yourself” in the training of chemistry teachers: the design of a vocalized pH meter for students with visual impairment.** Morais, A. A. A. (UFG); Faria, B. M. G. (UFG); Vargas, G. N. (UFG); Alves, D. R. (UFG); Araújo, R. J. S. (UFG); Oliveira, M. S. G. (UFG); Benite, A. M. C. (UFG); Benite, C. R. M. (UFG)
- EDU-026 Um jogo para revisão de conteúdo de Química Orgânica no contexto do programa de Residência Pedagógica: desenvolvimento e aplicação.** Velloso, A. B. S. (IFSP-Matão); Silva, E. C. S. (Educação-SP); Toledo, J. B. (IFSP-Matão); Souza, R. A. de (Educação-SP)
- EDU-027 Teaching and Learning Organic Chemistry According to High School Teachers.** Batista, B. M. (UFRGS); Passos, C. G. (UFRGS); Pazinato, M. S. (UFRGS)
- EDU-028 Um estudo sobre as práticas pedagógicas no ensino de Química com turmas do ensino médio.** Andrade, M. V. (FAMETRO); Costa, E. C. (FAMETRO); Silva, J. F. (FAMETRO)
- EDU-029 Tintas indígenas e o Ensino de Química.** Braibante, M. E. F. (UFSM); Vanuchi, V. C. F. (UFSM)
- EDU-030 StoichiometryGame: an alternative method for the General Chemistry teaching in the Pharmacy graduation course.** Thedy, M. E. C. (UNIPAMPA); Azeredo, J. B. (UNIPAMPA)
- EDU-031 Teaching of Analytical Chemistry for the course of Zootechnics: Proposal of contextualized experimental activities.** Souza, D. M. (UFSM); Reichert, J. F. (UFSM); Klein, V. (UFSM); Mello, P. de A. (UFSM)

- EDU-032 Flipped Classroom and Project Based Learning: a Great Combination for Organic Chemistry Laboratory.** Mendes, S. R. (UDESC); Silva, M. S. (UDESC); Meirinho, A. G. (UDESC); Pereira, V. F. (UDESC)
- EDU-033 Oxirredução - um desafio sem a experimentação.** Carvalho, P. D. (UEMG); Soares Jr, A. L. (CEFET-MG)
- EDU-034 Um dia no IFSP Catanduva: projeto de extensão articulado a formação inicial de licenciandos em Química.** de Lima, P. G. (IFSP); Barbosa, V. E. (IFSP); Romero, J. H. S. (IFSP)
- EDU-035 Análise de softwares de edição para a produção de videoaulas no projeto "Química na Palma da Mão".** Maia, D. J. (IFSP); Silva, M. J. C. (IFSP-Capivari); Medeiros, J. B. de (IFSP-Capivari); Duarte, E. A. (IFSP); Martins, L. Q. (IFSP-Capivari)
- EDU-036 A representação feminina em um Curso Superior de Química: um estudo sobre as relações de gênero.** Bringmann, M. B. (UFPR); Santos, D. S. (UFPR); Silva, C. S. (UFPR)
- EDU-037 Alfabetização científica e abordagem CTS no ensino de Ciências: um relato de experiência no ensino fundamental.** Tambellini, M. (); Cabral, D. A. (); Romero, J. H. S. (); Lima de, F. E. (IFSP)
- EDU-038 Momento Químico: uma análise preliminar acerca da circulação de um jornal acadêmico.** Benkendorf, R. (UDESC); Oliveira, B. R. M. (UDESC); Sell, F. S. F. (UDESC); Comiotto, T. (UDESC)
- EDU-039 Psicologia da Educação: uma experiência no curso de Licenciatura em Química.** SILVEIRA, L. L. da (UDESC); SILVA, J. da (UDESC)
- EDU-040 O uso de Weblog para a publicação do Jornal Momento Químico.** Rocha, C. E. (UDESC); Stöhr, D. (UDESC); Tarnowski, K. S. (UDESC); Silveira, L. L. (UDESC); Kunicki, L. (UDESC); Oliveira, G. B. (UDESC); Benkendorf, R. (UDESC); Speranza, L. (UDESC); Oliveira, B. R. M. (UDESC); Sell, F. S. F. (UDESC); Comiotto, T. (UDESC)
- EDU-041 Construção de equipamentos de laboratório com materiais alternativos para aulas experimentais de separação de misturas.** Lopes Júnior, M. L. (UFPA); Dantas, G. B. O. (UFPA); Santos, L. S. (UFPA); Ribeiro, W. S. (UFPA); Paes, S. S. (UFPA); Corrêa, M. J. C. (UFPA); Araújo, R. N. M. (UFPA); Silva, L. O. (UFPA); Romero, O. A. S. (UFPA); Quaresma, S. B. (UFPA)
- EDU-042 The determination of the ethanol content in common gasoline as an experimental activity for the teaching of chemistry in education of youth and adults.** Silva, C. C. (IFG); Ficks, E. C. R. (IFG)
- EDU-043 A experimentação como metodologia ativa de ensino-aprendizagem em Química no Ensino Médio.** Hudzinski, A. V. (UNESPAR-Campus União da Vitória); Piovesan, J. V. (UNESPAR-Campus União da Vitória)
- EDU-044 Aspectos Pedagógicos em artigos da seção "Experimentação no Ensino de Química" da QNesc: de 2014 a 2018.** Receptui, C. C. (IQUSP); Pereira, T. M. (IQUSP); Rezende, D. B. (IQUSP)
- EDU-045 Sabão artesanal: uma proposta de educação ambiental sustentável para barracas da praia do Chapéu Virado, em Mosqueiro - PA.** Sá, A. J. B. (UEPA); Trindade, G. M. S. (UEPA); Carneiro, C. R. O. (UEPA); Freitas, L. P. B. (UEPA); Terra, I. A. (UEPA)
- EDU-046 Recurso Audiovisual: Uma Proposta Pedagógica para o Ensino de Química em uma Escola no Distrito de Mosqueiro-PA.** Carvalho, J. A. (UEPA); Trindade, G. M. S. (UEPA); Carneiro, C. R. O. (UEPA); Barros, C. R. (UEPA); Terra, I. A. (UEPA)
- EDU-047 Formação Inicial de Professores de Química e o uso de Filmes no ensino de História e Filosofia da Química.** Duarte, E. D. R. S. (UFRR); Panero, F. S. (UFRR); Cardoso, V. A. (UFRR); Taveira, M. L. (UFRR); Santos, R. C. (UFRR); Moreno, R. P. (UFRR)
- EDU-048 Development of skills in chemistry teaching by situation-problem.** Luigi, C. A. R. (IF-USP); Marcondes, M. E. R. (IQUSP)
- EDU-049 Infográficos e seus impactos na sala de aula.** Cruz, R. P. (UFRRJ); Castilho, R. B. (UFRRJ); Mendonça, M. L. T. G. (IFRJ); Silva, I. O. (UFRRJ); Costa, L. D. R. (UFRRJ); Lima, T. R. Q. (UFRRJ); Louzada, S. H. (UFRRJ); Araújo, L. D. (UFRRJ); Sarmiento, J. P. (UERJ)
- EDU-050 CONTRIBUIÇÕES DA EDUCAÇÃO MIDIÁTICA NO COMBATE ÀS FAKE NEWS PARA O PROCESSO DE ACT NO ENSINO DE QUÍMICA.** VETTORI, R. P. (UFPR); SANTOS, J. (UFPR); LEME, L. B. P. (UFPR); GUIMARÃES, O. M. (UFPR)
- EDU-051 Uma abordagem sobre Museus, Gabinete de Curiosidades e Química.** Nalepa, K. T. (UNIVALI); De Bona, T. F. (UNIVALI); Dias, C. (UNIVALI); Grigolo, J. (UNIVALI); Costódio, P. F. S. (UNIVALI); Ehrhardt, A. (UNIVALI); Almerindo, G. I. (UNIVALI)
- EDU-052 O ensino de Química no contexto da educação indígena: Produção de tinta corporal de urucum.** Nóbrega, L. N. N. (UFG); Benite, C. R. M. (UFG); Paula, R. S. G. (PUC-GO); Souza, A. F. S. (PUC-GO)
- EDU-053 Use of mini-course on thermal analysis as a tool for the contextualization of chemistry in the classroom.** Martins, F. F. (IFRJ-Campus Duque de Caxias); Azevedo, E. M. (IFRJ-Campus Duque de Caxias)
- EDU-054 Brazilian in-service chemistry teachers' misconceptions concerning chemical kinetics.** Castro, P. M. A. (IQUSP); Goes, L. F. (IQUSP); Vairolette, L. (UNIFESP-Diadema); Fernandez, C. (IQUSP); Agostinho, S. M. L. (IQUSP)
- EDU-055 Interest in science learning and scientific career for high school students.** KOENTOPP, A. C. (UDESC); SILVA, L. B. (UDESC); MACENO, N. G. (UDESC)
- EDU-056 DESCOBRINDO A CIÊNCIA: ENSINANDO QUÍMICA ATRAVÉS DE ASSUNTOS COTIDIANOS.** Mariano Junior, D. R. (UFRRJ); Rocha, G. X. (UFRRJ); da Silva, L. C. L. (UFRRJ); Louzada, S. H. (UFRRJ); Almeida, R. C. (UFRRJ); Batista, A. O. (UFRRJ); Azeredo, M. S. (UFRRJ); Faria, P. R. S. (UFRRJ); Carreiro, A. P. (UFRRJ); Almeida, V. G. K. (UFRRJ); de Carvalho, M. G. (UFRRJ); Souza, A. E. (UFRRJ)
- EDU-057 A química do petróleo através de uma didática de ensino humanizadora.** Bezerra, Y. M. S. (UFRR); Dutra, K. O. (UFRR); Cardoso, V. A. (UFRR)
- EDU-058 O ensino de química por investigação nos planos elaborados por professores de Química.** Akahoshi, L. H. (IQUSP); Marcondes, M. E. R. (IQUSP); Souza, F. L. (IQUSP)

EDU-059 O cientista e suas características segundo as representações de estudantes do ensino médio. Santarelli, I. S. (UDESC); Pereira, C. D. (UDESC); Naidek, K. P. (UDESC); Oliveira, B. R. M. (UDESC)

EDU-060 Experimentando Ciência: formação continuada de professores(as), da teoria à prática. DIAS, B. G. (UFPR); SERPE, A. P. (UFPR); SANTOS, D. C. (UFPR); RAMOS, J. (UFPR); BIAZI, J. C. (UFPR); INÁCIO, J. G. (UFPR); MACHADO, J. T. (UFPR); JULIATTO, L. (UFPR); SILVA, L. A. (UFPR); SILVA, L. C. (UFPR); TERESKI, L. (UFPR); SACHI, M. M. (UFPR); HELLINGER, R. (UFPR); SANTOS, Y. P. (UFPR); MARQUES, F. A. (UFPR)

EDU-061 Proposição lúdica como atividade avaliativa do tema funções orgânicas. Souza de, R. A. (Educação-SP); Velloso, A. B. S. (IFSP-Matão)

EDU-062 Ensino baseado em desafios como metodologia de aprendizagem interdisciplinar: inovação pedagógica. Teodoro, B. I. (UFABC); Saponi, E. C. (UFABC); Silva, J. T. (UFABC); Gonçalves, K. R. (UFABC); Luiz, K. Z. (UFABC); Salcedo, W. J. (EPUSP); Jaimes, R. F. V. V. (UFABC)

EDU-063 Experimentação no ensino de células galvânicas para o ensino médio. Silva, L. A. da (UFTM); Diniz, B. P. (UFTM); Alves, A. S. (UFTM); Lemes, L. C. (UFTM); Alves, V. A. (UFTM)

EDU-064 Oficina Pedagógica: uma metodologia para a Alfabetização Científica no Ensino Fundamental em uma escola particular em Belém-PA. Trindade, G. M. S. (UEPA); Carneiro, C. R. O. (UEPA); Moreira, J. S. de A. (UEPA); Melo, J. T. (UEPA); Terra, I. A. (UEPA)

EDU-065 Proposals for the treatment of residues of practical dichromatometry and permanganometry lessons in UFRRJ. D'ávila, R. A. P. (UFRRJ); de Almeida, V. G. K. (UFRRJ); Rocha Jr., José Geraldo (UFRRJ); Mello, G. B. S. (UFRRJ); Xavier Jr., D. G. (UFRRJ)

EDU-066 Diversified methodologies as a facilitator of chemistry learning. Souza, N. L. T. (); Marinho, J. S. (); Miranda, R. M. (IFPA)

EDU-067 Impact analysis of the "1000 Future Scientists" project developed in DQ/UFMG with students of public basic education in Minas Gerais. Silva, J. P. (UFMG); Silva, W. T. (UFMG); Moreira, T. V. (UFMG); Assis, M. A. P. (UFMG); Sebastião, R. C. O. (UFMG)

EDU-068 O ano internacional da Tabela Periódica: Kit multi jogos para aprender brincando. Kobori, M. H. (); Pires, A. M. (); Gibin, G. B. ()

EDU-069 KMnO₄ as an alternative to K₂Cr₂O₇ in the Evaluation of Organic Carbon (OC) in Environmental Samples - Recovery Tests. Azevedo, C. C. (UFRRJ); Barra, C. M. (UFRRJ); Rocha Jr., J. G. (UFRRJ); Lã, O. R. (UFRRJ); Quinteiro, L. M. da C. (UFRRJ)

EDU-070 Tenda da Ciência: Ampliar os meios de ensino alternativos para a comunidade. Comiotto, T. (); Ignácio, M. P. (); Slominski, W. (); Lima, M. (); Santos, M. L. (UDESC)

EDU-071 Proposta de Sequência Didática aplicado em aulas experimentais de Química Inorgânica II da Universidade Federal de Alfenas-MG. Cordeiro, M. R. (); Guimarães, E. F. S. (UNIFAL)

EDU-072 Cientistas na Escola: Uma conexão entre ciência e ensino fundamental. Santos, Y. P. (UFPR); Serpe, A. P. (UFPR); Dias, B. G. (UFPR); Santos, D. C. (UFPR); Soares, D. P. (UFPR); Araújo, I. P. (UFPR); Ramos, J. (UFPR); Hellinger, R. (UFPR); Inácio, J. G. (UFPR); Machado, J. T. (UFPR); Juliatto, L. (UFPR); Silva, L. A. (UFPR); Silva, L. C. (UFPR); Marques, F. A. (UFPR); Briggmann, M. (UFPR)

ELE – Eletroquímica e Eletroanalítica

ELE-001 Electrodes modified with barley bagasse (*Hordeum vulgare*) developed for the voltammetric determination of Pb (II). Santos, D. J. A. (UEG-CCET); Bonifácio, V. G. (UEG-CCET); Araújo, C. S. T. (UEG-CCET)

ELE-002 Voltammetric Study of the New Chalcone Synthesized of a Natural Isolated Acetophenone from *Croton anisodontus*. Julião, M. S. S. (UVA); Silva, P. T. (URCA); Xavier, J. C. (URCA); Teixeira, A. M. R. (URCA); Santos, H. S. (UVA); Bandeira, P. N. (UVA); Silva, L. R. D. (UFC)

ELE-003 Tailoring of New Electrosynthesized copolymeric Near-Infrared Emitters Based on Donor-Acceptor (D-A) Molecular Hybrid Systems. Donnici, C. L. (UFMG); Calado, H. D. R. (UFMG); Ávila-Costa, M. (UFMG); Barros-Barbosa, A. (UFMG)

ELE-004 Tratamento de efluente de esgoto municipal pela técnica de coagulação química com coagulante natural (*Moringa Oleifera*). Barreto, L. C. P. (UFG-Catalão); Silva, L. F. (UFG-Catalão); Andrade, L. S. (UFG-Catalão)

ELE-005 Remoção eletroquímica de PhenonipTM usando ânodo de mistura de óxidos metálicos comercial. Nakamura, R. (IQSC-USP); Motheo, A. J. (IQSC-USP)

ELE-006 Electrochemical characterization of PEDOT and PEDOT-AuNPs modified electrodes and its application as an impedimetric sensor. Soares, D. P. (UFPR); Soares, A. L. (UFPR); Marchesi, L. F. (UFPR); Vidotti, M. (UFPR)

ELE-007 Electrodeposition of copper-indium alloys from non-aqueous solutions. Assis, D. A. (UFC); Sousa, C. P. (UFC); Campos, O. S. (UFC); de Lima-Neto, P. (UFC); Correia, A. N. (UFC)

ELE-008 Electrochemical study of PPy / CG conductive composite on different electroactive surfaces. Oliveira, M. R. F. (UECE); Furtado, R. F. (Embrapa Agroindústria Tropical); Abreu, K. V. (UECE); Melo, A. A. A. (UECE); Gonzalez, P. H. G. (CSIC); Alves, C. R. (UECE)

ELE-009 Non-mercury electrode for the electroanalytical determination of oryzalin. Gerent, G. G. (UFSC); Spinelli, A. (UFSC)

ELE-010 Electrochemical platform with MWCNTs and gold nanoparticles for the determination of melatonin. Vanoni, C. R. (UFSC); Winiarski, J. P. (UFSC); Bassani, J. C. (UFSC); Mezalira, D. Z. (UFSC); Jost, C. L. (UFSC)

ELE-011 Electrochemical tools aiming the evaluation of the reactive dyes biodegradation. Souza, F. M. F. S. (UFSC); Schreiber, C. S. (UFSC); Brondani, P. B. B. (UFSC); Zapp, E. Z. (UFSC)

- ELE-012** Evaluation of electrochemiluminescence activity of luminol functionalized AgNPs for application as ECL labeling. Uliana, C. V. (IQAr-UNESP); Hideko Yamanaka, H. Y. (IQAr-UNESP)
- ELE-013** Síntese e caracterização de eletrocatalisadores Pt/C-CeO₂ para eletro-oxidação de etanol em meio básico. Venturini, S. I. (IQSC-USP); Perez, J. (IQSC-USP).
- ELE-014** Gold nanoparticles stabilized in kappa-carrageenan applied in the construction of electrochemical immunosensor for the PSA detection. Malvessi, G. S. (UFSC); Hoppe, T. D. (UFSC); Brondani, D. (UFSC)
- ELE-015** Geração voltamétrica do nitro radical aniônico em meio aquoso a partir de novos análogos do nitrofurais com potencial atividade antichagásica. Almeida, L. S. (UNIFESP-Diadema); Chiavassa, L. D. (UNIFESP-Diadema); Gatti, F. M. (FCF-USP); Trossini, G. H. G. (FCF-USP); La Scalea, M. A. (UNIFESP-Diadema)
- ELE-016** CeO₂-Sn nanowires as effective host of sulfur as cathode for lithium-sulfur batteries. Chauque, S. (IQUSP); da Silva, A. G. M. (IQUSP); de Andrade, M. A. (IQUSP); Cipriano, T. (IQUSP); Torresi, R. M. (IQUSP)
- ELE-017** Bis-bases de Schiff como inibidores de corrosão em meio ácido. Valbon, A. (UFRRJ); Rodrigues-Santos, C. E. (UFRRJ); Echevarria, A. (UFRRJ)
- ELE-018** Nanocomposites between carbon nanostructures and copper hexacianometalates: preparation and characterization. Ramos, M. K. (UFPR); Zarkin, A. J. G. (UFPR)
- ELE-019** All Conductive Polymer based supercapacitors. Obana, T. T. (IQUSP); Martins, V. L. (IQUSP); Toresi, R. M. (IQUSP)
- ELE-020** Avaliação teórica e experimental da atividade anticorrosiva de enaminoésteres frente ao aço-carbono em meio ácido. Carlos, M. F. L. P. (UFRRJ); Valbon, A. (UFRRJ); Junior, N. F. X. (UFRRJ); Santos, M. R. L. (UFRRJ); Bauerfeldt, G. F. (UFRRJ); Echevarria, A. (UFRRJ)
- ELE-021** Development of an electrochemical immunosensor for the analysis of the HER2 breast cancer biomarker. Hoppe, T. D. (UFSC); Malvessi, G. S. (UFSC); Brondani, D. (UFSC)
- ELE-022** Electro-Active Photonic Device for Bioanalytical Applications. Souza, K. S. (UFRGS); Rodrigues, M. (UFRGS); Pereira, M. B. (UFRGS); Kist, T. L. (UFRGS); Mendes, S. M. (UofL); Horowitz, F. (UFRGS)
- ELE-023** H₂ electrochemical generation: On the opportunities and knowledge gaps of SO₂ catalytic oxidation. Dourado, A. H. B. (IQUSP); Munhos, R. L. (IQUSP); Silva-Júnior, N. A. (IQUSP); del Colle, V. (IQSC-USP); Carvalho, G. A. (IQUSP); Oliveira, P. V. (IQUSP); Varela, H. (IQSC-USP); Córdoba de Torresi, S. I. (IQUSP)
- ELE-024** Determination of D-xylose in sugarcane bagasse using an electrode based on reduced graphene oxide and molecularly imprinted poly(phenol). Moreira, L. F. P. P. (IQAr-UNESP); Buffon, E. (IQAr-UNESP); Stradiotto, N. R. (IQAr-UNESP)
- ELE-025** Otimização de um método voltamétrico para determinação de chumbo, cobre e mercúrio em meio ácido usando eletrodos impressos de ouro. Guterres, L. R. (UFES).
- ELE-026** Synthesis and characterization of graphene by ultrasound method for the generation of H₂O₂. Lima, T. S. (UNIFESP-Diadema); Souza, F. M. (UFABC); Paz, E. C. (UFABC); Pinheiro, V. S. (UFABC); Batista, F. H. (UNIFESP-Diadema); Simões, F. R. (UNIFESP-Campus Baixada Santista); Santos, M. C. (UFABC); Codognoto, L. (UNIFESP-Diadema)
- ELE-027** Effect of different carbon blacks on the simultaneous determination of drugs as water contaminants based on screen-printed sensors. Deroco, P. B. (UFSCar); Fatibello-Filho, O. (UFSCar); Arduini, F. (UNIROMA); Moscone, D. (UNIROMA)
- ELE-028** Pd@Au nanoparticles applied to electrochemical determination of 4-nitroaniline. de Barros, M. R. (UFSC); Winiarski, J. P. (UFSC); Elias, W. C. (Rice); Jost, C. L. (UFSC)
- ELE-029** Degradação eletroquímica do corante amarantho utilizando um anodo de diamante dopado com boro em reator em fluxo. Pinto, G. A. (UFSCar); Wächter, N. (UFSCar); Rocha-Filho, R. C. (UFSCar)
- ELE-030** Hydrothermal synthesis of reduced graphene oxide aerogel for energy storage applications. Cipriano, T. C. (IQUSP); Chauque, S. (IQUSP); Martins, V. L. (IQUSP); Andrade, M. A. (IQUSP); Candido, G. A. (IQUSP); Torresi, R. M. (IQUSP)
- ELE-031** Determination of midazolam in beverages samples: comparison between electrochemical oxidation and reduction processes. Rocha, R. G. (UFU); Silva, W. P. (UFU); Santana, M. H. P. (UFU); Munoz, R. A. A. (UFU); Richter, E. M. (UFU)
- ELE-032** Arrays of copper microelectrodes prepared from disposable electronic chips. HIGINO, G. S. (UPM); PEDROTTI, J. J. (UPM); CASTRO, E. I. (UPM)
- ELE-033** Determination of lactic acid in sugarcane vinasse based on electrode modified with molecularly imprinted polymers, reduced graphene oxide and gold nanoparticles. Pereira, T. C. (IQAr-UNESP); Stradiotto, N. R. (IQAr-UNESP)
- ELE-034** Study and characterization of thermally reduced graphene oxide as electrodes for double-layer capacitors in various electrolytes. Andrade, M. A. (IQUSP); Cipriano, T. C. (IQUSP); Martins, V. L. (IQUSP); Torresi, R. M. (IQUSP)
- ELE-035** Determination of isoamyl alcohol in fusel oil using a sensor based on electropolymerized molecularly imprinted polypyrrole modified with reduced graphene oxide and gold nanoparticles. Mariano, T. M. (IQAr-UNESP); Beluomini, M. A. (IQAr-UNESP); Stradiotto, N. R. (IQAr-UNESP)
- ELE-036** Study of the electrochemical behavior of the Malathion insecticide on gold electrode. Lima, A. L. (UNIFESP-Diadema); Codognoto, L. (UNIFESP-Diadema); Valle, E. M. (UNIFESP-Diadema)
- ELE-037** Efeito da incorporação de polipirrol em sensores baseados em nanoestruturas de hidróxido de níquel. Miguel, F. H. C. (IQUSP); Torresi, R. M. (IQUSP); Torresi, S. I. C. (IQUSP).

- ELE-038** Evaluation of green synthesized 1-benzyl-4-phenyl-1H-1,2,3-triazole as corrosion inhibitor for mild steel in acidic medium. Fernandes, C. M. (UFF); Alvarez, L. X. (UCR); dos Santos, N. E. (UFF); Barrios, A. C. M. (UFF); Ponzio, E. A. (UFF)
- ELE-039** Study of fibronectin adsorption on thin films of PEDOT-co-PDLLA supported by QCM-D's Au electrode. Souza, M. J. P. G. (IQUSP); Silva, R. A. (IQUSP); Torresi, S. I. C. (IQUSP)
- ELE-040** Influence of matrix of nanostructured Au electrocatalyst for SO₂ oxidation reaction. Silva-Júnior, N. A. (IQUSP); Dourado, A. H. B. (IQUSP); Garcia, T. N. (IQUSP); Rossi, L. M. (IQUSP); Torresi, S. I. C. (IQUSP)
- ELE-041** Voltammetric characterization of bodipy dyes. Souza de, A. C. G. (UFF); Machado, L. A. (UFF); Pedrosa, L. F. (UFF); Ferreira, E. A. (UFF)
- ELE-042** Square wave voltammetry of nitrofurazone in ionic liquids using a carbon fiber microelectrode. Chiavassa, L. D. (UNIFESP-Diadema); Camilo, F. F. (UNIFESP-Diadema); La-Scalea, M. A. (UNIFESP-Diadema)
- ELE-043** Nanometric manganese dioxide/activated carbon composite as electrode material of supercapacitors. Mattoso, S. H. (UFSCar); Falqueto, J. B. (UFSCar); Bocchi, N. (UFSCar); Zornitta, R. L. (UFSCar); Ruotolo, L. A. M. (UFSCar); Rocha-Filho, R. C. (UFSCar); Biaggio, S. R. (UFSCar)
- ELE-044** Characterization and electroanalytical performance of self-assembled monolayer gold electrode for hormone determination in the Billings Dam. Batista, F. H. F. (UNIFESP-Diadema); Lima, T. S. (UNIFESP-Diadema); Ferreira, T. L. (UNIFESP-Diadema); Gonçalves, N. (UNIFESP-Diadema); Noda, L. (UNIFESP-Diadema); de Oliveira, H. P. M. (UFABC); Simões, F. R. (UNIFESP-Campus Baixada Santista); Codognoto, L. (UNIFESP-Diadema)
- ELE-045** Amperometric detection of antioxidants in biokerosene by HPLC, using electrode modified with reduced graphene oxide and gold nanoparticles. Delfino, J. R. (IQAr-UNESP); Marques, A. L. B. (UFMA); Stradiotto, N. R. (UFF)
- ELE-046** Application of an electrochemical sensor of MWCNTs obtained by electrospinning for the determination of 2,4,6-Trichlorophenol. Medeiros, A. R. (UNIOESTE); Gusmão, A. P. (UNIOESTE); Rosenberger, A. G. (UNIOESTE); Caetano, J. (UNIOESTE); Dragunski, D. C. (UNIOESTE)
- ELE-047** Bio-mimetic electrochemical sensor based on hemin and carbon nanotubes for nitrofurazone electrochemical behavior study. Brito, C. L. (FCF-USP); FERREIRA, E. I. (FCF-USP); LA-SCALEA, M. A. (UNIFESP-Diadema)
- ELE-048** Avaliação simultânea da interação do fungicida carbendazim com os íons metálicos cobre e chumbo, por pulso diferencial. Codognoto, L. (); Valle, E. M. A. (); Santos, A. S. (UNIFESP-Diadema)
- ELE-049** Voltammetric Evaluation of an Activated Biochar Modified Carbon Paste Electrode for the Determination of Caffeic Acid. Moscardi, A. P. Z. (UFPR); Kalinke, C. (UFPR); Marcolino-Junior, L. H. (UFPR); Bergamini, M. F. (UFPR)
- ELE-050** Influence of Convection in the Electro-oxidation of Sulfur Dioxide in Polycrystalline Gold Electrodes. De Angelis, L. D. (IQUSP); Dourado, A. H. B. (IQUSP); Varela, H. (IQSC-USP); Torresi de, S. I. C. (IQUSP)
- ELE-051** Platform of antibody immobilization based on carboxymethylated cashew gum. Melo, A. M. A. (UECE); Oliveira, M. R. F. (UECE); Furtado, R. F. (Embrapa Agroindústria Tropical); Borges, M. F. (Embrapa Agroindústria Tropical); Alves, C. R. (UECE); Biswas, A. (USDA); Cheng, H. N. (USDA)
- ELE-052** Voltammetric determination of INHHQ, a potential compound for the treatment of Alzheimer's disease, using a multi-walled carbon nanotube modified electrode. Pedrozo, M. J. (PUC-RIO); Rey, N. A. (PUC-RIO); Aucélio, R. Q. (PUC-RIO)
- ELE-053** Eletrodos de grafite de lapiseira aplicados ao estudo voltamétrico do complexo Cu-Picloram em águas da represa Billings. Mecca, C. Z. P. (UNIFESP-Diadema); Simião, C. G. (UNIFESP-Diadema); Codognoto, L. (UNIFESP-Diadema); Valle, E. M. A. (UNIFESP-Diadema)
- ELE-054** Molecularly imprinted polymer electrochemical sensor for hydrochlorothiazide: experimental design based on carbon nanotube electrode. Oliveira de, G. F. (); Zaroni, M. V. B. (); Hudari, F. F. (); Silva da, J. L. ()
- ELE-055** Estudo voltamétrico da interação entre o íon metálico Cu (II) e compostos cumarínicos. Ferreira, P. H. L. (UNIFESP-Diadema); Vairolette, L. E. (UNIFESP-Diadema); Oliveira, H. P. M. (UFABC); Codognoto, L. (UNIFESP-Diadema); Valle, E. M. A. (UNIFESP-Diadema)
- ELE-056** Thiols adsorption: The influence of the surfaces, pH and organic functional groups present in the molecules. Ignatti, G. R. M. P. (IQUSP)
- ELE-057** Cobalt Phthalocyanine Modified Carbon Paste Electrode for the Determination of Carbenzimidazole in Oranges. Severo, F. J. R. (); Moreira, E. T. D. (); Araújo, M. C. U. (); Lourenço, A. S. (); Bichinho, K. M. ()

EST – Química Estrutural

- EST-001** New Polymorph of isopropyl Xanthate of Sb(III): Experimental and theoretical characterization. da Silva, V. H. M. (UFF); Marques, M. M. (UFF); Junior, J. M. S. (UFF); Ferreira, G. B. (UFF)

FIS – Físico-Química

- FIS-001** Chlorate-iodine-nitrous acid oscillating reaction. Queiroz, J. P. R. (UFRJ); Faria, R. B. (UFRJ)

- FIS-002** **INTERAÇÃO ENTRE HISTIDINA E MONTMORILONITA EM CONDIÇÕES PREBIÓTICAS.** Silva, A. C. (UFOB); Carneiro, C. E. A. (UFOB)
- FIS-003** **Modeling adsorption on oxides and zeolite.** Martins, J. B. L. (UnB)
- FIS-004** **Reverse solvatochromism in a family of "hybrid cyanine" dyes having 2,6-di-tert-butylphenolate as electron-donating group.** de Melo, C. E. A. (UFSC); Nicoletti, C. R. (UFSC); Ferreira, M. (UFSC); Machado, V. G. (UFSC)
- FIS-005** **Aqueous two-phase systems formed by tween surfactant and cholinium-based ionic liquids at different temperatures.** Valverde, B. P. (UFOP); Silva, S. J. B. (UFOP); Celestino, T. A. C. (UFOP); Mageste, A. B. (UFOP); Ferreira, G. M. D. (UFOP)
- FIS-006** **Evaluating nucleation process on inorganic scaling.** Signorelli, F. (IQ-UNICAMP); Bertran, C. A. (IQ-UNICAMP)
- FIS-007** **Thermodynamic of bovine lactoferrin interaction with auramine O and methyl violet 2B.** De Paula, H. M. C. (UFV); De Castro, A. S. B. (UFV); Fonseca, V. V. P. (UFV); Da Silva, L. H. M. (UFV); Pires, A. C. S. (UFV)
- FIS-008** **Kinetic analyses for Brij58-Lactoferrin interaction.** De Castro, A. S. B. (UFV); De Paula, H. M. C. (UFV); Fonseca, V. V. P. (UFV); Pires, A. C. S. (UFV); Da Silva, L. H. M. (UFV)
- FIS-009** **Facile colorimetric detection of glyphosate: kinetic and mechanistic study.** Hellinger, R. (UFPR); Silva, V. B. (UFPR); Orth, E. S. (UFPR)
- FIS-010** **Molecular modeling studies of neolignans obtained from *Virola surinamensis* (Rol). Warb. against cruzain.** Paes, S. S. (UFPA); Viana, J. de S. (UFPA); Costa, A. P. (UFPA); da Silva, L. O. (UFPA); Romero, O. A. S. (UFPA); Oliveira, D. G. (UFPA); Júnior, M. L. L. (UFPA); Gonçalves, E. C. (UFPA); Santos, L. S. (UFPA); de Molfetta, F. A. (UFPA)
- FIS-011** **Sugar Decoration of Polyplexes: A Nonviral Vector Alternative for Gene Delivery.** Zilse, M. S. (UFSC); Barth, M. T. (UFSC); Albuquerque, L. J. C. (UFABC); Alavarse, A. C. (UFABC); Silva, M. C. (UFABC); Bellettini, I. C. (UFSC); Giacomelli, F. C. (UFABC)
- FIS-012** **Kinetics and energetic parameters of the process of formation of LF-Methyl violet 10B complex.** Fonseca, V. V. P. (UFV); Castro, A. S. B. (UFV); Paula, H. M. C. (UFV); Pires, A. C. S. (UFV); Silva, L. H. M. (UFV)
- FIS-013** **Activation energy of the light driven glycerol electrooxidation reaction on CdS photoanodes.** Hessel, C. (UFSCar); Andrade Jr., M. A. S. (UFSCar); Perini, N. (UFSCar); Sitta, E. (UFSCar)
- FIS-014** **Imidazole as catalyst for the degradation of the pesticide Diazinon: unusual pH rate profile.** Teixeira, A. R. (UFPR); Orth, E. S. (UFPR)
- FIS-015** **1,2,4-triazole as organocatalyst for organophosphates degradation: a kinetic and computational study.** Fernandes, J. M. (UTFPR); Menezes, L. R. A. (UFPR); Campos, R. B. (UTFPR)
- FIS-016** **Partitioning behavior of lidocaine in aqueous biphasic systems.** Chagas, F. O. (UFV); da Silva, L. H. M. (UFV); Hespanhol, M. C. (UFV)
- FIS-017** **The peculiar mechanistic shift in reactions of methyl-parathion with methylated imidazoles.** Soares, P. M. (UFPR); Teixeira, A. R. (UFPR); Campos, R. B. (UTFPR); Orth, E. S. (UFPR)
- FIS-018** **TDDFT study of phenothiazine radical cation electronic transition in the visible region and its relation to resonance Raman effect.** Noda, L. K. (UNIFESP-Diadema); Gonçalves, N. S. (UNIFESP-Diadema)
- FIS-019** **Lipid binding interactions of chitosan: parameters modulating the maximum insertion pressure in lipid monolayers.** Pedro, R. O. (IFSC-USP); Miranda, P. B. (IFSC-USP)
- FIS-020** **Production of nanofibers by electrospinning using modified ethyl (hydroxyethyl) cellulose (EHEC).** Schluter, L. G. (UFSC); Zilse, M. S. (UFSC); Barth, M. T. (UFSC); Ferreira, E. M. D. (UFSC); Dreyer, J. P. (UFSC); Nandi, L. G. (UFSC); Bellettini, I. C. (UFSC)
- FIS-021** **Complexo de inclusão β -ciclodextrina/monômero metacrílico: Efeito em matrizes poliméricas para aplicação dental.** Savanhago, R. M. (UDESC); Meier, M. M. (UDESC)
- FIS-022** **N-grafeno como adsorvente de gases de alto desempenho.** Santos dos, T. C. (UFF); Barreto, J. (CBPF); Stavale, F. (CBPF); Ronconi, C. M. (UFF)
- FIS-023** **Temperature effect on the production of aqueous nitrogen fertilizer by non-thermal atmospheric air plasma.** Khalaf, P. I. (UTFPR)
- FIS-024** **Influência do pH em amostras de vinho tinto colonial contendo antocianinas.** Silva Gomes, A. K. (UFPR); Romano, Y. R. (UFPR); Silva, K. M. (IQUSP); Schneider, L. A. E. (UFPR); Bender, N. C. T. (UFPR); Silva, C. P. (IQUSP); Quina, F. H. (IQUSP); Friedrich, L. C. (UFPR)
- FIS-025** **Síntese, Caracterização e estudo cinético da degradação de di-hidrogenofosfato de 10-decilmecrilato (10-MDP).** Castro, N. (UDESC); Perondi Furtado, P. R. (UDESC); Gariani, R. A. (UDESC); Meier, M. M. (UDESC)
- FIS-026** **Avaliação da descoloração e degradação do corante reativo azul 160 por oxidação com H₂O₂/NaOH e H₂O₂/UV.** Farias, N. R. (FURB); Mittersteiner, M. (FURB); De Jesus, P. C. (FURB)
- FIS-027** **ADSORÇÃO DO CORANTE VERMELHO ÁCIDO EM RESÍDUO INDUSTRIAL A BASE DE BENTONITA.** Franzoi Guenther, F. G. (FURB); Oliveira Barcellos, O. B. (FURB)
- FIS-028** **ZnO QUANTUM DOTS FOR PHOTOCATALYTIC DEGRADATION OF METHYLENE BLUE AND TEXTILE EFFLUENTS.** Quadros, S. (FURB); Zimmermann, L. M. (FURB)
- FIS-029** **Influência do pH nas Isotermas de Adsorção do Corante Básico Azul com Resíduo da Clarificação de Óleos Vegetais, Como Adsorvente.** Miguel, T. M. (FURB); Barcellos, I. O. B. (FURB)

FIS-030 Negro de fumo obtido a partir da pirólise de pneus e seu estudo na adsorção de azul de metileno: efeito da massa de adsorvente. Jacinto, G. S. (UNIVALI); Heineck, R. G. (UNIVALI); Almerindo, G. I. (UNIVALI)

FIS-031 Equilibrium parameters of indigotine to *Lagenaria* spp. biomass. Franceschini, S. B. (IFPR); Fabian, C. (IFPR); Nicolini, K. P. (IFPR); Nicolini, J. (IFPR)

FIS-032 Physicochemical properties of the *Avena* spp. biomass pyrolyzed and enriched with magnesium chloride and urea. Da Silva, J. P. (IFPR); Pessotto, C. (IFPR); Nicolini, J. (IFPR); Nicolini, K. P. (IFPR)

FIS-033 ESTUDO DA COMPOSIÇÃO QUÍMICA DO LÍQUIDO EXTRAÍDO DA MANDIOCA - MANIPUEIRA. Tavares, M. C. (); Cavalcanti, J. C. M. (); Júnior, J. G. S. (); Botero, W. G. (); Del Colle, V. (); Melo, I. K. L. (UFAL)

FIS-034 Liberação de fósforo a partir de hidrogéis de goma-arábica reforçados com fibra de madeira e NPK. Sghedoni Artifon, S. E. (UDESC); Taffarel Cesco, C. (UDESC); Paulino, A. T. (UDESC)

FOT – Fotoquímica

FOT-001 Azobenzene Dyad with Selective Photoisomerization: An Example of Photocontrolled Molecular Bit. Kreuz, A. (IQUSP); Azzellini, G. C. (IQUSP)

FOT-002 Photooxidation behavior of Hantzsch Ester in aqueous media and envisioned restrain on macrocyclic complexation. Wecker, G. S. (UFSC); Scorsin, L. (UFSC); Affeldt, R. F. (UFSC)

FOT-003 Evidence for an Excited State Intramolecular Proton Transfer (ESIPT) in the Photoisomerization of Bis-Azophenol. Azzellini, G. C. (IQUSP); Kreuz, A. (IQUSP)

FOT-004 Synthesis and characterization of gold nanostructures and porphyrins functionalized with L,L-diphenylalanine for photodynamic therapy. Reis, M. A. (UFABC); Vassiliades, S. V. (UFABC); Aguilar, A. M. (UNIFESP-Diadema); Giuntini, F. (LJMU); Alves, W. A. (UFABC)

FOT-005 Síntese e caracterização de um novo complexo polipiridínico de rutênio(II) derivado da 1-metil-indol-2,3-diona com alta luminescência. da Silva, P. H. L. (UFF); Freitas, M. C. R. (UFRRJ); Miranda, F. da S. (UFF)

FOT-006 Synthesis and characterization of a novel Ru(II) complex containing a dipyrido[3,2-a:2',3'-c]phenazine(dppz)-coumarin conjugate as ligand. Sousa, M. O. B. (UFF); Vargas, M. D. (UFF); Miranda, F. S. (UFF)

FOT-007 Determination of the Emission Quantum Yield of a Branched Polyethyleneimine-Porphyrin Conjugate. de Souza, E. M. (IQUSP); Azzellini, G. C. (IQUSP); Kreuz, A. (IQUSP)

FOT-008 dipBeet: a nature-inspired water-soluble red-orange dye. Pioli, R. M. (IQUSP); Lima, R. A. (UFABC); Bastos, E. L. (IQUSP)

FOT-009 Study of the solvent effect on the N-methylisatin. ARANDAS, A. M. (IFAP); SILVA, B. N. M. (UFRJ); SILVA, B. V. (UFRJ); CAVALHEIRO, C. C. S. (IQSC-USP); FERREIRA, I. M. (UNIFAP)

FOT-010 Study of interaction between liposomes and porphyrins functionalized with L,L-diphenylalanine for photodynamic therapy. Vassiliades, S. V. (UFABC); Braz, V. A. (UFABC); Araújo-Chaves, J. C. (UFABC); Aguilar, A. M. (UNIFESP-Diadema); Nantes-Cardoso, I. L. (UFABC); Giuntini, F. (LJMU); Alves, W. A. (UFABC)

FOT-011 Silk fibroin hydrogels for potential applications in photodynamic therapy. Ulloa, J. E. (UFABC); Gerbelli, B. B. (UFABC); Ribeiro, A. O. (UFABC); Nantes, I. L. (UFABC); Giuntini, F. (LJMU); Alves, W. A. (UFABC)

HIS – História da Química

HIS-001 Scientific glassblowing in Brazil: an historical Record. Silva, W. T. (UFMG); Filgueiras, C. A. L. (UFMG)

HIS-002 O experimento de Luigi Terragno: um resgate químico na fotografia do Brasil. Arend, K. A. (IFC); Cardoso, A. M. A. C. (IFC); Ferreira, T. A. da S. F. (IFC)

INO – Química Inorgânica

INO-001 Hydrosilylation with Platinum Catalysts: influence of auxiliary ligands in Chalk-Harrod mechanism. FERNANDES, W. S. (UFRJ); CARDOZO, T. M. (UFRJ)

INO-002 One synthesis, multiple materials: from molybdenum sulfide to oxide. Schmidt, A. (UFPR); Zarkin, A. J. G. (UFPR)

INO-003 Porfirinas de cobre de primeira e segunda gerações como catalisadores na degradação de catecol por H₂O₂. Rabelo, N. S. (UFMG); Vieira, N. I. D. (UFMG); Silva, M. A. N. (UFMG); Freits, G. F. (UFMG); Martins, D. C. S. (UFMG)

INO-004 Synthesis and Characterization of a New ionic Chemosensors. Uchiyama, N. M. (UNIFESP-Diadema); Bagatin, I. A. (UNIFESP-Diadema)

- INO-005 Síntese e Caracterização de um Sistema Molecular a partir de Cobre(II) e um Ligante Derivado Carboxílico de Oxima Fenólica.** Santucci, P. M. (UNICAMP); Vaz, R. C. A. (UNICAMP); Barros, W. P. (UNICAMP)
- INO-006 1D- and 2D- luminescent coordination polymers: ligand effect on rare earth phosphinates' structures.** de Castro, P. R. (IQAr-UNESP); Teotônio, G. L. E. (IQAr-UNESP); Bim, L. F. B. (IQAr-UNESP); Cebim, M. A. (IQAr-UNESP)
- INO-007 Synthesis of cyclic carbonates catalyzed by benzothiazole metal complexes.** Da Mata, A. F. A. (UFG); Das Chagas, R. P. (UFG); Bezerra, W. A. (UFG); Dos Santos, P. A. (UFMG); De Fátima, A. (UFMG)
- INO-008 Isotermas de Adsorção do íon Zinco(II) pela Turfa Decomposta Fina (TDF).** Szpoganicz, B. P. (UFSC); Meurer, L. (UFSC); Szpoganicz, B. (UFSC)
- INO-009 Study of gadolinium coordination compound with crylene acid ligand.** Cardoso, L. P. (UTFPR); Dias, M. R. G. (UTFPR); Pilissão, C. (UTFPR); Adati, R. D. (UTFPR)
- INO-010 Filmes de Langmuir-Blodgett de compostos anfífilicos derivados do heterociclo 1,3,4-oxadiazol e suas caracterizações.** Araújo, I. P. (UFPR); Cesca, E. C. (UFPR); Westphal, E. (UTFPR); Winnischofer, H. (UFPR)
- INO-011 Manganese(III) porphyrin as catalysts for norfloxacin degradation in aqueous medium: products identification and cytotoxicity assay.** Meireles, A. M. (UFMG); Lage, A. L. A. (UFMG); Ribeiro, J. M. (UFMG); Silva, M. A. N. (UFMG); Souza-Fagundes, E. M. (UFMG); Martins, D. C. S. (UFMG)
- INO-012 Platinum(II)-pyrazole complexes: structure and DNA binding evaluation.** Querino, A. L. A. (UFMG); Silveira, C. H. (UFSC); Diniz, R. (UFMG); Iglesias, B. A. (UFSC); Silva, H. (UFMG)
- INO-013 Synthesis and structural analysis of new trinuclear complexes containing yttrium and first row transition metals.** HENNEMANN, A. L. (UFSC); SILVA, F. D. (UFSC); LANG, E. S. (UFSC); ABRAM, U. (FU-Berlin); NGUYEN, H. H. (VNU); SANTOS, S. S. (UFSC)
- INO-014 Imidazol como co-catalisador na oxidação de ciclohexano mediada pelo catalisador metaloporfirínico [Mn(III)(2,6CFPP)Cl].** Silva, M. H. M. (CEFET-MG); Meireles, A. M. (UFMG); Martins, D. C. S. (UFMG)
- INO-015 Study of the Catalytic Potential of the Hybrid Silicas and Calixarenes in the Conversion of Glycerol to Glycerol Carbonate.** Machado, D. (UNIFESP-Diadema); Bagatin, I. A. (UNIFESP-Diadema); Gomes, E. L. (UNIFESP-Diadema); Silva, D. O. (UNIFESP-Diadema); Rodrigues, R. (UNIFESP-Diadema); dos Reis, G. B. (UNIFESP-Diadema)
- INO-016 Atrazine degradation catalyzed by manganese porphyrins: determination of products and evaluation of its toxicity.** Lage, A. L. A. (UFMG); Ribeiro, J. M. (UFMG); Souza-Fagundes, E. M. (UFMG); Brugnera, M. F. (UFMT); Martins, D. C. S. (UFMG)
- INO-017 Synthesis and characterization of novel copper complexes with coumarin-hydrazone ligands as potential cysteine probes.** Silva da, L. R. (UFRRJ); Almeida de, P. S. V. B. (UFRRJ); Pereira, T. M. (UFRRJ); Guedes, G. P. (UFF); Kümmerle, A. E. (UFRRJ); Neves, A. P. (UFRRJ)
- INO-018 Synthesis and Characterization of a Cu(II) Complex with a N3-donor ligand for studies involving oxidative processes.** Schneider, C. C. (UTFPR); Camargo, T. P. (UTFPR)
- INO-019 Bio-physical approach to Tuberculosis: interplay of mycolic acids, antimycobacterial compound and pulmonary membrane model.** Sandrino, B. (IFSC-USP); Silva da, J. P. (UFPR); Araujo de, M. P. (UFPR); Oliveira, O. N. (IFSC-USP)
- INO-020 Estudo teórico das constantes de formação para cátions metálicos Zn²⁺, Cd²⁺, Hg²⁺.** Dias, E. C. L. A. (UFF); Silva, V. H. M. (UFF); Ferreira, G. B. (UFF)
- INO-021 Tridentate Schiff base derived from diaminomaleonitrile and 3-hydroxy-salicylaldehyde and its Vanadium(V) complex Synthesis and characterization.** Doring, T. H. (UFSC); Mello, L. S. (UFSCar); Dockal, E. R. (UFSCar); Cruz Júnior da, J. W. (UFSC)
- INO-022 DMSO-based ruthenium complexes with aniline as further ancillary ligand: Synthesis, characterization and catalytic activity for olefin metathesis.** Martins, D. M. (IQSC-USP); Lima-Neto, B. S. (IQSC-USP)
- INO-023 bis-Benzimidazolium salts: A versatile catalysts for the selective conversion of carbon dioxide into cyclic carbonates or polycarbonates.** Bezerra, W. A. (UFG); Fátima, A. (UFMG); das Chagas, R. P. (UFG)
- INO-024 Complexes of Ln³⁺ (La³⁺, Sm³⁺) containing a Bis(hydrazone): synthesis, characterization and photophysical study.** Gaia, I. A. T. (UFTM); Borges, A. P. (UFTM); Prado, F. S. (UFU); Patrocínio, A. O. T. (UFU); Machado, A. E. H. (UFU); Maia, P. I. S. (UFTM)
- INO-025 Cadeia mista de cobre (II) contendo os ligantes oxalato e 1,3-bis(4-piridil)propano: síntese e caracterização.** Sachi, M. M. (UFPR); Reis, N. V. (OX-UK); Giese, S. O. K. (UFPR); Stumpf, H. O. (UFMG); Martins, F. T. (UFG); Marinho, M. V. (UNIFAL); Simões, T. R. G. (UFPR)
- INO-026 A novel orthometalated triruthenium complex containing a phenazinederived ligand (dppz): synthesis and spectroscopic characterization.** Chrispim, P. B. H. (FFCLRP-USP); Nikolaou, S. (FFCLRP-USP)
- INO-027 Degradação do Bisfenol A catalisada por porfirinas de manganês(III).** Vieira, N. I. D. (UFMG); da Silva, M. A. N. (UFMG); Silva, G. F. (UFMG); Martins, D. C. S. (UFMG)
- INO-028 Ruthenium/nitrosyl/amino acids complexes inhibit MDA-MB-231 breast cancer tumor cell growth and migration.** Candido, C. C. (UNIFAL); Barbosa, M. I. F. (UNIFAL); Corrêa, R. S. (UFOP); Guedes, A. P. M. (UFSCar); Andrade, F. M. (UFG); Leite, C. M. (UFSCar); Silveira-Lacerda, E. P. (UFG); Ellena, J. A. (IFSC-USP); Doriguetto, A. C. (UNIFAL); Batista, A. A. (UFSCar)
- INO-029 [Ln(18C6)(L/L')]Cl₃ and [Ln(18C6)(u-L')Ni(dbm)₂] complexes: synthesis and photoluminescent study.** Silva, R. A. N. (FCT-UNESP-Câmpus de Presidente Prudente); Davols, M. R. (IQAr-UNESP); Lima, S. A. M. (FCT-UNESP-Câmpus de Presidente Prudente); Frim, K. P. M. (UFABC); Pires, A. M. (FCT-UNESP-Câmpus de Presidente Prudente)

- INO-030** Síntese e caracterização de um composto de coordenação de cobre(II) que atue como eletrocatalisador em reações de redução de oxigênio. DIONIZIO, T. P. (UFRJ); SILVA, F. P. (UFRJ); MOURA, F. S. (UFRJ); DINIZ, M. M. (UFRJ); MEDEIROS, M. E. (UFRJ); CASELLATO, A. (UFRJ)
- INO-031** Complexo de paládio(II) derivado do acetato de paládio, pdimetilaminobenzaldeído e N,N-dietil-p-fenilenodiamina. Badaró, W. P. D (UNIFAL); Sarto, L. E (IFSULDEMINAS); de Almeida, E. T (UNIFAL)
- INO-032** Synthesis of new Cu(II) and Co(II) metaloligands with the oxamate derived from 3,6-Diaminoacridine. Souza, M. C. O. E. (UFG); Gomes, D. C. C. (UFG); Kalinke, L. H. G. (UFG)
- INO-033** Síntese e Caracterização de Complexos Binucleares de Cu(II)/Cu(II) e Ni(II)/Cu(II) Com Base de Schiff Derivada da 3,4-diaminotolueno. França, I. V. (UFSC); Júnior, J. W. C. (UFSC); Dockal, E. R. (UFSCar)
- INO-034** Characterization of graphene-like materials from sugarcane bagasse. Fornari, M. R. (UFPR); Schultz, J. (UFPR); Silva, L. C. (UFPR); Vidotti, M. (UFPR); Mangrich, A. S. (UFPR)
- INO-035** New Tb³⁺:Eu³⁺ tetrakis beta-diketonate complexes presenting temperature-tunable emission as ratiometric thermometers. Guimarães, L. B. (IQUSP); Brito, H. F. (IQUSP); Felinto, M. C. F. C. (IPEN); Malta, O. L. (UFPE); Carlos, L. D. (UA-Portugal); Botas, A. M. P. (UA-Portugal)
- INO-036** Building up an hexacopper(II)-pyrazolato/oxamate magnetic complex with rare ethylenedioide (-OCH₂CH₂O-) as bridge between copper units. Oliveira, W. X. C. (UFMG); Pinheiro, C. B. (UFMG); Julve, Miguel (UV); Pereira, C. L. M (UFMG)
- INO-037** Síntese, caracterização e atividade antimicobacteriana de complexos de cobre(II) com ácido 2-mercaptocotínico. Almeida, J. C. (UFU); Pavan, F. R. (IQAR-UNESP); Silva, I. C. (IQAR-UNESP); Guerra, W. (UFU)
- INO-038** Synthesis and characterization of [bis-RuCl(dppb)(bipy)-μ-M(pyterpy)2](PF₆)₄ complexes, where M = Mn(II), Co(II) ou Ru(II). Machado, R. P. (UNIFAL); Barbosa, M. I. F. (UNIFAL); Doriguetto, A. C. (UNIFAL)
- INO-039** Study of the Second-Sphere Coordination Effects with Copper (II) Complexes through Intercalating Group Insertion. Neves, A. (); Auras, B. L. (UFSC)
- INO-040** Hydrolytic activity of a bioinspired dinuclear MnIIIMnII complex. Luiz, E. (UFSC); Peralta, R. A. (UFSC); Xavier, F. R. (UDESC)
- INO-041** Investigação de um Complexo Cobalto(III)-Esculetina como Plataforma de Entrega Controlada de Fármacos em Ambiente Hipóxico. Mello, M. V. P. (UFF); Lanznaster, M. (UFF)
- INO-042** Screening of synthesis parameters for Mg/Al layered double hydroxide aiming environmental and biological applications. Silva, C. G. N. (UFRJ); Senra, J. D. (UERJ); Malta, L. F. B. (UFRJ)
- INO-043** Investigation of the potential of phthalocyanines as photosensitizers for microbial inactivation. Prandini, J. A. (FCFRP-USP); Castro, K. A. D. F. (FCFRP-USP); Biazzotto, J. C. (FCFRP-USP); Lourenço, L. (UA-Portugal); Tomé, J. P. C. (ULISBOA); Braga, G. U. L. (FCFRP-USP); Silva, R. S. (FCFRP-USP)
- INO-044** Hybrid material for controlled of drugs release. Lima, H. H. C. (UEM); Veregue, F. R. (UEM); Kupfer, V. L. (UEM); Rinaldi, J. C. (UNIFATECIE); Guilherme, M. R. (UniCesumar); Rinaldi, A. W. (UEM)
- INO-045** Synthesis of DPPZ-BTDZ-Br as potential ligand for metallo-intercalator complex of ruthenium (II) derived from 1,10-phenanthroline. Nogueira, M. O. T. (IME); Luiz, T. S. (UFF); França, T. C. C. (IME); Miranda, F. S. (UFF)
- INO-046** Synthesis and characterization of Cu(II) complex derivate of oxamate ligand. Almeida, A. L. (UFG)
- INO-047** Multifunctional Hybrid Material constituted by Prussian Blue Complex and Perylene Salt. CARVALHO, C. L. C. (UFPI); ROCHA, I. S. (UFPI); MAGALHÃES, J. L. (UFPI); CANTANHÉDE, W. (UFPI)
- INO-048** Synthesis and characterization of shigaite-type material at room temperature. Pereira, S. A. C. (UFOPA); Marinho, K. L. L. (UFOPA); Corrêa, M. C. N. (UFOPA); Figueira, B. A. M. (UFOPA); Nascimento, R. S. (UFOPA); Lavra, T. C. C. (IFMA); Mercury, J. M. R. (IFMA)
- INO-049** Synthesis and characterization of Cobalt (II) Hydroxysalicylate obtained by the co-precipitation method. Lefchak, A. X. F. (UTFPR); Caldato, K. (UTFPR); Zatta, L. (UTFPR)
- INO-050** Synthesis of new [Ru(II)(L)_n(Bipy-Naphthylamide)_m]²⁺(L=Bipys; n=1-2, m=1-3) Complexes with Deep-Red/Near-Infrared Emission. M-Souza, C (UFMG); C.-Carpentero, V (UFMG); L. Donnici, C (UFMG); Araujo, M. H. (UFMG)
- INO-051** Synthesis, structural characterization and photophysical properties of a new promising gold(I) antitumor and antibacterial coordination compound. Favarin, L. R. V. (UFMS); Barbosa, L (UFMS); Silva, H (UFMG); Defon, V. M. (UFSCar); Pizzuti, L (UFGD); Pinto, L. M. C. (UFMS); Casagrande, G. A. (UFMS)
- INO-052** A new bioinspired complex of Nickel(II): Synthesis, characterization and DNA studies. Paqui, M. S. S. (UDESC); Streit, G. W. (UDESC); Tomaz, M. N. (UDESC); Xavier, F. R. (UDESC)
- INO-053** Phosphine Pilocarpine Copper(I) and Silver(I) complexes and their applications as agrochemicals in the citrus disease control. Villarreal, W. (UFSCar); Fernandes da Silva, D. (UFSCar); Fernandes da Silva, M. F. (UFSCar)
- INO-054** Electrochemical studies of phenanthroline derivatives of Ru²⁺ complexes. Barbosa, R. S. (UNIFESP-Diadema); Bagatin, I. A. (UNIFESP-Diadema)
- INO-055** Synthesis of Cu(II) and Zn(II) complexes containing bipyridine and coumarin ligands as potencial cytotoxic agents. de melo, L. C (UFRRJ); de Almeida, P. S. V. B (UFRRJ); Ribeiro, F. V (UFRRJ); Kummerle, A. E (UFRRJ); Guedes, G. P (UFF); Neves, A. P (UFRRJ)
- INO-056** alpha-Diimines complexes of ruthenium(II) containing ethylenediamine and ethylenediamine functionalized with norbornene. Alves, E. A. (IQSC-USP); Tasso, C. R. B. (IQSC-USP); Lima-Neto, B. S. (IQSC-USP)

- INO-057 Use of In(III) compounds obtained via improved synthetic methods in the catalytic coupling of epoxides with CO₂.** Santana, G. C. S. (UFG); Vieira, S. V. (UFG); Cabral, B. N. (UFG); Chagas, R. P. (UFG)
- INO-058 Synthesis and Characterization of a New Lanthanum Complex as a Catalyst in the Hydrolysis of Phosphate Ester Bonds.** Lucecki, C. A. (UFSC); Neves, A. (UFSC)
- INO-059 An unprecedented N-rich heteroleptic Zinc(2+) complex containing polypyridyl ligands.** Tillmann, A. I. (UDESC); Lange, L. H. (UDESC); Xavier, F. R. (UDESC)
- INO-060 Síntese e caracterização de um novo complexo de oxidovanádio(IV) com ligante oxalato.** Baptistella, G. B. (UFPR); Santana, F. S. (UFPR); Hughes, D. L. (UEA); Soares, J. F. (UFPR); Sa, E. L. (UFPR); Nunes, G. G. (UFPR)
- INO-061 Conformational and spectroscopic analysis of two novel porphyrins through DFT calculations for solubility predictions.** Malheiros, R. O. (UFMG); Venâncio, M. F. (UFMG); Rocha, W. R. (UFMG); DeFreitas-Silva, G. (UFMG)
- INO-062 Obtaining and characterization of films based on hydrolyzed collagen extracted from tilapia scales containing layered cobalt (II) hydroxysalicylate as filler.** Caldato, K. (UTFPR); Lefchak, A. X. F. (UTFPR); Zatta, L. (UTFPR)
- INO-063 Hydrothermal reactions of alkaline earth metal salts with benzophenone-3,3',4,4'-tetracarboxylic acid.** Campos, E. A. (UNIOESTE); Campos, S. D. (UNIOESTE); Welzel, D. J. (UNIOESTE); Poruczinski, E. F. (UNIOESTE); Brandão, P. (UA-Portugal)
- INO-064 Estudo das propriedades ópticas de Hidróxidos Duplos Lamelares dopados com íon európio e intercalados com ânion tungstato.** Barbosa, V. E. (IFSP); Davolos, M. R. (IQAR-UNESP); Romero, J. H. S. (IFSP)
- INO-065 Two Novel Bioinspired Zinc(2+) Complexes With a Long-Chain Polypyridine Ligand And Their DNA Interactions Studies.** Streit, G. W. (UDESC); Melloti, M. (UDESC); Xavier, F. R. (UDESC)
- INO-066 Synthesis and photophysical characterization of the excited states of meso-mono-substituted(amino-ferrocenyl)porphyrins: Experimental and theoretical approaches.** Cocca, L. H. Z. (IFSC-USP); Sciuti, L. F. (IFSC-USP); Menezes, L. B. (UFMS); Köhler, M. H. (UFMS); Bevilacqua, A. C. (UFMS); Piquini, P. C. (UFMS); de Boni, L. (IFSC-USP); Iglesias, B. A. (UFMS)
- INO-067 Synthesis of core-shell nanoparticles with magnetic and luminescent properties for biomedical applications.** Barbosa, A. G. (UFG-Catalão); Pereira, S. C. (UFG-Catalão); Figueiredo, A. T. (UFG-Catalão)
- INO-068 Dois novos complexos de cobre(II) mono- e dinuclear derivados da unidade [Cu(bpca)]⁺: Síntese, Caracterização e Estrutura Cristalina.** da Silva, R. M. R. (UNIFAL); de Campos, N. R. (UNIFAL); Reis, D. O. (Colégio Magnum Cidade Nova); Oliveira, W. X. C. (UFMG); Stumpf, H. O. (UFMG); Marinho, M. V. (UNIFAL)
- INO-069 Síntese, caracterização e potencial catalítico em reações de bromação oxidativa de oxidocompostos de vanádio(IV).** Bottini, R. C. R. (UFPR); Santana, F. S. (UFPR); Nunes, G. G. (UFPR); Soares, J. F. (UFPR)
- INO-070 Luminescence studies of a Zn(II) complex from ligands containing the 1,3,4-oxadiazole heterocycle for application in molecular biology.** Bregalda, M. B. (UTFPR); Camargo, T. P. (UTFPR)
- INO-071 DNA denaturation for the study of a cobalt complex/DNA interaction.** Souza de, M. M. (UDESC); Camargo de, L. C. (UDESC); Naidek, K. P. (UDESC)
- INO-072 Estudo e caracterização do complexo trinuclear de rutênio coordenado ao ligante anfílico 1,3,4-oxadiazol por espectroscopia de fluorescência.** Cesca, E. C. (UFPR); Winnischofer, H. (UFPR); Westphal, E. (UTFPR)
- INO-073 Valence tautomerism studies of cobalt complexes and dioxolene ligands.** SILVA, S. M. N. (UDESC); SOUZA, M. M. (UDESC); CAMARGO, L. C. (UDESC); NAIDEK, K. P. (UDESC)
- INO-074 Derivados bimetálicos do decavanadato: síntese, caracterização e descoloração do azul de metileno.** LEME, L. B. P. (UFPR); MISSINA, J. N. (UFPR); POSTAL, K. (UFPR); SANTANA, F. S. (UFPR); HUGHES, D. L. (UEA); SÁ, E. L. (UFPR); RIBEIRO, R. R. (UFPR); SOARES, J. F. (UFPR); NUNES, G. G. (UFPR)
- INO-075 Uranium separation from acid mine drainage using anionic resins - Investigation of chemical speciation and interaction mechanism.** Bertoli, A. C. (UFMG); Abreu de, H. A. (UFMG); Duarte, H. A. (UFMG)
- INO-076 Spectroscopic characteristics of the novel cis-[Ru(dcbH₂)₂(cbz₂-phen)](PF₆)₂ compound.** Pastorelli, M. N. (UFABC); Polo, A. S. (UFABC)
- INO-077 Síntese, estrutura cristalina e propriedades magnéticas de compostos tetra- e heptanucleares contendo ligante b-dicetonato e ions Coll e Nill.** Areas, E. S. (UFF); Soriano, S. (UFF); Guedes, G. P. (UFF); Vaz, M. G. F. (UFF)
- INO-078 Síntese e caracterização de um novo composto lamelar trocador de cátions para a imobilização de metaloporfirinas para fins catalíticos.** Terzi, C. M. (UFPR); Wypych, F. (UFPR); Nakagaki, S. (UFPR)
- INO-079 Cadeia catiônica Cull-Radical com ânions [Ln(hfac)₄]⁻: raro exemplo de distorções alongadas/comprimidas da geometria octaédrica.** Souza de, M. S. (UFF); Reis, S. G. (UFF); Stinghen, D. (UFF); Bortolot, C. S. (UFF); Cassaro, R. A. A. (UFRJ); Guedes, G. P. (UFF); da Silva, F. C. (UFF); Ferreira, V. F. (UFF); Novak, M. A. (UFRJ); Soriano, S. (UFF); Vaz, M. G. F. (UFF)
- INO-080 Cerium phosphate coated with polymers potentially applicable as ultraviolet absorption filters.** Silva, M. das C. (FFCLRP-USP); Galaço, A. R. B. S. (FFCLRP-USP); Lima, J. F. (UERJ); Serra, O. A. (FFCLRP-USP)
- INO-081 Polímero de coordenação unidimensional de cobalto(II) com o diânion croconato e sulfeto de di(4-piridila): Preparação e Caracterização Estrutural.** Belo, E. C. C. (UFPR); Pfau, S. C. J. (UFPR); Giese, S. O. K. (UFPR); Stumpf, H. O. (UFMG); Marinho, M. V. (UNIFAL); Simões, T. R. G. (UFPR)
- INO-082 Heterogeneous catalysts as cytochrome P450 model: evaluation of catalytic activity in oxidation of triazine herbicides.** Corrêa, J. A. (FFCLRP-USP); Zanardi, F. B. (FFCLRP-USP); Zanatta, L. D. (FFCLRP-USP); Iamamoto, Y. (FFCLRP-USP)

- INO-083 Thiopheneporphyrins as biomimetic models of cytochrome P450: evaluation of catalytic activity in oxidation of triazine herbicides.** de Paula, K. A. (FFCLRP-USP); Zanardi, F. B. (FFCLRP-USP); de Oliveira, K. T. (UFSCar); Iamamoto, Y. I. (FFCLRP-USP)
- INO-084 Acetaldehyde and cyclohexanone aldol condensation catalyzed by metalloporphyrin-based solids.** Santos, E. H. (UFPR); Machado, G. S. (UFPR); Wypych, F. (UFPR); Nakagaki, S. (UFPR)
- INO-085 From 2,4,6-tris(2-pyridyl)-1,3,5-triazine (tpyt) molecule to a new copper(II) complex containing the [Cu(bpca)]⁺ unit: Preparation, general characterization and magnetic property.** Da Silva, R. M. R. (UNIFAL); Ribeiro, E. O. (UNIFAL); De Campos, N. R. (UNIFAL); Doriguetto, A. C. (UNIFAL); Ribeiro, M. A. (UFES); Barros, W. P. (UNICAMP); Stumpf, H. O. (UFMG); Marinho, M. V. (UNIFAL)
- INO-086 Photocatalytic degradation of emerging inorganic pollutants (EOPs) in water using kaolinite-Fe-TiO₂.** Saltarelli, M. (UNIFRAN); Melo, L. B. (UNIFRAN); Bonfim, L. (UNIFRAN); de Faria, E. H. (UNIFRAN); Vicente, M. A. (USAL); Trujillano, R. (USAL); Rives, V. (USAL); Gil, A. (UPNA); Korili, S. (UPNA); Ciuffi, K. J. (UNIFRAN)
- INO-087 Buffer-dependent and ligand effect in the nitrosyl-nitrite interconversion of ruthenium complexes.** Rios, R. R. (FCFRP-USP); Rodrigues, P. G. S. (FCFRP-USP); Biazotto, J. C. (FCFRP-USP); Silva, R. S. (FCFRP-USP)
- INO-088 Effect of Ag nanoparticles in the luminescence properties of [Eu(tta)₃(phen)] Langmuir films: real-time, in situ monitoring PLS.** Assis, D. R. (IQAr-UNESP); Cebim, M. A. (IQAr-UNESP); Jafelicci Jr, M. (IQAr-UNESP); Davolos, M. R. (IQAr-UNESP)
- INO-089 Recovery of Rare Earth elements from exhausted luminescent lamps.** Vieira, M. F. (FFCLRP-USP); Silva, M. das C. (FFCLRP-USP); Galaço, A. R. B. S. (FFCLRP-USP); Ribeiro, S. J. L. (IQAr-UNESP); Serra, O. A. (FFCLRP-USP)
- INO-090 A Bioinspired Copper(2+) complex with a long-chain alkyl polypyridine ligand and its DNA interaction studies.** Santos, M. I. N. (UDESC); Prants, N. (UDESC); Melloti, M. (UDESC); Xavier, F. R. (UDESC)
- INO-091 SYNTHESIS, CHARACTERIZATION AND REACTIVITY OF NITROSYL COMPLEXES AS VASODILATORS.** Paz, I. A. (UFC); Silva, C. D. S. (IFBA); Diógenes, I. C. N. (UFC); Longhinotti, E. (UFC); Sousa, E. H. (UFC); Nascimento, N. R. F. (UECE); Lopes, L. G. F. (UFC)
- INO-092 Ru-cymene complexes containing PNP ligands: an electrochemistry and biological interaction study.** da Silva, J. P. (UFPR); Silva de Souza, E. H. (UFC); Silva Gondin, A. C. (UFC); De Araujo, M. P. (UFPR); Fuganti, O. (UFPR); Kramer, M. G. (Udelar); Facchin, Gianella (Udelar); Back, D. F. (UFSM); Wohnrath, K. (UEPG)
- INO-093 Estratégia sintética para obtenção de redes metalorgânicas contendo neodímio e um ligante derivado carboxílico de oxima fenólica.** Vaz, R. C. A. (UNICAMP); Santucci, P. M. (UNICAMP); Barros, W. P. (UNICAMP)
- INO-094 Synthesis, characterization and in vitro antitumoral activity of ternary gallium complex with anthraquinone.** Souza, I. P. (CEFET-MG); Pereira-Maia, E. C. (UFMG)
- INO-095 Study of MIL-101(Cr) synthetic routes for posterior incorporation of metalloporphyrins and application in heterogeneous catalysis.** Bosa, G. (UFPR); Silva, C. G. (UFPR); Nakagaki, S. (UFPR)
- INO-096 Cellular uptake of a Cu(I)-phosphine complex in breast tumor and non-tumor cells.** Colina Vegas, L. A. (UFSCar); Villarreal, W. (UFSCar); Batista, A. A. (UFSCar); Nóbrega, J. A. (UFSCar)
- INO-097 Antibacterial Activity of the Nitrosyl Ruthenium Complexes with General Formula [RuCl₃NO(N-N)] (N-N = phen and bpy).** PEREIRA, C. (UFRJ); GUIMARAES, D. O. (UFRJ); MARTINS, S. M. (UFRJ); Melo, R. S. (UFRJ)
- INO-098 Uso de calixarenos funcionalizados como sensores iônicos.** Silva, J. R. (UNIFESP-Diadema); Bagatín, I. A. (UNIFESP-Diadema)
- INO-099 Synthesis, structural and spectroscopy characterization of a new Quercetin-In(III) metal complex.** Favero, V. F. F. (UEMS); Cruz, M. M. C. (UEMS); Biscoli, L. O. B. (UEMS); Golçalves, A. G. (UEMS); Cabeza, N. AP. C. (UEMS); Facco, J. T. F. (UEMS); Anjos, A. A. (UEMS)
- INO-100 Obtenção e caracterização dos novos complexos de gadolínio com ligantes derivados de tetrazóis para atuação como agentes de contraste e antitumorais.** Lopes, D. S. (UFRR); Silva, S. R. (UFRR)
- INO-101 A fast microwave-assisted route of nsutite-type material.** Lavra, T. C. C. (IFMA); Bastos, K. F. (UFOPA); Gomes, H. I. O. (UFOPA); Silva, L. A. (UFMA); Figueira, B. A. M. (UFOPA); Mercury, J. M. R. (IFMA)
- INO-102 Synthesis, structural characterization and energy transfer mechanism in highly photoluminescent hydrocinnamates of Eu(III), Gd(III) and Tb(III) containing the bathophenanthroline ancillary ligand.** Feitosa, C. R. (UERJ); Marques, L. F. (UERJ); Colaço, M. V. (UERJ)

MAT – Química de Materiais

- MAT-001 MCM-22 zeolite using biogenic silica from an agro-industrial waste - Synthesis and adsorption properties.** Gomes, J. F. (UFRGS); Schwanke, A. J. (UFRGS); Gregório, J. R. (UFRGS); Bernardo-Gusmão, K. (UFRGS)
- MAT-002 Influence of Cr on mechanical and optical properties of Cr-modified-TiO₂ thin films prepared by sol-gel method.** Neves, J. C. (UFMG); Viana, M. M. (UFMG); Mohallem, N. D. S. (UFMG)
- MAT-003 Exploring the use of coal fly ash in the synthesis of magnetic zeolites.** Freitas, A. D. L. (UFC); Loiola, A. R. (UFC)
- MAT-004 Synthesis and structural, morphological and textural characterization of iron zero valence nanoparticles.** Fernandes, J. R. (UNESP-Bauru); Inácio, K. C. (UNESP-Bauru); Rissato, S. R. (UNESP-Bauru); Galhiane, M. S. (UNESP-Bauru); Carvalho-Neto, A. G. V. (UNESP-Bauru)

- MAT-005** **Synthesis of beta-Zeolite with different Si/Al molar ratio for heavy metal removal.**Pratti, L. M. (UFF); Reis, G. M. (UFF); Santos, F. S. (UFF); Pietre, M. K. (UFF)
- MAT-006** **Development of functionalized gold nanoparticles for the DNA delivery in Gene therapy studies.** Rego, L. S. (EPUSP); Azzoni, A. R. (EPUSP); Seckler, M. M. (EPUSP)
- MAT-007** **Synthesis, characterization and optical activity of Ag- doped ZnWO₄ by hydrothermal.** De Jesus, C. dos S. (UFG-Catalão); Borges, K. C. M. (UFG-Catalão); Gonçalves, R. F. (UFG-Catalão); Rodrigues, M. H. M. (UFG-Catalão); Santos, M. R. C. (UFG-Catalão); Godinho, M. J. (UFG-Catalão)
- MAT-008** **Síntese de nanotubos de óxido de nióbio e aplicação destes como suporte na imobilização de enzimas.** Silva, T. C. (UTFPR); Pilissão, C. (UTFPR)
- MAT-009** **Graphene oxide/imidazole polymeric non-covalent nanocomposite: nanocatalyst for organosphosphates.** Lima, T. H. P. (UFPR); Naidek, N. (UFPR); Zarbin, A. J. G. (UFPR); Orth, E. S. (UFPR)
- MAT-010** **Study of photocatalytic action of ZnO NPs in the decomposition of synthetic polymers.** Petter da Silva, A. L. E. (FURB); de Quadros, S. (FURB); Schmitz, F. (FURB); Zimmermann, L. M. (FURB)
- MAT-011** **Kinetic investigations of the adsorption of Pb²⁺ ions from aqueous solutions using chitosan-g-poly(acrylic acid)/cellulose nanowhiskers.** Farias, A. K. M. C. (UVA); Araújo, W. S. (UVA); Lourenço, A. A. (UVA); Magalhães, C. E. de C. (UECE); Rodrigues, F. H. A. (UVA)
- MAT-012** **Anti-scaling performance of SLIPS produced onto electrochemically-textured 1020 carbon steel.** Sousa, M. F. B. (UNICAMP); Bertran, C. A. (UNICAMP)
- MAT-013** **Structural and morphological characterization of cerium doped niobium oxides for photocatalysis.** Menezes, B. A. T. (UERJ); Siqueira, D. R. (UERJ); Colaço, M. V. (UERJ); Lima, J. F. (UERJ)
- MAT-014** **Voltammetric sensing of nifedipine using a new silsesquioxane and cobalt(II) phthalocyanine modified electrode.** Winiarski, J. P. (UFSC); Peralta, R. A. (UFSC); Jost, C. L. (UFSC)
- MAT-015** **A green approach to PET recycling using cobalt nanoparticles.** Veregue, F. R. (UEM); Silva, C. T. (UEM); Rinaldi, A. W. (UEM)
- MAT-016** **Magneto-luminescent properties of lanthanide-doped nanoparticles as a function of the core-shell hierarchy.** Ferreira, F. S. (UNICAMP); Mazali, I. O. (UNICAMP); Sigoli, F. A. (UNICAMP)
- MAT-017** **Usage of high intensity ultrasound in preparation of poly(alcohol vinyl) of pharmaceutical interest.** Cavalcanti, G. K. (UFF); Futuro, D. O. (UFF); Costa, V. G. (INT)
- MAT-018** **Synthesis, characterization and nanotoxicity of 3D-graphene nanofilters for endocrine disruptors removal from water.** Leão, M. B. (UNIPAMPA); Rosa da, P. C. C. (UNIPAMPA); Dalla Corte, C. L. (UNIPAMPA); Bordin, J. R. (UFPEl); Matos, C. F. (UNIPAMPA)
- MAT-019** **Enhancing the Charge-Generation Performance of Polysilafluorene-Derivative Films by Introducing a Low-Cost Sensitizer.** Menezes de, L. C. W. (UFPR); Holakoei, S. (UFRJ); Pacheco, K. R. M. (UFPR); Bassi, M. J. (UFPR); Oliveira de, C. K. B. Q. M. (UFPR); Queiroz, R. V. (CSEM Brasil.); Bagnis, D. (CSEM Brasil.); Rocco, M. L. M. (UFRJ); Roman, L. S. (UFPR)
- MAT-020** **Glycine as crosslinking bridge in the beta-FeOOH/ZnO nanorods for water splitting catalyst under visible lights.**Almeida, R. M. (UFABC); Ferrari, V. C. (UFABC); Souza, J. S. (UFABC); Souza, F. L. (UFABC); Alves, W. A. (UFABC)
- MAT-021** **Synthesis of carbon nanomaterial for sulphide oxidation.** Ribeiro-Santos, T. A. (UFMG); Milagre, L. E. (UFMG); Almeida, V. F. (UFMG); Vieira, S. S. (UFMG); Castro, M. C. M. (UFMG); Araujo, M. H. (UFMG); Teixeira, A. P. C. (UFMG)
- MAT-022** **Self-assembled films based on reduced graphene oxide/polyaniline/iron oxide composites as supercapacitors.** Martins, V. H. N. (UFGD); Mendes, L. G. E. S. (UFGD); Souza, V. H. R. (UFGD)
- MAT-023** **Síntese e caracterização de nanopartículas de prata estabilizadas com a enzima tripsina.** Siqueira, J. G. M. (UFG-Catalão); Santos, L. S. (UFG-Catalão); Farias de, E. A. (IFG); Martins, M. V. A. (IFG); Oliveira, J. P. C. (UFG-Catalão)
- MAT-024** **Propriedades de Membranas de Acetato de Celulose com Extrato da Casca de Tangerina (Citrus reticulata).** Valezan, I. F. (UNISUL); Costa, N. P. A. V. (UNISUL); Walber, T. A. (UNISUL); Souza, M. (UNISUL); Giroto, E. (UFSC); Piovezan, A. P. (UNISUL); Kanis, L. A. (UNISUL); Magnago, R. F. (UNISUL)
- MAT-025** **Síntese e estudo de propriedades ópticas de nanocompósito formado por nanopartículas de ouro, polímero condutor e complexo luminescente.** Scapolan, M. I. X. (UTFPR); Oliveira, M. M. (UTFPR); Adati, R. D. (UTFPR)
- MAT-026** **Study of functionalization of carbon nanotubes with Digoxin and its application as drug delivery system.** Carneiro, P. G. (UFSJ); Pereira, D. G. (UFSJ); Domingos da Cruz, L. A. (UFSJ); Barbosa, L. A. (UFSJ); Villar, J. A. F. P. (UFSJ); Schnitzler, M. C. (UFSJ)
- MAT-027** **Fast synthesis of WO₃/MnO₂ nanocomposite.** Tiba, D. Y. (UPM); Domingues, S. H. (UPM)
- MAT-028** **Ultrasound-assisted extraction: an alternative for rare earth elements recovery from waste printed circuit boards.** Gatiboni, T. L. (UFMS); Iop, G. D. (UFMS); Raddatz, E. (UFMS); Bizzi, C. A. (UFMS); Flores, E. M. M. (UFMS); Mello, P. A. (UFMS)
- MAT-029** **Fuels production by thermal decomposition of copper oleates.** Luciano, V. A. (UFMG); Rosmaninho, M. G. (UFOP); Teixeira, A. P. C. (UFMG)
- MAT-030** **Production and characterization of activated carbons from yeast residues from industrial fermentation processes.** Santos, M. S. (UNIFESP-Diadema); Modesto, H. R. (UNIFESP-Diadema); Nunes, R. S. (UFABC); Komatsu, J. S. (UFABC); Carvalho, W. A. (UFABC); Labuto, G. (UNIFESP-Diadema)

- MAT-031 Adsorption of Cu (II) ions by functionalized Fe₃O₄ nanoparticles.** Magdalena, A. G. (FC-UNESP-Campus Bauru); Silva, E. L. (FC-UNESP-Campus Bauru); Silva, I. M. B. (FC-UNESP-Campus Bauru); Silva, G. H. O. (FC-UNESP-Campus Bauru); Silva, M. P. (FC-UNESP-Campus Bauru)
- MAT-032 Use of iron ore tailings from dams for the production of carbon nanomaterials and application in the adsorption of 17 α -Ethinylestradiol.** Silva, R. C. F. (UFMG); Araújo, M. H. (UFMG); Teixeira, A. P. C. (UFMG)
- MAT-033 Synthesis, characterization and biological assay of superparamagnetic iron oxide nanoparticles covered with methylene blue molecule.** Toledo, V. H. (UNIFESP-Diadema); Haddad, P. S. (UNIFESP-Diadema); Yoshimura, T. M. (IPEN); Toledo, S. P. (IPEN); Ribeiro, M. S. (IPEN); Castro, C. E. (UFABC)
- MAT-034 Uptake study of luminescent silica particles by living cells.** Mutti, A. M. G. (FCT-UNESP-Câmpus de Presidente Prudente); Santos, J. A. O. (FCT-UNESP-Câmpus de Presidente Prudente); Pires, A. M. (FCT-UNESP-Câmpus de Presidente Prudente); Lima, S. A. M. (FCT-UNESP-Câmpus de Presidente Prudente)
- MAT-035 Structural Properties of Porous Materials by Small Angle X-ray Scattering: The Case of Covalent Organic Frameworks.** Ceron, J. M. (PUC-RIO); Maia, R. A. (UFRJ); Carneiro, L. A. (PUC-RIO); Esteves, P. M. (UFRJ); Buarque, C. D. (PUC-RIO); Percebom, A. M. (PUC-RIO)
- MAT-036 Raman spectroscopic study of ionic liquids derived from glycerol and amino acids.** Moraes, B. R. (UFJF); Pereira, M. P. (UFJF); Bombonato, F. I. (UFJF); Izumi, C. M. S. (UFJF)
- MAT-037 Synthesis of Silver/Polypyrrole Nanocables - A Comparison between Two 'One-pot' Methods.** Baratto, R. A. (UDESC); Pezzin, S. H. (UDESC)
- MAT-038 Synthesis and characterization of nanocomposites between graphene oxide, polyaniline and manganese oxide.** Zeplin, G. (FURB); Neiva, E. G. C. (FURB)
- MAT-039 Solid-phase synthesis of a Beta-amyloid-like peptide-PEG conjugate.** Pereira, W. S. G. (UFABC); Vassiliades, S. V. (UFABC); Alves, W. A. (UFABC)
- MAT-040 Chemical synthesis of ultra-thin films of graphene through the liquid-liquid interfacial method.** Oliveira, H. S. (UFPR); Lopes, L. C. (UFPR); Zarbin, A. J. (UFPR)
- MAT-041 Avaliação da corrosão in vitro de diferentes encordoamentos de guitarra elétrica.** Silva, M. H. V. (IFPA); Assis, A. F. S. (IFPA); Neto, R. N. (IFPA); Rodrigues, E. A. (IFPA)
- MAT-042 Preparation and characterization of salts of naproxen and chitosan.** Medeiros, R. S. (IQSC-USP); Ferreira, A. P. G. (IQSC-USP); Venancio, T. (UFSCar); Cavalheiro, E. T. G. (IQSC-USP)
- MAT-043 Hidrogéis de goma-arábica modificados reforçados com fibras de eucalipto e pinos.** Taffarel Cesco, C. (UDESC); Sghedoni Artifon, S. E. (UDESC); dos Santos Rosa, D. (UFABC); Tadeu Palino, A. (UDESC)
- MAT-044 Blocks for buildings with resistance to combustion from the incorporation of industrial waste.** Baungarten, P. B. (UNISUL)
- MAT-045 Efeito da dopagem com íons manganês nas propriedades estruturais de molibdatos de cálcio.** Silva junior, R. C. (UFOP); SIQUEIRA, K. P. F. (UFOP)
- MAT-046 Synthesis and Characterization of Polymer Carbon Nitrides (PCNs) Doped with Sulfur.** Silva, I. F. (UFMG); Teixeira, I. F. (IQSC-USP); Teixeira, A. P. de C. (UFMG); Stumpf, H. O. (UFMG)
- MAT-047 Study of nanocomposites phenolic resin - carbon nanotubes and their tendency for carbon graphitization.** Renda, C. G. (UNIFAL); Bertholdo, R. (UNIFAL)
- MAT-048 Immobilization of proinflammatory lectin (DwL) on sodium titanate nanotube.** Miguel, T. B. A. R. (UFC); Castro, M. O. (UFC); Miguel, E. C. (UFC); Cavada, B. S. (UFC); Nascimento, K. S. (UFC); Ferreira, O. P. (UFC)
- MAT-049 Equilibrium studies on the adsorption of Cu²⁺ ions from aqueous solutions by chitosan-g-poly(acrylic acid)/cellulose nanowhiskers.** Farias, A. K. M. C. (UVA); Lourenço, A. A. (UVA); Magalhães, C. E. C. (UECE); Rodrigues, F. H. A. (UVA)
- MAT-050 Novel mixed transition metal oxide: RuxWyOz - Synthesis and application.** Aquino, C. B. (UPM); Domingues, S. H. (UPM)
- MAT-051 Solar cell of a new hybrid MWCNT@P3HT: construction and characterization.** Ferreira de, L. (UFMG); Fengler, T. A. L. (UFMG); Calado, H. D. R. (UFMG)
- MAT-052 Temperature, pressure and volume relationship in the crystallization process of TiO₂ anatase by hydrothermal synthesis.** Armoa, M. H. (FATEC); Jafelicci Jr., M. (IQAr-UNESP); Varanda, L. C. (IQSC-USP)
- MAT-053 Síntese de um Cristal Líquido Discótico Nemático Luminescente contendo 2,1,3-benzotiadiazol e 1,3,4-oxadiazol.** Eiseler, A. (UFSC); Ovalle, S. (UFSC); Ferreira, M. (UFSC); Gallardo, H. (UFSC)
- MAT-054 Bifuncionalização seletiva de óxido de grafeno para mimetização de nanoenzimas: modificação de grupos epóxidos e carboxílicos.** Santos, Y. H. (UFPR); Zarbin, A. J. G. (UFPR); Orth, E. S. (UFPR)
- MAT-055 Triclosan degradation by heterogeneous photocatalysis using Nb₂O₅ immobilized in bentonite clay.** Caetano, E. H. (UEPG); Kloss, J. R. (UTFPR); Tiburtius, E. R. L. (UEPG); Kosera, V. S. (UEPG); Fujiwara, S. T. (UEPG)
- MAT-056 Synthesis of oxide coatings with bactericidal activity by plasma electrolytic oxidation (PEO) of Aluminum.** Rodrigues, A. (UFSCar); Santos, J. S. (UFSCar); Simon, A. P. (UTFPR); Ferreira, C. H. (UTFPR); Santos, V. A. Q. (UTFPR); Sikora, M. S. (UTFPR); Cruz, N. C. (UNESP-Sorocaba); Trivinho-Strixino, F. (UFSCar)
- MAT-057 Obtaining silica from freshwater sponges ("cauxi") of the Tapajós river (Amazon region).** Couto, N. A. F. (UFOPA); Mello, G. A. B. (UFOPA)

- MAT-058 Surface Silanization of Graphene Oxide and Multi-walled Carbon Nanotubes with 3-aminopropyl triethoxysilane.** Serodre, T. (CDTN); Oliveira, N. A. P. (CDTN); Ferreira, M. P. (CDTN); Santos, A. P. (CDTN); Resende, V. G. (CDTN); Furtado, C. A. (CDTN)
- MAT-059 Different Electrolyte Additives in the Efficiency Improvement of Dye-Sensitized Solar Cells.** Santa-Cruz, L. A. (CETENE); Oliveira, M. Z. (CETENE); Soares, T. A. S. (CETENE); Machado, G. (CETENE)
- MAT-060 Estudo de composições de blendas poliméricas co-contínuas de Poliestireno/Polimetilmetacrilato e inclusão de cargas condutoras.** Pietezak, D. F. (UDESC); Junckes, E. S. (UDESC); Veja, F. A. S. (UDESC); Becker, D. (UDESC); Dalmolin, C. (UDESC)
- MAT-061 Microwave assisted time-efficient green synthesis of upconverting NaGdF₄:Yb³⁺,Tm³⁺ material.** Giordano, L. (IQUSP); Rodrigues, L. C. V. (IQUSP)
- MAT-062 Synthesis of mesoporous silica of type MCM - 41 functionalized with amines for CO₂ adsorption.** Castro, L. S. (UFMG); Teixeira, A. P. C. (UFMG); Porto, A. O. (UFMG)
- MAT-063 Study on morphology of plasma-treated cellulose acetate membranes.** Stieven, W. S. (UNISUL); Hoffman, J. H. (UNISUL); Egert, P. E. (UNISUL); Silva, H. S. (UNISUL); Magnago, R. H. (UNISUL); Consoni, D. C. (UFSC); Seeber, A. S. (UNIPAMPA)
- MAT-064 Development and improvement of metallic nanoparticles with plasmon resonance properties for sensing applications.** Couto, R. T. (UERJ); Camara, A. R. (UERJ); Lima, J. F. (UERJ)
- MAT-065 Thin films of nanocomposites between multi-walled carbon nanotubes and graphene oxide obtained in liquid-liquid interfaces.** Pinto, C. S. (UFPR); Zarbin, A. J. G. (UFPR)
- MAT-066 Advances on light storage materials: theory, mechanisms and applications.** Rodrigues, L. C. V. (IQUSP); Barbará, M. A. S. G. (IQUSP); Santos, D. O. A. (IQUSP); Giordano, L. (IQUSP); Fritzen, D. L. (IQUSP); Aldi, A. (IQUSP); Teixeira, V. C. (LNLS)
- MAT-067 Deposition and Surface Modification of Metal Nanoparticles on Silica Substrate for Optical Devices Improvement.** Oliveira, M. M. (UTFPR); Adati, R. D. (UTFPR); Pereira, A. F. (UTFPR); Meinol, K. (UTFPR); Klimpovuz, C. R. (UFPR); Pereira, L. S. (UTFPR)
- MAT-068 New curcumin coumarin derivative ligand and its Fe(II) and Zn(II) complexes: Synthesis, characterization and bactericidal evaluation against E. coli.** Moura, A. (IQAR-UNESP); Vecchi, R. (IBB-UNESP); Silva Filho, L. C. (UNESP-Bauru); Caires, F. J. (UNESP-Bauru)
- MAT-069 SiO₂-NH₂/Beta-cyclodextrin as a platform for protoporphyrin IX photosensitizer in the context of photodynamic therapy.** Zanetti, G. I. (UFRJ); Malta, L. F. B. (UFRJ); Ribeiro, E. S. (UFRJ); Correa, R. J. (UFRJ)
- MAT-070 Cobalt aluminate obtained at low temperature by hydrothermal method using alumina and aqueous Co(II) nitrate solution as precursors.** Borges, G. E. (UNIFESP-Diadema); Noda, L. K. (UNIFESP-Diadema)
- MAT-071 Study of the modulating action of CuFe₂O₄ nanoparticles for the drugs Captopril, Enalapril and Lisinopril.** Soares, L. F. (UFSJ); Batista, A. A. (UFSJ); Oliveira, L. L. F. (UFSJ); Costa, L. C. (UFSJ); Coelho, E. C. (UFSJ); Santos, M. J. (UFSJ)
- MAT-072 Use of cellulose nanocrystals with phosphate groups as template to produce bioactive glass scaffolds.** Fontes, C. O. (UNICAMP); Silva, M. O. (OX-UK); Bertran, C. A. (UNICAMP)
- MAT-073 Hydrochars from cigarette butts: from environmental pollutant to environmentally dye absorbent.** Maniezzo, R. S. (UEM); de Lima, H. H. C. (UEM); Kupfer, V. L. (UEM); Guilherme, M. R. (UniCesumar); Moisés, M. P. (UTFPR); Arroyo, P. A. (UEM); Rinaldi, A. W. (UEM)
- MAT-074 Design of a crumpled ruffled graphene/copper graphene/co composites for electroche sensing of hydrogen drogen peroxide peroxide.** Silva, A. W. B. N. (UFGD); Souza, V. H. R. (UFGD)
- MAT-075 Synthesis and characterization of nanocomposites between graphene and zinc oxide nanoparticles.** Busarello, P. (FURB); Zeplin, G. (FURB); Quadros, S. (FURB); Zimmermann, L. M. (FURB); Neiva, E. G. C. (FURB)
- MAT-076 Chemical and electrochemical stability of black phosphorus through polyaniline protection.** Fonsaca, J. E. S. (UFPR); Domingues, S. H. (UPM); Orth, E. S. (UFPR); Zarbin, A. J. G. (UFPR)
- MAT-077 Helical carbon nanotubes synthesis using organometallic complexes for removal emerging contaminants.** Filho, R. D. F. (UFMG); Teixeira, A. P. C. (UFMG); Porto, A. O. (UFMG)
- MAT-078 Synthesis of carbon nanomaterials via chemical vapor deposition using catalysts based on iron mining residues and molybdenum.** Duarte Figueiredo, M. D. F. (UFMG); Araujo, M. H. A. (UFMG); Carvalho Teixeira, A. P. C. T. (UFMG)
- MAT-079 Can covalent functionalization at nanocarbons always be a successful approach? Insights from polymeric nanocomposites.** Naidek, N. (UFPR); Zarbin, A. J. G. (UFPR); Orth, E. S. (UFPR)
- MAT-080 Obtention of Losartan Controlled Delivery Device Based on Microcrystalline Cellulose (MCC) and Supported Ionic Liquid (SILP).** Santos, S. S. O. (UFOP); Speziali, M. G. (UFOP)
- MAT-081 Hidrogéis baseados em quitosana enxertada com poli(ácido acrílico)/poli(acrilamida): cinética de intumescimento.** Araújo, W. S. (UVA); Rodrigues, F. H. A. (UVA)
- MAT-082 Adsorção e desorção de ions Cu²⁺ a partir de hidrogéis de quitosana enxertado com poli(ácido acrílico) e nanowhiskers de celulose.** Lourenço, A. A. (UVA); Farias, A. K. M. C. (UVA); Magalhães, C. E. C. (UECE); Rodrigues, F. H. A. (UVA)
- MAT-083 2D Nanocomposite: High quality graphene oxide (HQGO) and cobalt oxide (Co₃O₄ -2D), possible applications in energy storage.** Nagaoka, D. A. (UPM); Domingues, S. H. (UPM)
- MAT-084 Electrochemical study of all-chemically synthesized graphene/iron oxide composites.** Santos, J. (UFPR); Lopes, L. C. (UFPR); Zarbin, A. J. G. (UFPR)
- MAT-085 Synthesis of banana-shaped molecules derived from 2-methoxy-3-cyanopyridine.** Abatti, P. P. (UFSC); Gallardo, H. (UFSC)

- MAT-086 Nanopartículas de ouro bioconjugadas com a enzima tripsina.** Santos, L. A. (UFG-Catalão); Siqueira, J. G. M. (UFG-Catalão); de Farias, E. A. (IFG); Martins, M. V. A. (IFG); Oliveira, J. P. de C. (UFG-Catalão)
- MAT-087 A new low cost methodology for the analysis of oil binders present in art work paintings and cultural heritage by potentiometric titration.** Meurer, L. (UFSC); Szpoganicz, B. (UFSC); Mangrich, A. S. (UFSC); Costa, T. G. (UFSC)
- MAT-088 Avaliação da energia de superfície em sistemas terciários de blendas poliméricas e partículas condutoras.** Junckes, E. S. (UDESC); Pietezak, D. F. (UDESC); Silva Vega, F. A. (UDESC); Becker, D. (UDESC); Dalmolin, C. (UDESC)
- MAT-089 An environment compatible LDH performing as cation absorber for heavy metal removal from contaminated effluents.** CUNHA, LM (UFRJ); ROCHA, LDS (UFRJ); DE SOUZA, RM (UFRJ); MALTA, LFB (UFRJ)
- MAT-090 RE³⁺ content influence on the structural and photoluminescent properties of Tm³⁺/Yb³⁺ co-doped Yttrium Tantalates.** Labaki, H. P. (FFCLRP-USP); Borges, F. H. (FFCLRP-USP); Caixeta, F. J. (FFCLRP-USP); Gonçalves, R. R. (FFCLRP-USP)
- MAT-091 Synthesis and characterization of gold-rhodium dendritic nanoparticles.** Rodrigues, M. P. (IQUSP); Cutolo, L. O. (IQUSP); Torresi, S. I. C. (IQUSP); Camargo, P. H. C. (IQUSP)
- MAT-092 Bacterial cellulose aerogels for adsorption and recovery of rare-earth elements extracted from discarded fluorescent lamps.** Silva, T. C. A. (IQAr-UNESP); Mitsuahara, A. T. (IQAr-UNESP); Thomeo, Y. M. (IQAr-UNESP); Ferreira Neto, E. P. (IQAr-UNESP); Ribeiro, S. J. L. (IQAr-UNESP)
- MAT-093 Atividade adsorviva em colunas de leito fixo contendo Ferrita de Cobre (CuFe₂O₄) dos medicamentos Captopril, Lisinopril e Verapamil.** Costa, L. C. (UFSJ); Batista, A. A. (UFSJ); Oliveira, L. L. F. (UFSJ); Santos, M. J. (UFSJ); Soares, L. F. (UFSJ)
- MAT-094 Facile one-step electrodeposition fabrication of amorphous MoS₂ films for hydrogen evolution reaction.** Medina, M. (UFSCar); Souza Lucas de, F. W. (IQSC-USP); Mascaro, L. H. (UFSCar)
- MAT-095 Copper Ferrite (CuFe₂O₄) and the adsorptive activity for the removal of the pesticides Ivermectin and K-Othrine in a fixed-bed column.** Batista, A. A. (UFSJ); Oliveira, L. L. F. (UFSJ); Costa, L. C. (UFSJ); Santos, M. J. (UFSJ); Soares, L. F. (UFSJ)
- MAT-096 The influence of organic stabilizers on photocatalytic activity of titania.** Moreira, D. E. B. (UERJ); Menezes, B. A. T. (UERJ); Lima, J. F. (UERJ)
- MAT-097 Green light-emitting diode based on Eu²⁺-doped silicate for traffic signals and circadian rhythm control.** Bispo-Jr, A. G. (FCT-UNESP-Câmpus de Presidente Prudente); Lima, S. A. M. (FCT-UNESP-Câmpus de Presidente Prudente); Ferreira, R. A. S. (UA-Portugal); Carlos, L. D. (UA-Portugal); Pires, A. M. (FCT-UNESP-Câmpus de Presidente Prudente)
- MAT-098 Caracterização de Membranas de Celulose Bacteriana Oxidadas Seletivamente.** Streit, S. (UDESC); Inoue, B. S. (UDESC); Schneider, A. L. S. (UNIVILLE); Meier, M. M. (UDESC)
- MAT-099 Photodegradation of the methylene blue dye using composites formed by MOFs and TiO₂ nanotubes.** Souza, E. J. (UFPE); Machado, G. (CETENE); Barros, B. S. (UFPE)
- MAT-100 Mixed Matrix Membranes with MIL-53(Al) for gas separation.** MIRANDA, J. L. (UFRJ); ABREU, T. P. (UFRJ); FERRAZ, H. C. (UFRJ); MOURA, L. C. (UFRJ)
- MAT-101 Lead-free Perovskite Cs₂AgBiBr₆ thin film prepared by Ion Exchange of Cs₂AgBiBr₆ thin films.** Silva, I. A. (UNICAMP); Oliveira, W. X. C. (UFMG); Nogueira, A. F. (UNICAMP)
- MAT-102 Recovery of rare earth elements contained in discarded fluorescent lamps solid waste using acid treatment and silica-based adsorbents.** Mitsuahara, A. T. (IQAr-UNESP); Silva, T. C. A. (IQAr-UNESP); Thomeo, Y. M. (IQAr-UNESP); Ferreira Neto, E. P. (IQAr-UNESP); Ribeiro, S. J. L. (IQAr-UNESP)
- MAT-103 Primary Thermometers based on Upconverting Er³⁺/Yb³⁺ co-doped Yttrium Tantalates.** Borges, F. H. (FFCLRP-USP); Caixeta, F. J. (FFCLRP-USP); Martins, J. (UA-Portugal); Brites, C. D. S. (UA-Portugal); Carlos, L. D. (UA-Portugal); Ferreira, R. A. S. (UA-Portugal); Gonçalves, R. R. (FFCLRP-USP)
- MAT-104 Study of the adsorption of the larvicide Temephos in dry bed column using copper ferrite as adsorbent.** Oliveira, L. L. F. (UFSJ); Costa, L. C. (UFSJ); Batista, A. A. (UFSJ); Coelho, E. C. (UFSJ); Soares, L. F. (UFSJ)
- MAT-105 Caracterização de filmes de gelatina modificados com formaldeído.** Campuzano, A. M. G. (UDESC); Meier, M. M. (UDESC); Krama, A. R. (UDESC)
- MAT-106 Synthesis and Characterization of New Photoactive Columnar Liquid Crystals Containing Two Electronically Distinct Parts.** SILVA, W. P. (UFPB); GIROTTO, E. (UFSC); GALLARDO, H. (UFSC); CRISTIANO, R. (UFPB)
- MAT-107 Multicolor Emission through Bi-directional Energy Transfer in Nd³⁺-Sensitized Gd³⁺-based Core/Shell/Shell Upconverting Nanoparticles.** Serge-Correales, Y. E. (IQAr-UNESP); Hazra, C. (IQAr-UNESP); Ullah, S. (IQAr-UNESP); Lima, L. R. (IQAr-UNESP); Ribeiro, S. J. L. (IQAr-UNESP)
- MAT-108 Low-cost paper-based inkjet-printed substrate for SERS sensing platform.** Godoy, N. V. (IQ-UNICAMP); García-Lojo, D. (UVIGO); Perez-Juste, J. (UVIGO); Pastoriza-Santos, I. (UVIGO); Mazali, I. O. (IQ-UNICAMP)
- MAT-109 Highly-branched silver magnetic microcomposite as SERS aptasensor for cardiac troponin I detection.** Alves, R. S. (UNICAMP); Sigoli, F. A. (UNICAMP); Mazali, I. O. (UNICAMP)
- MAT-110 Synthesis of Au-CeO₂ nanoparticles supported on mesoporous silica and its potential applicability for the preferential oxidation of CO (PrOx-CO).** Sousa, G. P. (UNICAMP); Oliveira, C. S. (UNICAMP); Teixeira Neto, E. (UNICAMP); Sigoli, F. A. (UNICAMP); Mazali, I. O. (UNICAMP)

- MAT-111** Influence of the structural design of CeO₂ porous nanorods decorated with gold nanoparticles upon the optimization of water gas shift reaction (WGSR). Silva, R. B. M. (UNICAMP); Oliveira, C. S. (UNICAMP); Neto, E. T. (UNICAMP); Sigoli, F. A. (UNICAMP); Mazali, I. O. (UNICAMP)
- MAT-112** Study of the photovoltaic cells coated by silica matrix doped at different concentrations of the Er³⁺ and Yb³⁺ ions. Batista, J. P. (UNIFRAN); DA Silva, H. J. (UNIFRAN); Rocha, L. A. (UNIFRAN); NASSAR, E. J. (UNIFRAN)
- MAT-113** Síntese e caracterização de um substituto para o composto bis-gma: componente de resina e selante dentário. Correa, G. S. (UDESC)
- MAT-114** Synthesis and characterization of hydrogel from glycerol and citric acid: adsorption and reducing properties. Mendonça, F. G. (UFMG); Menezes, I. R. S. (UFMG); Lago, R. M. (UFMG)
- MAT-115** Development of new compounds derived from the 1-methyl-1H-benzo[d][1,2,3]triazole center for application as OLED carrier layers. Decarli, N. O. (UFSC); Vieira, A. A. (UFBA); Bechtold, I. H. (UFSC)
- MAT-116** Preparation of Bimetallic Heterogeneous Catalysts based on Nb and Mn for removal of N and S-containing contaminants from oil phases. Farias de, G. R. (CEFET-MG); Mendonça, F. G. (UFMG); Nascimento do, G. M. (UFABC); Stumpf, H. O. (UFMG); Pim do, W. D. (CEFET-MG)
- MAT-117** Light-responsive drug delivery system based on polymer functionalized reduced graphene oxide to treat leishmaniasis. Vitorino, L. S. (UFF); Bessa, I. A. A. (UFF); Custódio, T. (UFF); Santos, E. C. S. (CBPF); Silva, R. A. N. (UNICAMP); Ronconi, C. M. (UFF)
- MAT-118** AMF stimuli-responsive nanodevice assembled from magnetic nanoparticles and carboxylate pillar[5]arene as a candidate for chemo-hyperthermia therapy. Fernandes, T. S. (UFF); Santos, E. C. S. (UFF); Madiaga, V. G. C. (UFF); Garcia, F. (CBPF); Nascimento, V. (UFF); Ronconi, C. M. (UFF)
- MAT-119** Synthesis and characterization of pure and doped graphitic carbon nitrides for CO₂ adsorption applications. Ferreira, L. E. M. (UFF); Dos Santos, T. C. (UFF); LIMA, T. M. (UFF); Ronconi, C. M. (UFF)
- MAT-120** Obtenção de microfibras de Ecovio contendo extrato de Coix lacryma-jobi, com ação antimicrobiana. Breitenbach, G. L. (UNIOESTE); Caetano, J. (UNIOESTE); Rosenberger, M. G. (UFPR); Dragunski, D. C. (UNIOESTE)
- MAT-121** pH sensitive magnetic nanohydrogel for drug delivery. Piazza, R. D. (IQAr-UNESP); Brandt, J. V. (IQAr-UNESP); Vega-Chacon, J. (IQAr-UNESP); Marques, R. F. C. (IQAr-UNESP); Jafelicci Jr, M. (IQAr-UNESP)
- MAT-122** Síntese e caracterização de adsorventes à base de quitosana. Crispim, G. O. (); Mo, L. C. N. (); Pinto, B. P. (); Mota, C. J. A. (); Ribeiro, E. (); Das Chagas, J. A. O. (UFRJ)
- MAT-123** Estudo de filmes de Gelatina para aplicação na engenharia de alimentos. Da Hora, J. P. (UVA); Da Silva, D. S. (UVA); Rodrigues, F. H. A. (UVA)
- MAT-124** Synthesis of Polyaniline nanofibers/ multi-walled carbon nanotube by "in situ" oxidative polymerization. Vega, F. A. S. V. (UDESC); Becker, D. B. (UDESC); DALMOLIN, C. D. (UDESC)
- MAT-125** Ação do Glicerol em filmes de gelatina: reticulante ou plastificante?. Krama, A. R. (UDESC); Campuzano, A. M. G. (UDESC); Meier, M. M. (UDESC)
- MAT-126** Electrochemical study of hydrogen peroxide sensors from crumpled graphene/manganese ferrite composites. Nonaka, L. H. (UFGD); Souza, V. H. R. (UFGD)
- MAT-127** Effect of morphology in the solution of amyloidogenic model peptides as asymmetric catalysts for aldol reactions. Pelin, J. N. B. D. (UFABC); Soares, B. M. (UFABC); Gerbelli, B. B. (UFABC); Aguiar, A. M. (UNIFESP-Diadema); Alves, W. A. (UFABC)
- MAT-128** Red Downconversion Luminescence and Rare Earth Concentration Dependence on Pr³⁺ Doped Layered Perovskite Phosphor KCa₂Nb₃O₁₀. Vendruscolo, V. V. (IQUSP); Rodrigues, L. C. V. R. (IQUSP); Constantino, V. R. L. C. (IQUSP)
- MAT-129** Avaliação do Desempenho de Isoladores Elétricos de Porcelana através do Uso de Recobrimentos Poliméricos Hidrofóbicos. Quaresma, G. H. (CEFET-MG); Calado, C. R. (CEFET-MG)
- MAT-130** Propriedades Catalíticas Tipo Fenton Heterogêneo de g-C₃N₄. OLIVEIRA, W. L. (UFVJM); Mesquita, J. P. (UFVJM); Silva, L. F. O. (UFVJM); Ferreira, M. F. (UFVJM); Mourão, H. A. J. L. (UFVJM); Honoria, F. G. (UFSJ)
- MAT-131** Investigação das propriedades fotoluminescentes e estruturais dos fósforos Ti¹⁺-XYXO₂:Eu³⁺ preparados pelo método sol-gel. Oliveira, L. S. (UFU); Filho, J. C. S. (UFU); Castro, A. A. C. (UFU); Barbosa, H. P. (UFU); Ferrari, J. L. (UFU)
- MAT-132** Sintering behavior of Y-doped ZrO₂ ceramics: the effect of the addition of Nb₂O₅ in monoclinic, orthorhombic and polymorphic phases. Paiva, J. C. (UFABC); Fredericci, C. (IPT); Bueno, L. A. (UFABC)
- MAT-133** Impact of cellulose nanocrystals addition and different crosslinking processes on physical properties, biocompatibility and drug releasing performance of alginate/carboxymethyl cellulose blend. Neves Silva, K. M. M. (UFMG); Costa da, B. L. (UFMG); Dourado, L. (UFMG); Silva, R. (UFMG); Silva Cunha, A. (UFMG); Goulart, G. (UFMG); Faria, P. (UFMG); Campos Rubio, J. (UFMG); Silva-Caldeira, P. P. (CEFET-MG)
- MAT-134** A Gold Nanoparticles and PEDOT-PLLA Composite. Cerqueira, G. (IQUSP); Rocha, I. (IQUSP); Da Silva, A. C. (IQUSP); Torresi, S. I. C. (IQUSP)
- MAT-135** Avaliação estrutural e fotoluminescente do material 30SiO₂-70TiO₂ contendo Yb³⁺ e Eu³⁺ em função da quantidade de Er³⁺ na composição. Kobayashi, T. Y. (UFU); Barbosa, H. P. (UFU); Buarque, J. M. M. (UFU); Ferrari, J. L. (UFU)
- MAT-136** Structural and Thermal Evaluation of Composites Based on Polycaprolactone/Titanium Phosphate with and without long chain amine. Quinelato, R. R. R. (UFRJ); Coval, D. (UFRJ); Valencia, G. (UFRJ); Mendes, L. C. (UFRJ)

- MAT-137 Optimization of optical and photocatalytic properties of silver tungstate and molybdate crystals.** Amorim, L. H. (); Fratelli, J. R. F. (UTFPR); Suzukii, V. Y. S. (UTFPR); La Porta, F. L. P. (UTFPR)
- MAT-138 Study of Sulfonated Nanocellulose Beads as Potential Immunosorbents.** Rocha, I. O. (IQUSP); Diniz, M. (UU); Hattori, Y. (UU); Ferraz, N. (UU); Mihranyan, A. (UU); Strømme, M. (UU); Lindh, J. (UU)
- MAT-139 Highly ordered surface of electrospun PCL fiber decorated with a bioactive protein (BMP-7) for bone tissue engineering.** Kolanthai, E. (IQUSP); Carreira, A. C. (FMUSP); Sogayar, M. C. (FMUSP); Catalani, L. H. (IQUSP)
- MAT-140 Enzymatic synthesis of unsaturated polymers based on panthenol for 3D printing applications.** Minatelli, D. F. (IQUSP); Dourado, I. L. A. (IQUSP); Catalani, L. H. (IQUSP)
- MAT-141 Synthesis of controlled hybrid materials based on Fe₃O₄ for catalytic applications.** Tanaka, L. Y. (IQUSP); Barbosa, E. C. M. (IQUSP); Camargo, P. H. C. (IQUSP)
- MAT-142 Persistent Luminescence is affected by band gap. But how?.** Barbará, M. (IQUSP); Rodrigues, L. C. V. (IQUSP)
- MAT-143 Core-shell nanofibers as drug carriers for transdermal delivery of drugs with antimalarial activity.** Rebouças, L. O. (IQUSP); Catalani, L. H. (IQUSP); Immich, A. P. S. (UFSC)
- MAT-144 Eu³⁺ beta-diketonate silica coated persistent luminescent materials.** Machado, I. P. (); Merizio, L. G. (); Brito, H. F. (); Francisco, L. H. C. (); Salvador, F. F. S. (); Moreira, R. P. (); Bonturim, E. (); Felinto, M. C. F. C. ()
- MAT-145 Building of a low-cost flow photoreactor and investigation of the influence of sand granulometry on water flow through the reactor.** Lira, W. A. S. (UFOPA); Oliveira, G. C. C. A. (UFOPA); Rabelo, A. C. (UFOPA)

MED – Química Medicinal

- MED-001 Identification of thiosemicarbazones with potential antiviral activity against Chikungunya Virus nsP2 protease.** Estrela, I. O. (UFBA); Tavares, A. C. (UFBA); Galvão, D. S. (UFBA); Cunha, S. D. (UFBA); Pita, S. S. R. (UFBA)
- MED-002 Novel praziquantel analogues with antiparasitic effect against adult and immature forms of *S. mansoni*, the ethiological agent of Schistosomiasis.** Dantas, R. F. (FIOCRUZ); Noronha Jr, F. R. C. (UFRJ); Valente, W. C. G. (FIOCRUZ); Rezende-Neto, J. M. (FIOCRUZ); Shirato, G. V. (FIOCRUZ); Whiteman, H. L. (IBERS); Hoffmann, K. F. (IBERS); Ferreira, S. B. (UFRJ); Silva-Jr, F. P. (FIOCRUZ)
- MED-003 Síntese e avaliação farmacológica de novas 3-(1,2,3-triazol)-cumarinas planejadas para o tratamento da Doença de Alzheimer.** Nadur, N. F. (UFRRJ); Franco, D. F. P. (UFRRJ); Souza, G. A. (UFRRJ); Azevedo, L. L. (UFRRJ); Kümmerle, A. E. (UFRRJ)
- MED-004 Papain bioreactors as tool for screening cysteine protease ligands.** Leandro, C. S. (UFSCar); Lopes, B. R. (UFSCar); Vieira, P. C. (FCFRP-USP); Corrêa, A. G. (UFSCar); Montanari, C. A. (IQSC-USP); Cass, Q. B. (UFSCar)
- MED-005 Synthesis and evaluation of trypanocidal activity of novel functionalized carbonylhydrazonamides.** Nascimento, M. S. S. (FIOCRUZ); da Costa, J. S. (FIOCRUZ); Câmara, V. R. F. (FIOCRUZ); Barbosa, J. M. C. (FIOCRUZ); Lins, A. S. M. (FIOCRUZ); Salomão, K. (FIOCRUZ); de Castro, S. L. (FIOCRUZ); Darvalho, S. A. (FIOCRUZ); da Silva, E. F. (FIOCRUZ); Fraga, C. A. M. (UFRJ)
- MED-006 Síntese e avaliação tripanocida de novas cumarinas N-acilidrazônicas planejadas como potenciais agentes antichagásicos.** Carvalho, S. A. (FIOCRUZ); Câmara, V. R. F. (FIOCRUZ); Capelini, C. (FIOCRUZ); Juliana, M. C. B. (FIOCRUZ); Salomão, K. (FIOCRUZ); de Castro, S. L. (FIOCRUZ); da Silva, E. F. (FIOCRUZ); Villar, J. D. F. (IME)
- MED-007 Metabolic stability studies of methyl and ethyl esters and their application in Medicinal Chemistry.** Souza, H. M. R. (UFRJ); Gelves, L. G. V. (UFRJ); Lima, L. M. (UFRJ)
- MED-008 Hotspots relationship to affinity and other ligand binding efficiency metrics.** Lacerda, P. S. (UFBA); Castilho, M. S. (UFBA)
- MED-009 Theoretical and experimental studies on the inhibition of human acetyl and butyrylcholinesterases by aflatoxin M1 (AFM1).** Almeida, J. S. F. D. (IME); Cavalcante, S. F. A. (IPPN-UFRJ); Dolezal, R. (UHK); kamil, K. (UHK); Musilek, K. (UHK); Jun, D. (FNHK); Franca, T. C. C. (IME)
- MED-010 Mechanism-based design of anti-virulence drugs against *Pseudomonas aeruginosa*.** Froes, T. Q. (UEFS); Pinto, A. A. (IFSC-USP); Metwally, K. (ZU); Castilho, M. S. (UFBA)
- MED-011 Avaliação do potencial tóxico e da atividade antioxidante da O-carboximetilquitosana guanilda.** Carvalho, E. G. B. (UEG); Costa, M. B. (UEG); Signini, R. (UEG)
- MED-012 Inclusion of the electrolytic effect in predictive models of inhibitory activity.** Rocha, S. F. L. S. (UFRRJ); Sant'Anna, C. M. R. (UFRRJ)
- MED-013 Identificação de Hits a partir da Quimioteca do LASSBio®.** Dutra, M. J. (UFRJ); Franco, L. S. (UFRJ); Maia, R. C. (UFRJ); Pedreira, J. G. B. (UFRJ); Barreiro, E. J. (UFRJ)
- MED-014 Isolation of Natural Prenylated Xanthenes, Synthesis of Derivatives, and Assessment of Their Antiparasitic Activity.** Alcântara-Pinto, D. C. (UFRRJ); Santos, P. P. (UFRRJ); M. Mesquita-Velez, A. S. (UFRRJ); Gonçalves, L. L. (UFRRJ); Decoté-Ricardo, D. (UFRRJ); Freire de Lima, M. E. (UFRRJ)
- MED-015 Investigation on the binding mode of chromenes with DNA: a molecular docking and molecular dynamic approaches.** Silva, E. C. D. (UFAL); Silva, M. M. (UFAL); Dantas, M. D. A. (UFAL); Santos, J. C. C. (UFAL); Figueiredo, I. M. (UFAL); Das, S. (Visva-Bharati University); Brahmachan, G. (Visva-Bharati University); Fátima, A. (UFMG); Silva, C. M. (UFMG); Ruiz, A. L. T. G. (UNICAMP); Aquino, T. M. (UFAL)

- MED-016** **Design and evaluation of leishmanicidal activity of benzophenone derivatives.** Farias, B. F. (UNIFAL); Baldim, J. L. (UFABC); Nunes, T. R. (UNIFAL); Pereira, N. F. (UNIFAL); Carvalho, D. T. (UNIFAL); Souza, T. B. (UFOP); Chagas-Paula, D. A. (UNIFAL); Dias, D. F. (UNIFAL)
- MED-017** **Derivatives of the cashew nut shell liquid as lead compounds for anti-virulence drug development.** Mendes, M. S. (UFBA); Froes, T. Q. (UEFS); Cardoso, G. S. R. H. (UnB); Ferreira, T. A. M. (UnB); Ramos, G. A. (UnB); Romeiro, L. A. S. (UnB); Castilho, M. S. (UFBA)
- MED-018** **CHALCONES SYNTHESIS AND EVALUATION OF ANTIPROTOZOAL ACTIVITY IN PHYTOMONAS SERPENS.** Souza, G. B. (UFS); Alves, P. B. (UFS); Barreiros, A. L. B. S. (UFS); Barreiros, M. L. (UFS); Fernandes, R. P. M. (UFS); Silva, K. P. (UFS); Costa, E. V. (UFAM); Araújo, M. S. (UFAM)
- MED-019** **Halogenation as a strategy to improve antiplasmodial activity of new 3-alkylpyridine marine alkaloids.** BARBOSA, C. S. (UFSJ); Guimarães, D. S. M. (FIOCRUZ); Chaves, J. C. A. (UFSJ); Barbosa, M. C. S. (UFSJ); Costa, M. L. A. (UFSJ); Júnior, C. S. N. (UFSJ); Guimarães, L. (UFSJ); Viana, R. M. R. (UTFPR); Santos, F. V. (UFSJ); Brito, C. F. A. (FIOCRUZ); Varotti, F. P. (UFSJ); Viana, G. H. R. (UFSJ)
- MED-020** **Design, Synthesis and Antiparasitic Effects of New Piperine- Nitroimidazole Hybrids.** Velez, A. S. M. M. (UFRRJ); Pinto, D. C. A. (UFRRJ); Santos, P. P. (UFRRJ); Santos, I. M. F. (UFRRJ); Ricardo, D. D. (UFRRJ); Lima, M. E. F. (UFRRJ)
- MED-021** **Avaliação da toxicidade e atividade antioxidante de enol éter.** Lemes, G. F. (); Costa, M. B. (); Monteiro Oliveira, Y. C. (UEG-C CET)
- MED-022** **Evaluation of the antiparasitic effects of the green propolis extract and its main prenylated compounds.** Pires, L. O. (UFRRJ); Alcântara-Pinto, D. C. (UFRRJ); Pitasse-Santos, P. (UFRRJ); Decoté-Ricardo, D. (UFRRJ); Lima, M. E. F. (UFRRJ); Castro, R. N. (UFRRJ)
- MED-023** **Avaliação da atividade antioxidante e fotoprotetora do óleo essencial e extrato aquoso das folhas e caule da Chenopodium ambrosioides.** Sousa, K. R. L. (UFG-Jataí); Rodrigues Júnior, R. O. (UFG-Jataí); Donato, R. M. (UFG-Jataí); Freitas, W. J. E. (UFG-Jataí); Silva, C. A. (UFG-Jataí)
- MED-024** **Sulfated and carboxymethylated botryosphaeran as a novel antiviral polysaccharide derivative.** Lopes, J. L. (UEL); Quinteiro, V. S. T. (UEL); Ito, V. Y. (UEL); Barbosa-Dekker, A. M. (UEL); Galhardi, L. C. F. (UEL); Linhares, R. E. C. (UEL); Orsato, A. (UEL)
- MED-025** **Synthesis and antibacterial activity of coumarin derivatives.** Fabris, M. (UEL); Batista, M. P. (UEL); Ribeiro, J. M. (UEL); Nakazato, G. (UEL); Bispo, M. L. F. (UEL)
- MED-026** **Computational studies of halolactone derivatives applied to Reverse transcriptase enzyme.** Molfetta, F. A. (UFPA); Costa, A. P. L. (UFPA); Gonçalves, E. C. (UFPA)
- MED-027** **Synthesis and promising antitumoral evaluation of 2-pyridinylhydrazone derivatives.** Pereira, G. E. (FIOCRUZ); Pinheiro, A. C. (FIOCRUZ); Costa, C. F. (FIOCRUZ); De Souza, M. V. N. (FIOCRUZ)
- MED-028** **In vivo evaluation of anti-Trypanosoma cruzi activity of 2-nitroimidazole derivatives.** Rezende, M. C. S. (UFRJ); Junior, P. A. S. (FIOCRUZ); Carvalho, A. S. (FIOCRUZ); Boechat, N. (FIOCRUZ)
- MED-029** **Docking-based comparative intermolecular contacts analysis (dbCICA) of the alpha4beta2 and alpha7 nicotinic acetylcholine receptors (nAChRs).** Batista, V. S. (IQAr-UNESP); Nascimento-Júnior, N. M. (IQAr-UNESP)
- MED-030** **NuBBE Database, a diverse source of natural products for drug design.** Saldívar-González, F. I. (UNAM); Valli, M. (IQAr-UNESP); Andricopulo, A. D. (IFSC-USP); Bolzani, V. S. (IQAr-UNESP); Medina-Franco, J. L. (UNAM)
- MED-031** **Molecular Docking Applied to the Development of New Leishmania spp. Metalloprotease Inhibitors.** Amaro, L. S. (UFRRJ); Cistia, C. N. D. (UFRRJ); Kümmerle, A. E. (UFRRJ); Sant'Anna, C. M. R. (UFRRJ)
- MED-032** **Novel glycosylated 1H-1,2,3-triazol alpha-glycosidase inhibitors with pharmacological potential as oral anti-hyperglycemic drugs.** Dantas, R. F. (FIOCRUZ); Rezende-Neto, J. M. (FIOCRUZ); Aguiar, T. L. C. (FIOCRUZ); Evangelista, T. C. S. (UFRJ); Donza, M. R. H. (UFRJ); Senger, M. R. (FIOCRUZ); Ferreira, S. B. (UFRJ); Kaiser, C. R. (UFRJ); Silva Jr., F. P. (FIOCRUZ)
- MED-033** **New quinoline derivatives with potential activity anti-P. falciparum.** Feitosa, L. M. (FIOCRUZ); Ferreira, M. L. G. (FIOCRUZ); Oliveira, L. G. (FIOCRUZ); Pinheiro, L. C. S. (FIOCRUZ); Boechat, N. (FIOCRUZ)
- MED-034** **BIS-CHALCONES SYNTHESIS AND EVALUATION OF ANTIFUNGAL ACTIVITY IN Trichophyton rubrum.** Ferreira, C. S. (UFS); Alves, P. B. (UFS); Souza, G. B. (UFS); Alviano, C. S. (UFRJ); Alviano, D. S. (UFRJ); Araújo, M. S. (UFAM); Costa, E. V. (UFAM)
- MED-035** **Modulatory effect of the essential oil of Psidium myrtiloides O. Berg (Araçá-roxo) on the inflammation in the Drosophila melanogaster eyes.** DIAS, R. F. C. (UFU); RODRIGUES, T. S. (UFU); SILVA, C. R. (UFU); AQUINO, F. J. T. (UFU); De Oliveira, Alberto (UFU); BARBOSA, F. H. (UFU); DIAS, F. M. F. (UVA); DANTZGER, D. R. C. (UNOESTE)
- MED-036** **Identification of New Potential acetylcholinesterase Inhibitors by Computational Medicinal Chemistry Techniques.** Lima de, L. R. (); Silva, L. B. (UNIFAP); Ferreira, E. F. B. (UNIFAP); Carvalho, A. de S. (UNIFAP); Lima de, L. R. (UFPA); Santos dos, C. B. R. (UNIFAP)
- MED-037** **Molecular Docking and Inhibition Studies of a-Amylase and Lipase Activities by Trans-Beta-Caryophyllene and Caryophyllene Oxide.** DANTZGER, D. R. C. (UNOESTE); DIAS, R. F. C. (UFU); JUSTINO, A. B. (UFU); DIAS, F. M. F. (UVA); ESPINDOLA, F. S. (UFU)
- MED-038** **Virtual screening and molecular modeling studies on the inhibition of the enzyme amyloid-beta alcohol dehydrogenase (ABAD).** Abreu, C. B. F. T. (IME); Almeida, J. S. F. D. (IME); França, T. C. C. (IME); Kuca, K. (UHK)
- MED-039** **Thermosensitive liposomes: a study of thermotropic phase transitions.** Maia, A. L. C. (UFMG); Silva, A. T. M. (UFMG); Giuberti, C. S. (UFES); Fernandes, C. (UFMG); Malachias, A. (UFMG); de Barros, A. L. B. (UFMG); Soares, D. C. F. (UNIFEI); Ramaldes, G. A. (UFMG)
- MED-040** **A new biphenyl 3-nitro-1,2,4-triazolic derivative is thousands-fold more potent and selective than the anti-Trypanosoma cruzi drug beznidazole.** Castelo-Branco, F. S. (FIOCRUZ); Menozzi, C. A. C. (FIOCRUZ); França, R. R. F. (FIOCRUZ); Baptista, M. S. (FIOCRUZ); Sales-Júnior, P. A. (FIOCRUZ); Murta, S. M. F. (FIOCRUZ); Romanha, A. J. (FIOCRUZ); Pinto, A. C. (UFRJ); Boechat, N. (FIOCRUZ)

- MED-041 Studies towards two novel Ni(II) thiosemicarbazone-based complexes: pharmacological properties and protein-ligand interactions assessment.** Polez, A. M. R. (IQAr-UNESP); Farias, R. L. (IQAr-UNESP); Silva, D. E. S. (IQAr-UNESP); Moreira, M. B. (IQAr-UNESP); Pereira, J. C. M. (IQAr-UNESP); Batista, V. S. (IQAr-UNESP); Reis, B. L. (IQAr-UNESP); Nascimento-Júnior, N. M. (IQAr-UNESP); Oliveira, A. B. (UFS); Ellena, J. A. (IFSC-USP); Mauro, A. E. (IQAr-UNESP); Netto, A. V. G. (IQAr-UNESP)
- MED-042 Nucleoside hydrolase from *Leishmania donovani* immobilized on magnetic particles: a new enzymatic activity assay approach.** Carvalho, M. D. P. (UFF); Casanova, L. M. (UFRJ); Tinoco, L. W. (UFRJ); de Moraes, M. C. (UFF)
- MED-043 Antibacterial activity of selenoquinolines against *Staphylococcus aureus*.** CHELESKI, J. (UNIOESTE); WIGGERS, H. J. (UNIOESTE); SANTOS, M. N. (UNIOESTE); MANARIN, F. G. (UNIOESTE); OLIVEIRA, I. M. (IQUSP); STEFANI, H. A. (IQUSP)
- MED-044 Molecular docking of antibacterial selenium-containing quinolines.** Moraes, L. A. F. (UNIOESTE); Wiggers, H. J. (UNIOESTE); Cheleski, J. (UNIOESTE); Manarin, F. (UNIOESTE)
- MED-045 Synthesis, cholinesterase inhibition and molecular modeling study of lophine-benzylamine hybrids.** Câmara, V. S. (UFRGS); Soares, A. J. (UFRGS); Ceschi, M. A. (UFRGS); Dantas, R. F. (FIOCRUZ); Silva-Jr, F. P. (FIOCRUZ); Senger, M. R. (FIOCRUZ); Salles, C. M. C. (UFRRJ); Guedes, I. A. (LNCC); Dardenne, L. E. (LNCC)
- MED-046 Design, synthesis and biological evaluation of Beta-lapachone and nor-Beta-lapachone complexes with 2-HP-Beta-CD as trypanocidal agents.** Nicoletti, C. D. (UFF); Galvão, R. M. dos S. (FIOCRUZ); Queiroz, M. de S. H. (UFF); Faria, A. F. M. (FIOCRUZ); Pauli, F. P. (UFF); Futuro, D. O. (UFF); Faria, R. X. (FIOCRUZ); Ferreira, V. F. (UFF)
- MED-047 N-(2-(4-benzylpiperazin-1-yl)ethyl)-1-phenyl-beta-carboline-3-carboxamide, a novel cholinesterase inhibitor selected by virtual screening.** Baréa, P. (UEM); de Oliveira, A. R. (UEM); Yamazaki, D. A. S. (UEM); da Costa, W. F. (UEM); Seixas, F. A. V. (UEM); Gauze, G. F. (UEM); Sarragiotti, M. H. (UEM)
- MED-048 Antiparasitic Activity of the *P. myrtiloides* O. Berg and Cytotoxic Effects the Caryophyllene Oxide and Trans-β-Caryophyllene Against HeLa.** Dias, F. M. F. (UVA); Dias, R. F. C. (UFU); Costa, M. S. (UFU); Dantzger, D. R. C. (UNIOESTE); Aquino, F. J. T. (UFU); Silva, C. V. (UFU)
- MED-049 Synthesis and Pharmacological evaluation of pomalidomide derivatives useful to treat sickle cell anemia.** Melo, T. R. F. (UNESP-FCFAR); Dulmovits, B. M. (Feinstein Institute for Medical Research); Fernandes, G. F. S. (UNESP-FCFAR); Souza, C. M. (UNICAMP); Lanaro, C. (UNICAMP); Chung, M. C. (UNESP-FCFAR); Blanc, L. (Feinstein Institute for Medical Research); Costa, F. F. (UNICAMP); Santos, J. L. (UNESP-FCFAR)
- MED-050 New hybrid trifluoromethylquinolines as antiplasmodium agents.** Silva, R. M. R. J. (UFRJ); Gandi, M. O. (UFRJ); Mendonça, J. S. (FIOCRUZ); Carvalho, A. S. (FIOCRUZ); Coutinho, J. P. (FIOCRUZ); Aguiar, A. C. C. (FIOCRUZ); Krettli, A. U. (FIOCRUZ); Boechat, N. (FIOCRUZ)
- MED-051 A multidimensional liquid chromatography method for monitoring on flow the activity of PNP-Mt immobilized enzyme.** Castro, A. C. (UFF); Moraes, M. C. (UFF)
- MED-052 Design, synthesis and trypanocidal activity of 5-nitroimidazolic analogues of benzimidazole.** Chagas, A. L. S. (FIOCRUZ); Santos, C. R. (FIOCRUZ); Junior, P. A. S. (FIOCRUZ); Carvalho, A. S. (FIOCRUZ); Boechat, N. (FIOCRUZ)
- MED-053 New antitumor prototypes developed as inhibitors of phosphatidylinositol-3-kinase (PI3K).** MELO, T. N. (UFRJ); MOITA, B. S. (UFRJ); AVELAR, J. L. S. (UFRJ); COSTA, C. M. X. (UFRJ); PORTO-CARREIRO, I. (UFRJ); GAMBA, L. E. R. (UFRJ); BARREIRO, E. J. (UFRJ); LIMA, L. M. (UFRJ)
- MED-054 Optimization of a protocol for the virtual screening of a series of small-molecules ligands of the tubulin colchicine binding site.** Palomino-Salcedo, D. L. (IFSC-USP); Magalhães, L. G. (IFSC-USP); Oliva, G. (IFSC-USP); Andricopulo, A. D. (IFSC-USP)
- MED-055 Quantitative structure-activity relationship models applied to structurally diverse chemotypes having anti-Trypanosoma cruzi activity.** De Souza, A. S. (IFSC-USP); Ferreira, L. L. G. (IFSC-USP); Andricopulo, A. D. (IFSC-USP)
- MED-056 Novel scaffolds that bind to *Leishmania major* Pteridine reductase 1 identified by fragment screening.** SILVA, S. G. (UFBA); FROES, T. Q. (UEFS); SILVA, C. S. (ICB-USP); CASTILHO, M. S. (UFBA)
- MED-057 Investigation of the antichagasic potential of new dimeric naphthoquinones derived from lawsone: synthesis, molecular modeling and structure-activity relationships.** Oliveira, A. S. (IFSC-USP); Llanes, L. C. (UC Davis); Souza, A. S. de (IFSC-USP); Brighente, I. M. C. (UFSC); Nunes, R. J. (UFSC); Andricopulo, A. D. (IFSC-USP)
- MED-058 Comparative protein modelling of trypanosomatid epigenetic targets.** Gomes, R. A. (FCF-USP); Polêto, M. D. (UFRGS); Verli, H. (UFRGS); Trossini, G. H. G. (FCF-USP)
- MED-059 In vitro behavior and cytotoxicity evaluation of amphiphilic lipopeptide PRW-(C18)2.** Nantes, I. L. (); Aguiar, A. M. (); Alves, W. A. (); Argüello, K. A. B. A. (UFABC)
- MED-060 New indole compounds as potential antimalarials.** Dias, B. K. M. (ICB-USP); Singh, M. K. (ICB-USP); Portella, D. P. (UEZO); Jordão, A. K. (UFRN); Garcia, C. R. S. (FCF-USP)

ORG – Química Orgânica

- OR-G001 Synthesis of a Schiff Base Compound with Potential Antioxidant and Anticorrosion Activity in Biodiesel.** Martins, L. F. (UFES); Silveira da, V. (UFES); Aquije, G. M. F. V. (IFES-Vila Velha); Romão, W. (IFES-Vila Velha); Santos dos, R. B. (UFES); Neto, A. C. (UFES); Lacerda Jr., V. (UFES)

- ORG-002 Enzymatic hydration of aliphatic and aromatic nitriles.** Moraes, M. I. (IQAr-UNESP); Iglesias, C. (UdelaR); Rodriguez, S. G. (UdelaR); Milagre, C. D. F. (IQAr-UNESP)
- ORG-003 Preparation of β -cyclodextrin thio-derivatives and synthesis of gold and silver nanoparticles.** Victor, M. M. (UFBA); Souza, V. C. (UFBA)
- ORG-004 [3,3]-Sigmatropic rearrangement of allylaryl ether followed by [3+2]-1,3-dipolar cycloaddition applied to the synthesis of liquid crystals.** Fritsch, L. (UFRGS); Mandle, R. J. (University of York); Merlo, A. A. (UFRGS)
- ORG-005 Synthesis of naphthoquinoid compounds with antitumor activities and higher trypanocidal potential.** Almeida, R. G. (UFMG); Valença, W. O. (UFMG); Carvalho, R. L. (UFMG); Carvalho, G. C. (UFC); Pessoa, C. O. (UFC); Silva, E. N. (UFMG)
- ORG-006 Dynamic kinetic resolution chemoenzymatic of aromatic sec-alcohols by using a heterogeneous vanadium racemization catalyst and lipase.** Almeida, L. A. (IQAr-UNESP); Marcondes, T. H. (IQAr-UNESP); Milagre, H. M. S. (IQAr-UNESP)
- ORG-007 Functionalization of substituted quinoxaline with TMPLI in the presence of ZnCl₂.** Catricala-Fernades, V. H. (FFCLRP-USP); Ferreira, S. R. A. (FCFRP-USP); Clososki, G. C. (FCFRP-USP)
- ORG-008 Synthesis of new 3-((1H-tetrazol-5-yl)thio)-1-indoles against the ESKAPE pathogens.** Silva, E. E. (UFRGS); Viana, D. D. (UFRGS); Silveira, G. P. (UFRGS)
- ORG-009 Total and partial oxidation of agarose using TEMPO/TCCA.** Heuko, J. G. (UFPR); Nosedá, M. E. D. (UFPR); Gonçalves, A. G. (UFPR); Nosedá, M. D. (UFPR); Ducatti, D. R. B. (UFPR)
- ORG-010 Chalcones Cyclopropanation by Corey-Chaykovsky reaction.** Álvaro, N. S. (IFRJ-Campus Rio de Janeiro); Cotrim, B. A. (IFRJ-Campus Rio de Janeiro); Vieira, D. P. P. (IFRJ-Campus Rio de Janeiro)
- ORG-011 One-pot green synthesis of isoxazol-5(4H)-one derivatives using Organocatalyst of Ionic Liquids in water.** Ramos, L. M. (UEG); Oliveira, G. H. C. (UEG); Paiva, R. K. C. (UEG); Neto, B. A. D. (UnB)
- ORG-012 Enantioselective Synthesis of alfa-Aryl Tetralones (1-Carba-isoflavanones).** Gaspar, F. V. (UFRJ); Souza, L. G. (UFRJ); Domingos, J. L. O. (UERJ); Costa, P. R. R. (UFRJ)
- ORG-013 Synthesis of β -nitro alcohol using hydrolases free or immobilized on MWCNTs.** Durigon, M. C. S. (UTFPR); Krieger, N. (UFPR); Couto, G. H. (UTFPR); Pilissão, C. (UTFPR)
- ORG-014 Synthesis of Hybrid Xanthene-Dihydropyridines via Huisgen Reaction under Cu (I) catalysis.** Santos, S. J. (UFRGS); Souza, V. P. (UFRGS); Fontoura, L. A. M. (ULBRA); Russowsky, D. (UFRGS)
- ORG-015 Synthesis of dipyrromethanes in water and their application in the synthesis of dipyrins and their cobalt(III), nickel(II) complexes.** ROMANHI, P. (UFF); ALMEIDA, T. (UFF); PROENÇA, G. S. (UFF); OLIVEIRA, C. J. (UFF); MACHADO, L. A. (UFF); PEDROSA, L. F. (UFF)
- ORG-016 Aplicação de Nova Metodologia Sintética para a Guanilação de Tioureias.** Santos dos, G. P. (UEG-CCET); Costa, M. B. (UEG-CCET); Carvalho, E. G. B. (UEG-CCET)
- ORG-017 Bio-catalytic asymmetric reduction of difficult-to-reduce ketones by carrots.** Machado, N. (UFABC); Omori, A. T. (UFABC)
- ORG-018 Synthesis of bioactive 6H-benzo[c]chromenes triazoles.** da Silva, V. D. (PUC-RIO); Buarque, C. D. (PUC-RIO)
- ORG-019 Synthesis and evaluation of non-clinical of a new chalcone (2E,4E)-1-(2-hydroxy-3,4,6-trimethoxyphenyl)-5-phenylpenta-2,4-dien-1-one.** Silva da, P. T. (UVA); Aaraújo de, J. I. F. (UECE); Xavier, J. C. (URCA); Teixeira, A. M. R. (URCA); Magalhães, F. E. A. (UECE); Teixeira, E. H. (UFC); Bandeira, P. N. (UVA); Santos, H. S. (UVA)
- ORG-020 Synthesis of Lawsone derivatives using ionic liquid.** Santos, A. R. (UEG-CCET); Ramos, L. M. (UEG-CCET); Santos, J. R. N. (UEG-CCET); Morais, J. G. (UEG-CCET)
- ORG-021 Otimização da síntese, separação enantiomérica e determinação da configuração de enantiômeros de acridinona com atividade anticâncer.** Da Fonseca, M. B. (UFRRJ); Magalhães, L. G. (IFSC-USP); Gomes, R. C. (UNICAMP); Coelho, F. A. S. (UNICAMP); Andricopulo, A. D. (IFSC-USP); Graebin, C. S. (UFRRJ)
- ORG-022 Síntese de novos derivados da piperidona com potencial atividade anticâncer.** Paulino, R. P. (UFMG); Alves, R. B. (UFMG); Freitas de, R. P. (UFMG)
- ORG-023 Regioselective C4-Ethoxylation of 2,4-dichloroquinoline.** Vontobel, P. H. V. (UFRGS); Fuscaldó, R. S. (UFRGS); Santos dos, F. P. (UFRGS); Costa da, J. S. (UFRGS)
- ORG-024 Synthesis of Cyclic Nitroxides With Properties of Biological Activity.** Jordão, A. K. (UFRN); Santos, J. E. S. (UEZO)
- ORG-025 Synthesis of ethy 6-amino-5-cyano-2-methyl-4-phenyl-4H-pyran-3-carboxylate catalyzed by polyethyleneimine supported in ionic liquid.** Santos, J. R. N. (UEG-CCET); Ramos, L. M. (UEG-CCET); Morais, J. G. (UEG-CCET); Santos, A. R. (UEG-CCET)
- ORG-026 Desymmetrization of diols mediated by iodobenzene dichloride as key step in the synthesis of Pulmonarin A derivatives.** MARTO, V. V. (UFV); PINTO, B. N. S. (UFV); DEMUNER, A. J. (UFV); CARNEIRO, V. M. T. (UFV)
- ORG-027 Povarov reaction in naphthoquinones: computational support for a novel route for quinoline-naphthoquinones.** Fiorot, R. G. (IFRJ-Campus Realengo); Lemos, B. C. (UFES); Greco, S. J. (UFES); Carneiro, J. W. de M. (UFF)
- ORG-028 Synthesis of conjugated coumarin-benzimidazole hybrids using a new ionic liquid catalyst.** Morais, J. G. (UEG-CCET); Ramos, L. M. (UEG-CCET); Santos, J. R. N. (UEG-CCET); Santos, A. R. (UEG-CCET)

- ORG-029 Towards the multi-step flow synthesis of the URAT1 inhibitor Lesinurad.** Frojuello, M. (UNICAMP); Marçon, H. M. (UNICAMP); Pastre, J. C. (UNICAMP)
- ORG-030 Recent Findings on Cyclopropanation of Activated Olefins.** Batista, G. M. F. (UFJF); Castro de, P. P. (UFJF); Carpanez, A. G. (UFJF); Amarante, G. W. (UFJF)
- ORG-031 Investigation of mechanistic aspects of the nucleophilic substitution reaction of azide in benzodiazepines derivatives.** Evangelista, T. C. S. (UFRJ); Addla, D. (UFRJ); Da Silva, T. L. (UFRJ); Kaiser, C. R. (UFRJ); Ferreira, S. B. (UFRJ)
- ORG-032 Luehea candicans increase in vitro cell cancer metabolism even with high polyphenols content.** Carneiro, F. J. C. (IFMA); camara, M. B. P. (IFMA); Rabelo, A. C. S. (FMVZ-USP); Cantanhede Filho, A. J. (IFMA); Miglino, M. A. (FMVZ-USP); Barreto, R. S. N. (FMVZ-USP); Borghesi, J. (FMVZ-USP)
- ORG-033 Síntese de conjugados isatina-naftoquinona com potencial atividade biológica.** Boechat, V. B. (UFRJ); Silva, B. V. (UFRJ); Martinez, S. T. (UFBA)
- ORG-034 (Bio)Electrochemical reduction of acetophenone: A viable alternative to the production of the corresponding alcohol.** Pinheiro, E. B. (UFSC); Brondani, P. B. (UFSC); Zapp, E. (UFSC)
- ORG-035 Short-chain alcohols as potential systems to capture CO₂: DFT simulation.** Correia, G. R. B. (IFRJ-Campus Realengo); Fiorot, R. G. (IFRJ-Campus Realengo); Carneiro, J. W. M. (UFF)
- ORG-036 Use of Tribromoisocyanuric Acid / Triphenylphosphine System for the Conversion of Aldoximes to Nitriles under Appel Conditions.** Boaventura, T. M. (UFRJ); de Andrade, V. S. C. (UFRJ); de Mattos, M. C. S. (UFRJ)
- ORG-037 Synthesis of new 4-(phenilamino)quinoline-3-carbonitriles Derivatives as Potential Inhibitors of HIV-1 Reverse Transcriptase.** ABREU, B. F. (IFRJ - Campus Nilópolis); VERGNANO, G. S. (IFRJ - Campus Nilópolis); BERNARDINO, A. M. R. (UFF); BORGES, J. C. (IFRJ - Campus Nilópolis)
- ORG-038 A benzocrown ether aldehyde-based fluorogenic supramolecular device for sensing cysteine, bisulfite and potassium ion.** Souto, F. T. (UFSC); Machado, V. G. (UFSC)
- ORG-039 Synthesis of 1,2,3-Triazole Derivatives of 4,4'-Dihydroxybenzophenone and Evaluation of Their Elastase Inhibitory.** Dias, M. C. F. (UFMG); Sousa, B. L. de (UFV); Gularte, T. Q. (UFV); Teixeira, R. R. (UFV); Santos, J. A. N. (IFSULDEMINAS); Mendes, T. A. O. (UFV); Pilau, E. J. (UEM); Demuner, A. J. (UFV); Santos, M. H. dos (UFV)
- ORG-040 Synthesis and cytotoxicity evaluation of trifluoromethyl aryl diamides.** Rodrigues, M. P. (UFV); Teixeira, R. R. (UFV); Siqueira, R. P. (UFV); Bressan, G. C. (UFV)
- ORG-041 Synthesis and photophysical characterization of benzoxaborole derivatives.** Fuscald, R. S. (UFRGS); Vontobel, P. H. V. (UFRGS); Boeira, E. O. (UFRGS); da Luz, L. C. (UFRGS); Moro, A. V. (UFRGS); Rodembusch, F. S. (UFRGS); da Costa, J. S. (UFRGS); Santos, F. S. (UFRGS)
- ORG-042 Synthesis and evaluation of the antitumoral activity of new derivatives from Digoxin and Digitoxin.** Vieira Machado, M. V. M. (UFSJ); Lúcia Grego Alves, S. L. G. A. (UFSJ); Capanema de Oliveira, G. C. de O. (UFSJ); Carvalho Rocha, S. C. R. (UFSJ); Augusto de Oliveira Barbosa, L. A. de O. B. (UFSJ); Augusto Ferreira Perez Villar, J. A. F. P. V. (UFSJ)
- ORG-043 Polarized ketenedithioacetals as substrates to imidazolidine synthesis.** Almeida, C. M. (UFF); Machado, F. P. (UFF); Gonçalves, E. K. S. (UFF); Cardoso, E. R. (UFF); Sangi, D. P. (UFF)
- ORG-044 Synthesis and evaluation of antiparasitic and cytotoxic activities of thymol and carvacrol derivatives.** Silva, A. M. (IFC-Campus Araquari); Borba, E. S. (IFC-Campus Araquari); Santos, I. M. (IFC-Campus Araquari); Gazolla, P. A. R. (UFV); Teixeira, R. R. (UFV); Lago, J. H. G. (UFABC); Silva, T. C. (UFABC)
- ORG-045 Diastereoselective Total Synthesis of Raputindole A: An Iridium-catalyzed approach.** Regueira, J. L. L. F. (IQUSP); Pilli, R. A. (IQ-UNICAMP); Silva, L. F. Jr. (IQUSP)
- ORG-046 Strategic approach for the highly regioselective synthesis of trifluoromethylated 4-(iminomethyl/formyl)isoxazoles by cyclocondensation.** Pianoski, K. E. (UEM); Rosa, F. A. (UEM)
- ORG-047 Multicomponent reactions towards synthesis of pyrroles fused to chromene ring.** Moraes, A. M. (UFSJ); Alves, S. L. G. (UFSJ); Silva, S. C. (UFSJ); Villar, J. A. F. P. (UFSJ)
- ORG-048 Design and synthesis of new antimicrobial compounds based on morpholine pharmacophore group.** Assis, A. A. (UFSJ); Santos, F. R. S. (UFSJ); Andrade, J. T. (UFSJ); Ferreira, J. M. S. (UFSJ); Villar, J. A. F. P. (UFSJ)
- ORG-049 Synthesis and study of the antinociceptive and anti-inflammatory activity of amides derived from NSAIDs and their derived S-Nitrosothiols.** Santos, D. C. (UNIFESP-Diadema); Monteiro, H. P. (UNIFESP/EPM); Reis, A. K. C. A. (UNIFESP-Diadema)
- ORG-050 Synthesis of novel molecular hybrids of isocoumarins and 1,2,3-triazoles.** Santos, L. S. (UFMG); de Freitas, R. P. (UFMG); Alves, R. B. (UFMG)
- ORG-051 Asymmetric Transfer Hydrogenation of Ketones through Dynamic Kinetic Resolution: Synthesis of Homoisoflavanones.** Brum, J. O. C. (IME); Caleffi, G. S. (IPPN-UFRJ); Costa, A. T. (IPPN-UFRJ); França, T. C. C. (IME); Domingos, J. L. O. (UERJ); Costa, P. R. R. (IPPN-UFRJ)
- ORG-052 Síntese de derivados imidazólicos 2-substituídos da beta-lapachona.** Silva, L. A. (Colégio Estadual Missionário Mário Way); Ferreira, A. B. B. (UFRRJ); Silva, A. M. (UFRJ); Silva, L. S. (UFRRJ)
- ORG-053 Non-symmetrical bent-core liquid crystals containing isoxazole and isoxazoline ring.** Weber, C. S. B. (UFRGS); Merlo, A. A. (UFRGS)

- ORG-054 Synthesis and herbicidal activity of flavylum salts.** Costa, T. S. (UFV); Pinto, B. N. S. (UFV); Lopes, F. C. (UFV); Alvarenga, E. S. (UFV); Carneiro, V. M. T. (UFV)
- ORG-055 New chiral mesogens presenting high Helical Twisting Power.** Fritsch, L. (UFRGS); Merlo, A. A. (UFRGS); Mandel, R. J. (University of York)
- ORG-056 Nuclear Magnetic Resonance for Reaction Monitoring.** Dutra, L. A. (UNICAMP); Couto, U. R. (UNICAMP); Tormena, C. F. (UNICAMP)
- ORG-057 Structural modifications on functionalized dienes leading to potencial agents for the treatment of Alzheimer's Disease.** Sá, N. B. (UFSC); Ferrari, A. C. (UFSC); de Oliveira, A. S. (UFSC); Meier, L. (UFSC)
- ORG-058 Síntese de novos acilonucleosídeos fosfonatos quinolônicos, ANPs, possíveis compostos anti-ZIKV.** Faro, L. V. (UFF); Alves, G. C. V. (UFF); Gomes, R. S. P. (UFF); Gomes, M. W. L. (UFF); Barros, C. S. (UFF); Souza, M. C. (UFF); Boechat, F. C. S. (UFF); Paixão, I. C. N. P. (UFF); Souza, M. C. B. V. (UFF)
- ORG-059 CAT-alyt-free conjugated addition of indolizines to in situ generated oxidized Morita-Baylis-Hillman adducts.** Silva, T. S. (UNICAMP); Zeoly, L. A. (UNICAMP); Coelho, F. A. S. (UNICAMP)
- ORG-060 Synthesis of new fluorescent indolizines.** Arroio, T. R. (FCFRP-USP); Bertallo, C. R. S. (FCFRP-USP); Clososki, G. C. (FCFRP-USP); Naal, R. M. Z. G. (FCFRP-USP); Naal, Z. (FCFRP-USP); Deliberto, L. A. (FCFRP-USP)
- ORG-061 Bio-diesel Production via Transesterification of Soybean Oil Catalyzed by Metformin Functionalized Magnetic Nanoparticles.** Campedelli, R. R. (UFSC); Keller, M. H. (UFSC); Souza, B. S. (UFSC)
- ORG-062 Síntese de novos derivados triazólicos com potencial atividade antifúngica.** da Silva, C. M. (UFMG); Silva, L. P. (UFMG); Faria, M. I. C. (UFMG)
- ORG-063 Heterogeneous catalytic hydrogenation of cafestol-kahweol mixture obtained from green coffee beans.** Lima, F. A. (UFRJ); Souza, R. O. M. A. (UFRJ); Silva de, F. C. (UFF); Rezende, C. M. (UFRJ)
- ORG-064 Synthesis of liquid crystals precursors containing the isoxazole core.** Pavan, L. P. (UFRGS); Lopes, L. D. (UFRGS); Merlo, A. A. (UFRGS)
- ORG-065 Synthesis of Novel Polyfunctionalized Organoselenides Employing a Seleno-Containing Cyanohydrin as Starting Material.** Thomas, J. C. (UFPR); de Oliveira, A. R. M. (UFPR); Piovani, L. (UFPR)
- ORG-066 Synthetic Study toward a new hybrid with potential antimalarial activity.** Perez, C. C. (UEL); Orsato, A. (UEL); Benati, F. R. (UEL)
- ORG-067 The Dimroth rearrangement in synthesis of 1H-1,2,3-triazole and 2H-1,2,3-triazole derivatives.** Silva, T. B. (UFF); Ji, K. N. K. (UFF); Forezi, L. S. M. (UFF); Campos, V. R. (UFF); Silva, F. C. (UFF); Ferreira, V. F. (UFF)
- ORG-068 Explorando a Reatividade do Radical Carbamoila Para Criação da Primeira Rota Sintética das Coixespirolactamas A e B.** Nascimento, V. R. (IQUSP); Andrade, L. H. (IQUSP)
- ORG-069 Artificial hydrolase based on functionalized commercial polymer and cationic surfactant for degradation of organophosphate.** Leopoldino, E. C. (UFSC); Michel, A. R. (UFSC); Gerola, A. P. (UFSC); Souza, B. S. (UFSC)
- ORG-070 Bent-shaped liquid crystals derived from (1E,4E)-1,5-bis(4-hydroxyphenyl)penta-1,4-dien-3-one core.** Gomes, M. J. C. G. (UTFPR); Westphal, E. W. (UTFPR)
- ORG-071 Green synthesis of 2,3-diphenylquinoxalines.** Bustamante, L. (ULBRA); Oliveira, D. M. de (ULBRA); Fontoura, L. A. M. (ULBRA); Russowsky, D. (UFRGS)
- ORG-072 A 8-step approach towards the synthesis of 3-Hydroxykynurenine.** Santos, T. (FCFRP-USP); Murie, V. E. (FCFRP-USP); Clososki, G. C. (FCFRP-USP)
- ORG-073 Synthesis and photophysics of differently substituted 2,5-diaryl selenophenes.** de Salles, H. D. (UFRGS); Paixão, D. B. (UFRGS); Coelho, F. L. (UFRGS); Rampon, D. S. (UFPR); Schneider, P. H. (UFRGS)
- ORG-074 Direct C-H Photocatalyzed Arylation of Diazines with Aryldiazonium Salts.** Silva, R. C. (UFSCar); Brocksom, T. J. (UFSCar); de Oliveira, K. T. (UFSCar)
- ORG-075 Synthesis of L-cysteine-derived arylamides and their S-nitrosothiols as potential protease inhibitors.** Serralbo, A. S. (UNIFESP-Diadema); Silva, G. M. (UNIFESP-Diadema); Longo Jr., L. S. (UNIFESP-Diadema); Reis, A. K. C. A. (UNIFESP-Diadema)
- ORG-076 Estudo preliminar de membranas de poliuretano com sílica a partir de biomassa.** Saciloto, V. G. (UNISUL); Valezan, I. F. (UNISUL); Enzirio, M. J. (UNISUL); Magnago, R. F. (UNISUL)
- ORG-077 Fabrication of Lignocellulose-Based Microreactors: Copper- Functionalized Bamboo for Continuous-Flow CuAAC Click Reactions.** Ginoble Pandoli, O. (PUC-RIO); De Sá, D. S. (PUC-RIO); Bustamante, R. A. (PUC-RIO); Rocha, C. E. R. (PUC-RIO); Rodrigues, E. J. R. (PUC-RIO); Buarque, C. D. (PUC-RIO); Ghavami, K. (PUC-RIO); Massi, A. (FAMA)
- ORG-078 Synthesis and Characterization of new PMDI derivative.** Tomasi, C. (UFSC); Preve, N. (UFSC); S. da Silva, S. (UFSC); Costa, G. (UFSC); Chepluki, A. (UFSC); Galetto, F. (UFSC); Saba, S. (UFSC); Pelisser, F. (UFSC); Rafique, J. (UFMS); Braga, H. C. (UNIFESP-Campus Baixada Santista); Grillo, F. (IFES-Campus Itapina); Ely, F. (CTI Renato Archer); de A. Amaral, P. (UNESC); A. Vieira, A. (UFBA); E. A. Frizon, T. (UFSC)
- ORG-079 Development of a comprehensive study on base-controlled regioselective functionalization and C-H borylation of indolizines.** Rodrigues de Souza Bertallo, C. B. (FCFRP-USP); Rodrigues Arroio, T. R. A. (FCFRP-USP); Clososki, G. C. C. (FCFRP-USP)

- ORG-080 Exploring the interface organic synthesis/medicinal chemistry in the search of novel antineoplastic quinazolines and quinolines.** Dos Santos, T. (FCFRP-USP); Murie, V. E. (FCFRP-USP); Nishimura, R. H. V. (FCFRP-USP); Clososki, G. C. (FCFRP-USP)
- ORG-081 Síntese e atividade anti-Trypanossoma Cruzi de novos N,S-acetais derivados da juglona.** Pacheco, P. A. F. (UFF); Ribeiro, T. M. (UFF); Faria, R. X. (FIOCRUZ); da Rocha, D. R. (UFF)
- ORG-082 Synthesis of novel aromatic selenocyanates and evaluation of their effect in cultured mouse neurons submitted to oxidative stress.** da Silva, S. S. (UFSC); Saba, S. (UFSC); Rafique, J. (UFMS); Cararo, J. H. (UNESC); Michels, M. (UNESC); Sonai, B. (UNESC); Abatti, M. (UNESC); Braga, H. C. (UNIFESP-SJC); Dal-Pont, G. C. (UNESC); Amaral, P. de A. (UNESC); Eli, F. (CTI Renato Archer); Dal-Pizzol, F. (UNESC); Valvassori, S. S. (UNESC); Frizon, T. E. A. (UFSC)
- ORG-083 Thiol oxidation using selenium functionalized magnetic nanoparticles (MNP-Se).** Pinheiro, G. (UFSC); Campedelli, R. R. (UFSC); Farra, M. D. (UFSC); Rohers, J. A. (IFSul); Affeldt, R. F. (UFSC); Souza, B. S. (UFSC)
- ORG-084 Synthesis and characterization of new 2,1,3-benzoxadiazole derivative.** COSTA, G. C. C (UFSC); DA SILVA, S. S. S (UFSC); CHEPLUKI, A. A. C. (UFSC); PREVE, N. P. (UFSC); TOMASI, C. T. (UFSC); PELISSER, F. P. (UFSC); GALETTO, F. Z. G. (UFSC); PICH, C. P. (UFSC); SABA, S. S. (UFSC); RAFIQUE, J. R. (UFMS); BRAGA, H. C. B. (UNIFESP-SJC); NUNES, F. N. (UFBA); VIEIRA, A. A. V. (UFBA); GRILLO, F. G. (IFES-Campus São Mateus); FRIZON, T. E. A. F. (UFSC)
- ORG-085 Synthesis of naphthyridines with potential tubulin inhibitory activity.** Donolato, B. M. (UNICAMP); Lima, S. R. (UNICAMP); Coelho, F. A. S. (UNICAMP)
- ORG-086 Synthesis and application of quinoline derivatives as corrosion inhibitors in stainless steel AISI 430 in acidic medium.** Santos dos, G. C. (); Silva-Filho da, L. C. (); Moreno, V. F. (UNESP-Bauru)
- ORG-087 Unraveling the reactivity of imidazole towards organo(thio)phosphates: N-alkylation vs N-phosphorylation.** Silva, V. B. (UFPR); Orth, E. S. (UFPR)
- ORG-088 A new approach for the synthesis of alpha-alkylidene-gamma-butyrolactones, mediated by an halonium ion.** de Oliveira, A. S. B. (UNICAMP); Zeoly, L. A. (UNICAMP); Coelho, F. (UNICAMP)
- ORG-089 Synthesis and characterization of tetraaryl-1,4-dihydropyrrolo[3,2-b]pyrroles derivatives for potential application in solar cells.** Augusto, L. C. (UNESP-Bauru); Santos, G. C. (UNESP-Bauru); Martins, L. M. (UNESP-Bauru); Bregadioli, B. A. (UNESP-Bauru); Oshiro, P. B. (UNESP-Bauru); Silva-Filho, L. C. (UNESP-Bauru)
- ORG-090 Síntese e avaliação de atividade anticâncer de novos análogos 4-oxoquinolínicos de acilonucleosídeos fosfonatos (ANPs).** Faro, L. V. (UFF); Silva, R. H. S. (UFF); Mello, A. L. N. (UFRJ); Imbroisi Filho, R. (UFF); Souza, M. C. (UFF); Boechat, F. C. S. (UFF); Sola-Penna, M. (UFRJ); Zancan, P. (UFRJ); Souza, M. C. B. V. (UFF)
- ORG-091 Bio-degradation of chloramphenicol by endophytic fungi isolated from Bertholletia excelsa (Brazil nuts).** Holanda, F. H. (UNIFAP); Cardoso, E. R. S. (UNIFAP); Birolli, W. G. (UFSCar); Morais, E. S. (UNIFAP); Sena, I. S. (UNIFAP); Ferreira, A. M. (UNIFAP); Solon, L. G. S. (UNIFAP); Ferreira, I. M. (UNIFAP)
- ORG-092 Study of semiochemicals from tomatoes cultivated in Catalão - GO.** FALEIROS-SANTOS, M. H (UFG-Catalão); SILVA, J. S (UFG-Catalão); GUERRA, M. B. B (UFLA); SARRIA, A. L. F (Green Universe Agriculture); SEVERINO, R. P (UFG-Catalão)
- ORG-093 Synthesis of novel kinetin derivatives containing a 1,2,3-triazole moiety.** Torres, N. M. P. O. (UFMG); Freitas, R. P (UFMG); Alves, R. B. (UFMG)
- ORG-094 Enzymatic synthesis of fatty acid amide from Bertholletia excelsa (Brazil nut) oil and its anti-inflammatory activity.** Barata, P. H da S. (UNIFAP); Carvalho, H. L. (UNIFAP); Sarquis, I. R. (UNIFAP); Carvalho, H. de O. (UNIFAP); Barros, A. S. (UNIFAP); Jimenez, D. E. Q. (UNIFAP); Carvalho, J. C. T. de (UNIFAP); Ferreira, I. M. (UNIFAP)
- ORG-095 Synthesis of resveratrol's derivatives and their DNA interaction studies.** Ferreira, B. B. (UDESC); da Silva, M. S. (UDESC); Mendes, S. R. (UDESC)
- ORG-096 Síntese e Avaliação da Atividade Antitumoral de Calcogenoaminas.** Puccinelli, T. (UFPR); Neto, A. M. M (UFPR); Lima, A. A. V. (UFPR); Retamiro, K. M. (UEM); Garcia, F. P (UEM); Nakamura, C. V. (UEM); Oliveira, A. R. M (UFPR); Piovan, L. (UFPR)
- ORG-097 New methodologies for the catalytic asymmetric insertion of Sulfoxonium Ylides into N-H bonds.** Furniel, L. G. (IQSC-USP); Burtoloso, A. C. B. (IQSC-USP)
- ORG-098 Green Synthesis of Oxazinanones: Intramolecular Cyclization of Amino Acid-Derived Diazoketones Using a Silica-Supported HClO4 Catalyst.** Campovilla, O. C. Jr. (IQSC-USP); Gallo, R. D. C. (IQSC-USP); Ahmad, A. (IQSC-USP); Burtoloso, A. C. B. (IQSC-USP)
- ORG-099 Amino-modified Merrifield resin as heterogeneous catalyst for diazo transfer reactions to 1,3-dicarbonyl compounds.** Fantinel, M. (UFSC); Sá, M. M. (UFSC)
- ORG-100 Síntese de novas amidas através da condensação da 8-aminoquinolina e ácidos cinâmicos substituídos.** Brito, M. R. (UFRRJ); Echevarria, A. (UFRRJ); Rodrigues-Santos, C. E. (UFRRJ)
- ORG-101 Síntese de novos derivados benzimidazólicos com potenciais Atividades Antileishmania.** Pinto, R. L. (UFRRJ); Brito, M. R. (UFRRJ); Echevarria, A. (UFRRJ); Rodrigues-Santos, C. E. (UFRRJ)
- ORG-102 Síntese e avaliação antifúngica de novos derivados de succinimidas policíclicas N-substituídas via reação de Diels-Alder.** Bragueroli, H. S. (IFRJ - Campus Nilópolis); Marçal, L. L. (IFRJ - Campus Nilópolis)
- ORG-103 Mechanochemical synthesis of 2-amino-1,4-naphthoquinones.** Sande, I. (UFBA); Nascimento, T. S. (UFBA); Martinez, S. (UFBA); Cunha, S. (UFBA)

- ORG-104** Imidoyl-substituted sulfoxonium ylides as metal-carbene precursors in C-H functionalization reactions for the synthesis of indoles. Caiuby, C. A. D. (IQSC-USP); Burtoloso, A. C. B. (IQSC-USP)
- ORG-105** A new strategy for the synthesis of non-symmetrical naphthoquinones and their cytotoxic effect over PC3 prostate cancer cells. Ribeiro, R. C. B. (UFF); Freitas, P. P. (UFF); Moreira, C. S. (UFF); Moraes, M. G. (UFF); da Silva, F. C. (UFF); Rocha, D. R. (UFF); Gimba, E. R. P. (UFF); Ferreira, V. F. (UFF)
- ORG-106** Vinyl-1,2,4-oxadiazoles Behave as Nucleophilic Partners in Morita–Baylis–Hillman Reactions. FERNANDES, F. S. (UNICAMP); Rodrigues, JR, M. T. (UNICAMP); Zeoly, L. A. (UNICAMP); Conti, C. (UNICAMP); Angiolino, C. F. F. (UNICAMP); Eberlin, M. N. (UNICAMP); Coelho, F. (UNICAMP)
- ORG-107** Eletrossíntese de selenetos de diorganoila. Meirinho, A. G. (UDESC); Pereira, V. F. (UDESC); Guilherme, M. M. (UFMSM); Mendes, S. R. (UDESC)
- ORG-108** Funcionalização eletroquímica da ligação C-H e selenação da posição α dos 2-naftóis via catalisadores iônicos de iodo. Pereira, V. F. (UDESC)
- ORG-109** SÍNTESE DE BISINDOLILMETANOS CATALISADA POR [NMPH]CH₃SO₃. Mendes, S. R. (UDESC); Vailati, A. L. (UDESC); Gariani, R. A. (UDESC); Xavier, F. R. (UDESC)
- ORG-110** Serum biomarker discovery for theileriosis diagnosis based on chemometric approaches using Nano-LC-ESI targeted proteomics data. De Pontes, L. G. (IQSC-USP); Galan, A. (UB); Bilić, P. N. (UB); Kuleš, J. (UB); Guillemín, N. (UB); Horvatić, A. (UB); Carneiro, R. L. (UFSCar); Mrljak, V. (UB); Eckersall, P. D. (University of Strathclyde - Glasgow); Ferreira Jr, R. S. (IBB-UNESP); Barraviera, B. (IBB-UNESP); Dos Santos, L. D. (IBB-UNESP)
- ORG-111** Sulfa-Michael Additions and Intramolecular Insertion Reactions of α,β -Unsaturated β -Ketosulfoxonium Ylides. Mizobuchi, E. F. (IQSC-USP); Burtoloso, A. C. B. (IQSC-USP)
- ORG-112** Synthesis of Oxoquinoline Ribonucleosides as Potential Inhibitors of Purine Nucleoside Phosphorylases. da Silva, R. C. (UFF); de Oliveira, J. E. F. (UFF); de Souza, M. C. B. V. (UFF); de Moraes, M. C. (UFF); Boechat, F. C. S. (UFF)
- ORG-113** Amino Acid-Derived 1,2,3-Triazoles: Development of a Fluorescent Sensor in Solution for Enantioselective Sensing and BSA Interaction. Debia, N. P. (UFRGS); Saraiva, M. T. (UFPEL); Martins, B. S. (UFRGS); Beal, R. (UFRGS); Gonçalves, P. F. B. (UFRGS); Rodembusch, F. S. (UFRGS); Alves, D. (UFPEL); Lütke, D. S. (UFRGS)
- ORG-114** A practical iodination of BODIPY fluorophores using iodine and iodic acid. Machado, L. A. (UFF); Martins, L. R. (UFF); Romanhi, P. (UFF); Proença, G. S. (UFF); Oliveira, C. J. de (UFF); Pedrosa, L. F. (UFF)
- ORG-115** SÍNTESE DE ADUTOS DE MICHAEL CATALISADA POR [NMPH]CH₃SO₃. Caño, L. M. (UDESC); Vailati, A. L. (UDESC); Mendes, S. R. (UDESC); Wodtke, F. (UDESC); Gariani, R. A. (UDESC); Xavier, F. R. (UDESC)
- ORG-116** Mechanistic Study of Benzyl Alcohols Oxidation to Benzaldehydes by Trichloroisocyanuric Acid (TCCA). SANTOS, C. V. P. (UFRJ); MATTOS, M. C. S. (UFRJ)
- ORG-117** BIO--based spirosuccinimides from itaconic anhydride: A novel synthetic application of renewable carbons for important biological targets. Hornink, M. M. (IQUSP); Lopes, A. U. (IQUSP); Andrade, L. H. (IQUSP)
- ORG-118** Atividade antipriônica de novos conjugados 4-quinolona/1,4-benzoquinona. COSTA, A. R. P. (UFF); SOUZA, M. C. B. V. (UFF); GONÇALVES, T. C. R. (UFRJ); SILVA, J. L. (UFRJ); BATALHA, P. N. (UFF); MORAES, M. C. (UFF); BOECHAT, F. C. S. (UFF)
- ORG-119** Síntese de Novos Conjugados Quinonoquinolônicos Contendo Ponte Aminica com Perfil de Atividade Antitumoral. SOUZA, A. G. (UFF); SAGRILLO, F. S. (UFF); OLIVEIRA, V. G. (UFF); BATALHA, P. N. (UFF); BOECHAT, F. C. S. (UFF); SOUZA, M. C. B. V. (UFF)
- ORG-120** Synthesis of N-triazolyl-4-oxoquinoline derivatives as potential antitumor agents. Tolentino, N. M. C. (UFF); Vale, T. M. (UFF); Ferreira, J. H. (UFF); Ferraz, R. C. (UFF); Bathalha, P. N. (UFF); Souza, M. C. B. V. (UFF); Boechat, F. C. S. (UFF)
- ORG-121** Síntese de β -hidróxi aldol opticamente ativo utilizando diferentes organocatalisadores. Tibes, M. C. O. (UTFPR); Pilissão, C. (UTFPR)
- ORG-122** Synthesis of water-soluble quinolone derivatives containing acylhydrazone/1,3,4-oxadiazole groups as potential anticancer agents. Rocha, A. P. C. (UFF); Batista, M. de P. (UFF); Batalha, P. N. (UFF); Boechat, F. da C. S. (UFF); Souza, M. C. B. V. (UFF)
- ORG-123** Enantioselective Synthesis of Endocyclic Enelactams via Heck-Matsuda reactions. Braga, I. B. (UNICAMP); Lucca Jr., E. C. (UNICAMP); Correia, C. R. D. (UNICAMP)
- ORG-124** Simple and mild three-step synthesis of cyclopropylidene-gamma-lactams from gamma,delta-epoxymalonate. Maximiano, A. P. (UFSC); Marques, M. V. (IFC-Campus Fraiburgo); Sá, M. M. (UFSC)
- ORG-125** Chemoselective reductions of the 2- and 4-nitrophenyl groups in functionalized 2-iminothiazolidines using SnCl₂ under mild conditions. Gouvêa, D. P. (UFSC); Ferreira, M. (UFSC); Sá, M. M. (UFSC)
- ORG-126** An Effective Heck-Matsuda strategy for the synthesis of indoles from β,β -substituted methyl acrilates. Capitão, R. M. (UNICAMP); Almeida, R. C. B. (UNICAMP); Cury, N. M. (CIB); Yunes, J. A. (CIB); Correia, C. R. D. (UNICAMP)
- ORG-127** One-Pot Synthesis of alpha-Diazo carbonyl Compounds from Functionalized Allylic Bromides in a Water-Isopropanol Medium. Russo, T. V. C. (UFSC); Sá, M. M. (UFSC)
- ORG-128** Copper-catalyzed one-pot Michael addition of β -nitrostyrene to 4-methylquinazoline and conversion of the nitro group into a nitrile. Moreira, N. M. (UFSCar); Corrêa, A. G. (UFSCar)
- ORG-129** Ugi four-component reaction using “in situ” isonitrile preparation. dos Reis, G. B. (UNIFESP-Diadema); Romano, E. G. (UNIFESP-Diadema); Silva, D. O. (UNIFESP-Diadema)

- ORG-130 Functionalization of xanthenes and derivatives: synthesis and evaluation of biological properties.** Voltolini, S. (UDESC); Fadel, V. S. (UDESC); Xavier, F. R. (UDESC); Gariani, R. A. (UDESC)
- ORG-131 Enantiomeric NMR discrimination of carboxylic acids using a 5'-seleno-xylofuranoside as a chiral derivatizing agent and chiral solvating agent.** Inácio, N. (UDESC); Xavier, F. R. (UDESC); Mendes, S. R. (UDESC); Gariani, R. A. (UDESC)
- ORG-132 Síntese de calcogeno-cianoidrinas opticamente ativas via resolução cinética enzimática mediada por lipase.** Kochany, D. (UFPR); Zugman, T. (UFPR); Oliveira, B. L. (UFPR); Thomas, J. C. (UFPR); Oliveira, A. R. M. (UFPR); Piovani, L. (UFPR)
- ORG-133 Functionalization of N-Heterocyclic Compounds and Application in the Synthesis of a Verubulin Analogue.** Nishimura, R.H. (FFCLRP-USP); Murie, V.E. (FCFRP-USP); Vessecchi, R. (FFCLRP-USP); Clososki, G.C. (FCFRP-USP)
- ORG-134 Studying the Wolff Rearrangement in Diazoketones Aiming the Synthesis of Bicyclic Aromatic Ketones.** Rocha, E. A. (IQSC-USP); Burtoloso, A. C. B. (IQSC-USP)
- ORG-135 Acidochromism of Push-Pull Nitroquinoline Compounds: Experimental-Theoretical Approach.** Santos, G. C. (UNESP-Bauru); Roldao, J. C. (IMDEA Nanociencia); Gierschner, J. (IMDEA Nanociencia); Silva-Filho, L. C. (UNESP-Bauru)
- ORG-136 Ruthenium-Catalyzed Synthesis of 2,3-Disubstituted Pyridines starting from Isoxazol-5-ones and acrolein.** Fernandes, A. A. G. (IQ-UNICAMP); Stivanin, M. L. (IQ-UNICAMP); Jurberg, I. D. (IQ-UNICAMP)
- ORG-137 Synthesis of unsaturated bicyclic lactones using sulfur ylides.** DAHWACHE, T. A. C. (IQSC-USP); AHMAD, A. (IQSC-USP); Burtoloso, A. C. B. (IQSC-USP)
- ORG-138 One-pot synthesis of novel tetrahydro- β -carboline derivatives bearing a phosphonate group as potential antileishmanial agents.** Oliveira de, A. R. (UEM); Valeze, B. T. (UEM); Baréa, P. (UEM); Costa da, W. F. (UEM); Domingues, N. L. C. (UFMGD); Sarraggiotto, M. H. (UEM)
- ORG-139 Mid Infrared Spectroscopy (mid-FTIR) and Chemometrics Tools for Rapid and Cheap Analysis of Peppers (*Capsicum sp.*).** SILVA, M. S. (IFGoiano-Campus Ceres); MARTINS, M. M. (IFGoiano-Campus Ceres); VALE, L. S. R. (IFGoiano-Campus Ceres); MARQUES, F. A. (IFGoiano-Campus Ceres)
- ORG-140 Initial studies of regioselective synthesis of aryl ethers via a sulfonyl transfer reaction.** Bibiano, T. A. (IFRJ - Campus Nilópolis); Lima, M. L. (IFRJ - Campus Nilópolis); Silva, A. A. T. (IFRJ - Campus Nilópolis)
- ORG-141 Phenolics and antioxidant activities of *Eugenia punicifolia* extracts microencapsulated with Xanthan gum.** Santos, C. (UNESP-FCL-Assis); Martins, M. (UNESP-FCL-Assis)
- ORG-142 Derivatives of Deoxycholic Acid and Anticholinesterase Activity.** Lemos, T. L. G. (UFC); Aguiar, G. R. (UFC); Sousa, E. Y. A. (UFC); Monte, F. J. Q. (UFC); Filho, R. B. (UFRRJ); Sobral, A. J. F. N. (UC); Trevisan, M. T. S. (UFC); Sousa, A. F. (UFC)
- ORG-143 Synthesis of fluorescent Seleno- and Telluro-azaBODIPY for detection of oxidizing endogenous species.** Spinello, P. G. (UDESC); Takata, N. (IQUSP); Dos Santos, A. A. (IQUSP); Gariani, R. A. (UDESC)
- ORG-144 Seleno-funcionalização de indóis mediados por peróxido de hidrogênio-uréia (UHP).** Menezes, J. R. (UNIPAMPA); Goulart, M. M. (UNIPAMPA); Galetto, F. Z. (UFSC); Roehrs, J. A. (IFSul); Azeredo, J. B. (UNIPAMPA)
- ORG-145 Síntese assistida por microondas de uma nova Biaril-Base de Schiff fluorada com potenciais propriedades ópticas não-lineares.** Santos, D. C. (UFRJ); Lopes Júnior, M. A. A. (UFRJ); Paschoal, D. F. S. (UFRJ); Souza, A. L. F. (UFRJ)
- ORG-146 Theoretical Studies of Conformational Equilibrium for Chalcones Nitro Substituted.** Emiliano, H. V. (UEPG); Rozada, T. C. (UEPG); Fiorin, B. C. (UEPG)
- ORG-147 Porphyrins as Photoredox Catalysts in Photoarylation Reactions of Coumarins.** Villela, L. F. (UFSCar); Souza de, A. A. N. (UFSCar); Brocksom, T. J. (UFSCar); Oliveira de, K. T. (UFSCar)
- ORG-148 Porphyrins as Photoredox Catalysts in Csp²-H Arylations: Batch and Continuous Flow Approaches.** Souza de, A. A. N. (UFSCar); Silva, N. S. (UFSCar); Müller, A. V. (UFABC); Polo, A. S. (UFABC); Brocksom, T. J. (UFSCar); Oliveira de, K. T. (UFSCar)
- ORG-149 Estudo visando às sínteses de antraquinonas de origem natural empregando química de benzino sob condições brandas.** Percim, G. P. (UNIFESP-Diadema); Raminelli, C. (UNIFESP-Diadema)
- ORG-150 Síntese e Caracterização de Moléculas Discólicas Contendo Heterociclos Triazina, Quinoxalina e 1,2,4-Oxadiazol.** Sales, K. L. R. (UFPB); Silva, W. P. (UFPB); Cristiano, R. (UFPB)
- ORG-151 Batch and continuous flow transformation of cyanohydrins: synthesis of 1,2-aminoalcohols.** Thomas, J. C. (UFPR); Labes, R. (University of Cambridge); Ley, S. V. (University of Cambridge); Piovani, L. (UFPR)
- ORG-152 Switching Diastereoselectivity in Catalytic Enantioselective (3+2) Cycloadditions between Azomethine Ylides and Activated Alkenes.** Caleffi, G. S. (UFRJ); Larrañaga, O. (EHU-Espanha); Ferrándiz-Saperas, M. (UA); Costa, P. R. R. (UFRJ); Nájera, C. (UA); Cózar, A. (EHU-Espanha); Cossío, F. P. (EHU-Espanha); Sansano, J. M. (UA)
- ORG-153 WEB: An efficient Solvent for the Synthesis of Diorganyl Disulfides from Thiols.** Böhs, L. M. C. (FURG); Leitemberger, A. (FURG); Rosa, C. H. (FURG); Galetto, F. Z. (UFSC); Godói, M. (FURG)
- ORG-154 Palladium-Catalyzed Enantioselective Heck-Matsuda Arylation of Acyclic Enol Ethers: A Direct Synthesis of Fluoxetine.** Polo, E. C. (IQ-UNICAMP); Wang, M. F. (IQ-UNICAMP); Correia, C. R. D. (IQ-UNICAMP)
- ORG-155 Multicomponent Reactions for Synthesis of Anthrazoline Derivatives Donor- π -Acceptor type Using NbCl₅ as Lewis Acid.** Costa, G. M. G. (UNESP-Bauru); Santos, G. C. (UNESP-Bauru); Moreno, V. F. (UNESP-Bauru); da Silva-Filho, L. C. (UNESP-Bauru)

- ORG-156** Application of the regioselective aryloxylation protocol in the alternative synthesis of a beta blocker drug. Barcellos, J. T. (IFRJ - Campus Nilópolis); Bruno, L. M. (IFRJ - Campus Nilópolis); Silva, A. A. T. (IFRJ - Campus Nilópolis)
- ORG-157** Reação de Mannich catalisada por enzimas imobilizadas em nanotubos de titanato. Kosciuk, J. B. (UTFPR); Pilissão, C. (UTFPR).
- ORG-158** Synthesis of 4-(phenylselenyl)resveratrol. LAZZARIS, M. J. (UDESC); MENDES, S. R. (UDESC)
- ORG-159** Development of new synthetic routes to obtain pyrazole-benzimidazoles derivatives and evaluation against *Trypanosoma cruzi*. Ferreira, B. S. (UNIFEI); Santos, M. S. (UNIFEI)
- ORG-160** Synthesis and characterization of pyrazole-tetrazol hybrids. Santos dos, M. S. (); Silva, R. C. (UNIFEI)
- ORG-161** Photochemical assisted tandem reaction for the synthesis of 3-selenylindoles. Coelho, F. L. (UFRGS); Weber, A. C. H. (UFRGS); Affeldt, R. F. (UFSC); Schneider, P. H. (UFRGS)
- ORG-162** First Example of Auto-sustainable Enantioselective Heck-Matsuda Reaction: Evaluation of One-pot Desymmetrization of Cyclopentenol in Batch and in Continuous Flow. Herrera, C. L. (UNICAMP); Correia, C. R. D. (UNICAMP); Pastre, J. C. (UNICAMP)
- ORG-163** Benzocalcogenodiazoles-containing trialkoxysilane groups to obtain fluorescent hybrid materials. Isoppo, V. G. (UFRGS); Braun, R. (UFRGS); Rodembusch, F. S. (UFRGS); Moro, A. V. (UFRGS)
- ORG-164** SYNTHESIS AND ANTIMICROBIAL ACTIVITY OF TIOSEMICARBAZIDE DERIVATIVES. Silva, M. A. F. (UFPE); Gomes, R. K. M. (UFPE); Souza, A. R. (UFPE); Ximenes, R. M. (UFPE); Sena, K. X. F. R. (UFPE); Albuquerque, J. F. C. (UFPE)
- ORG-165** Synthesis of benzo[c][2,6]naphthyridine-3,5-dione via cascade cyclization of enyneacrylamides towards carbamoyl radical. Sacchelli, B. A. L. (IQUSP); Andrade, L. H. (IQUSP)
- ORG-166** Study of the oxidation of α,β -unsaturated aldehyde by oxone®. Oliveira de, R. S. (UNIFAP); Ferreira, I. M. (UNIFAP)
- ORG-167** Choline chloride/urea as a reaction medium for rapid synthesis of primary amines from ketones. Santos, J. L. Z. (UEM); Francisco, C. B. (UEM); Fernandes, C. S. (UEM); Basso, E. A. (UEM)
- ORG-168** ISOPRENOIDES E ATIVIDADE ANTILEISHMANIA DO EXTRATO ETANÓLICO DAS FOLHAS DE *Combretum mellifluum* Eichler. Silva, J. S. (UFPI); Chaves, M. H. (UFPI); Lima, A. M. (UFPI); Farias, R. R. S. (UFPI); Viera Júnior, G. M. (UFPI); Araújo, B. Q. (UFPI)
- ORG-169** Chemical modification of glycerol by etherification in acid homogeneous phase: a study of selectivity. Kochevka, D. M. (UFPR); Oliveira, A. R. S. (UFPR); César-Oliveira, M. A. F. (UFPR); Cordeiro, C. S. (UFPR)
- ORG-170** Synthesis of cinnamic derivatives via click chemistry. Santos, F. S. (UFMG); Teixeira, R. R. (UFV); Freitas, R. P. (UFMG)
- ORG-171** BIO--prospecção de extratos de *Hyptis suaveolens* no estresse de plantas daninhas. Santos, A. C. R. (UFMT); Moura, M. S. (UFMT); Sales, M. C. M. (UFMT); Vieira, L. C. C. (UFMT); Sampaio, O. M. (UFMT); Sousa Jr., P. T. (UFMT)
- ORG-172** Total synthesis of 3,4-dehydrofloridanolide via an oxidative strategy. Novaes, L. F. T. (UCB); Hung, K. (UCB); Condakes, M. L. (UCB); Maimone, T. J. (UCB)
- ORG-173** Obtaining of Chalcones With Aluminum Paper: an alternative safe for classes Organic Chemistry. Brito, S. A. (UNIFAP); Silva, P. N. B. (UNIFAP); Loureiro, H. A. (UNIFAP); Ferreira, I. M. (UNIFAP)
- ORG-174** Asymmetric Synthesis of β -Ketothioethers from Acyl Derivatives of Johnson's Chiral Sulfur Ylides. Papparidis, N. F. S. (IQSC-USP); Burtoloso, A. C. B. (IQSC-USP)
- ORG-175** Synthesis and Biological Prospection of Naphthoquinone-Coumarin Hybrids Containing 1,2,3-Triazolic Linked. Forezi, L. S. M. (UFF); de Souza, A. S. (UFF); Ribeiro, R. C. B. (UFF); Silva, F. de C. (UFF); Ferreira, V. F. (UFF)
- ORG-176** Avaliação de metodologias sintéticas para obtenção de conjugados quinolonotriazólicos. Regufe, P. F. (UFF); Oliveira, V. G. (UFF); Boechat, F. C. S. (UFF); Souza, M. C. B. V. (UFF)
- ORG-177** Vinylic substitution of 3,3-bis-methylsulfanyl-2-cianoacrylate. Lacerda, J. L. (UFF); Gonçalves, E. S. (UFF); Sangi, D. S. (UFF)
- ORG-178** DNA Interaction Studies and DFT calculations upon selected dihydropyrimidinones. Wodtke, F. (UDESC); Schmoeller, L. A. (UDESC); Pietezal, D. (UDESC); Leite, D. C. (UDESC); Xavier, F. R. (UDESC); Gariani, R. A. (UDESC)
- ORG-179** A Straightforward Enantioselective Synthesis of Isoflavonones. Gaspar, F. V. (IPPN-UFRJ); Caleffi, G. S. (IPPN-UFRJ); Trajano, P. C. (IPPN-UFRJ); Domingos, J. L. O. (UERJ); Costa, P. R. R. (IPPN-UFRJ)
- ORG-180** Heck Reaction in Water catalyzed by ionic palladium (II) complex derivated of Salophen. Sabino, AA (UFMG); Kadooca, JY (UFMG); Pimenta, JVC (UFMG); Alcantara, AFC (UFMG)

QPN – Química de Produtos Naturais

- QPN-001** In vitro synergistic evaluation of association of fractions produced from *Bixa orellana* on human tumor cells. Abreu, P. M. B. (UNICAMP); Basting, R. T. (UNICAMP); Ruiz, A. L. T. G. (UNICAMP); Carvalho, P. C. (ITAL); Carvalho, J. E. (UNICAMP); Foglio, M. A. (UNICAMP)
- QPN-002** Chemotypification and circadian rhythm influence on the essential oil production from leaves of *Piper gaudichaudianum* Kunth (Piperaceae). Ramos, Y. J. (UERJ); Ribeiro, K. C. (FIOCRUZ); Moreira, D. L. (FIOCRUZ)

- QPN-003** **Extraction and Characterization of Genpin Extracted from Genipap (*Genipa americana*).** Medeiros, J. V. S. (IFRN-Macau); Oliveira, A. S. (IFRN-Macau); Vieira Júnior, J. C. A. (IFRN-Macau); Sousa, M. I. S. (IFRN-Macau); Lins, R. F. (IFRN-Macau); Costa, M. S. S. P. (IFRN); Rocha, H. A. O. (UFRN); Moura Neto, E. (IFRN-Macau)
- QPN-004** **New antitumoral prenylated hydroquinones from inflorescences of *Piper crassinervium* (Piperaceae).** Quintiliano, N. F. (UNIFESP-Diadema); Brito, J. R. (UNIFESP-Diadema); Figueiredo, C. R. (UNIFESP/EPM); Sartorelli, P. (UNIFESP-Diadema); Antar, G. M. (IB-USP); Lago, J. H. G. (UFABC)
- QPN-005** **Volatile constituents from the leaves of two Myrtaceae species.** Martins, V. de C. (UFRRJ); Carvalho de, M. G. (UFRRJ); Godoy, R. L. de O. (Embrapa Agroindústria de Alimentos); França, L. P. (UFRRJ); Ferreira, Y. da S. (UFRRJ); Pacheco, S. (Embrapa Agroindústria de Alimentos); Souza, M. da C. (UFRRJ)
- QPN-006** **A new and other antitrypanosomal neolignans from twigs of *Nectandra leucanta* (Lauraceae).** Mendonça, P. S. (UFABC); Hernandez, L. R. C. (UFABC); Souza, F. S. (UNIFESP-Diadema); Sartorelli, P. (UNIFESP-Diadema); Medeiros, L. S. (UNIFESP-Diadema); Costa-Silva, T. A. (UFABC); Tempone, A. G. (IAL-SP); Lago, J. H. G. (UFABC)
- QPN-007** **Evaluation of polar solvents on yield, phenolic composition and antioxidant activity of a green propolis type from northern Ceara state (Brazil).** Frota, V. M. (UVA); Moita, E. C. dos S. (UVA); Mendonça, L. da S. (UVA); Barrozo, Y. S. N. (IFCE-Campus Sobral); Fernandes, J. A. B. (IFCE-Campus Sobral); Gomes, G. A. (UVA); Vale, J. P. C. do (UVA); Bandeira, P. N. (UVA); Santos, H. S. dos (UVA); Rodrigues, T. H. S. (UVA)
- QPN-008** **Identification of flavonoids in *Lomatozona artemisiifolia* using LC-HRMS/MS and molecular networking as dereplication strategies.** Kato, L. (UFG); Wakui, V. G. (UFG); Abreu, L. M. (UFG); Moreira, M. P. (UFG); Sibov, S. T. (UFG); Lopes, F. J. L. (UFG); Terezan, A. P. (UFG); Oliveira, C. M. A. (UFG)
- QPN-009** **Evaluation of the antioxidant potential of *Croton antispyphiliticus* guided by bibliometric analysis.** Vilela Prado, V. P. (UFG); França Martins, F. M. (UFG); Pasqualotto Severino, P. S. (UFG)
- QPN-010** **Antitrypanosomal alkaloids from *Ocotea puberula* (Rich.) Nees.** Barbosa, H. (UFABC); Conserva, G. A. A. (UFABC); Costa-Silva, T. A. (UFABC); Tempone, A. G. (IAL-SP); Lago, J. H. G. (UFABC)
- QPN-011** **Identificação de flavonóides em folhas de *Phyllanthus* sp. (Phyllanthaceae) por LC-MS.** Silva, M. H. V. (IFPA); Neto, R. N. (IFPA); Pamplona, S. G. S. R. (UFPA); Silva, C. Y. Y. (UFPA); Silva, R. N. (UFPA); Oliveira, K. E. C. (UFPA); Noronha, G. T. (UFPA); Borges, L. C. (UFPA)
- QPN-012** **Fitoquímica em resíduos madeiros de *Acacia magium* Willd de plantio comercial.** Melo, L. E. S. (INPA); Nascimento, C. C. (INPA); Ferreira, A. G. (UFSCar); Lima, M. P. (INPA)
- QPN-013** **Study of the volatile organic compounds produced by *Epicoccum nigrum* antagonistic to *Magnaporthe oryzae*.** Coelho, C. T. P. (UFG); Cruz, L. V. (UFG); Gama, B. T. A. F. (UFG); Oliveira Neto, J. R. (UFG); Cunha, L. C. (UFG); Araújo, L. G. (UFG); Terezan, A. P. (UFG); Severino, V. G. P. (UFG)
- QPN-014** **In vitro antimicrobial activity, of the essential oils of two *Psidium salutare* variations on clinical isolates of *Candida* spp.** Ethur, E. M. (UNIVATES); Buhl, B. (UNIVATES); Scheibel, T. (UNIVATES); Kauffmann, C. (UNIVATES); Coberlini, V. A. (UNISC); Marchi, M. I. (UNIVATES); de Freitas, E. M. (UNIVATES); Hoehne, L. (UNIVATES)
- QPN-015** **Chemical structure of a partially 3-O-methylated heterogalactan from medicinal mushroom *Pholiota nameko*.** Mello, L. S. (UFG-Catalão); Oliveira, R. S. (UFG-Catalão); Brito, D. R. (UFG-Catalão); Viana, S. R. F. (UFG); Di-Medeiros, M. C. B. (IBB-UNESP); Lião, L. M. (IBB-UNESP); Carbonero, E. R. (UFG-Catalão)
- QPN-016** **Dereplication of antileishmanial active fraction and identification of new acetogenins from seeds of *Porcelia macrocarpa* (Annonaceae).** Oliveira, E. A. (UNIFESP-Diadema); Silva, D. O. (UNIFESP-Diadema); Sartorelli, P. (UNIFESP-Diadema); Romanelli, M. (UNIFESP-Diadema); Tempone, A. G. (IAL-SP); Costa-Silva, T. A. (UFABC); Lago, J. H. G. (UFABC)
- QPN-017** **Belenmines B and C, new homoaporphines bearing an unprecedented 8-oxohomoaporphine sub-skeleton from the bark of *Duguetia surinamensis*: First report in the Annonaceae family.** Paz, W. H. P. (UFAM); Oliveira, R. N. (UFAM); Silva, F. M. A. (UFAM); Koolen, H. H. F. (UEA); Costa, E. V. (UFAM)
- QPN-018** **Chemical and biological study of the endophytic fungus *Anthostomella brabeji* (Xylariaceae), cultivated in the presence of metallic elicitors.** Polinario, G. P. (UNESP-FCFAR); Hilario, F. H. (UNESP-FCFAR); Amorim, M. R. A. (IQAr-UNESP); Botero, W. B. B. (IQAr-UNESP); Bauab, T. M. B. (UNESP-FCFAR); Santos, L. C. S. (IQAr-UNESP)
- QPN-019** **Ésteres produzidos por *Phomopsis* sp, um fungo endofítico isolado do ambiente Amazônico.** Oliveira, C. M. (UFAM); Oliveira, J. M. (UFAM); Garcia, A. C. (UFAM); Monfardini, J. D. (IQAr-UNESP); Araújo, A. R. (IQAr-UNESP); Bolzani, V. S. (IQAr-UNESP)
- QPN-020** **Effect of the extraction time in the antioxidant activity and total phenols of the hydroalcoholic extract of *Bougainvillea glabra* choisy flowers.** Silva, V. I. (UNIPAMPA); Castro, A. C. (UNIPAMPA); Carriço, M. R. S. (UNIPAMPA); Soares, J. J. (UNIPAMPA); Roehrs, R. (UNIPAMPA); Denardin, E. L. G. (UNIPAMPA)
- QPN-021** **The effect of herbivory on volatile compounds of *Piper* species.** Kato, M. J. (IQUSP); Stanton, M. A. (IQUSP)
- QPN-022** **Metabolic profiling of indole monoterpene alkaloids from *Tabernaemontana catharinensis* (A. DC) Latex by GC-MS.** Higashi, B. (UEM); Gonçalves, J. E. (UniCesumar); Gonçalves, R. A. C. (UEM); Oliveira, A. J. B. (UEM)
- QPN-023** **Chemical Composition and Antibacterial and Antifungal activities from Leaves Essential Oil of *Psidium myrtilodes* O. Berg.** AQUINO, F. J. T. (UFU); DIAS, R. F. C. (UFU); CUNHA, L. C. S. (IFSP); MORAIS, S. L. (UFU); OLIVEIRA, A. (UFU); AMBROSIO, M. L. V. (UNIFRAN); MARTINS, C. H. G. (UNIFRAN); SOUZA, J. M. (IFTM)
- QPN-024** **Chemical characterization and antimicrobial activity of the endophytic fungus *Glomerella cingulata* biomass associated to *Viola Surinamensis*.** Gomes, N. F. (IFMA); Cantanhede Filho, A. J. (IFMA); Carneiro, F. J. C. (IFMA); Silva, L. C. N. (UNICEUMA); Carvalho Júnior, A. R. C. (UNICEUMA)

- QPN-025** Evaluation of the cytotoxic activity and investigation of the chemical profile of fungi derived from the ascidian *Aplidium accarense*. Alves, T. F. (UNIFRAN); Carvalho, L. M. O. (UNIFRAN); Kellner Filho, L. C. (UNIFRAN); Pimenta, L. P. (UNIFRAN); Pedroso, R. C. N. (UNIFRAN); Siqueira, K. A. (UFMT); Soares, M. A. (UFMT); Dias, G. M. (UFABC); Tavares, D. C. (UNIFRAN); Januário, A. H. (UNIFRAN)
- QPN-026** Schistosomicidal investigation and chemical profile by HPLC-MS of a marine-derived fungus *Penicillium citrinum*. Assis, R. N. A. (UNIFRAN); Pimenta, L. P. (UNIFRAN); Siqueira, K. A. (UFMT); Soares, M. A. (UFMT); Dias, G. M. (UFABC); Magalhães, L. G. (UNIFRAN); Koolen, H. H. F. (UEA); Silva, M. L. A. (UNIFRAN); Cunha, W. R. (UNIFRAN); Pauletti, P. M. (UNIFRAN); Januário, A. H. (UNIFRAN)
- QPN-027** Dereplication of antileishmanial alkaloids from *Duguetia lanceolata* (Annonaceae) by LC-MS-MS. Conceição, J. M. (UNIFESP-Diadema); Dantas, E. P. (UNIFESP-Diadema); Medeiros, L. S. (UNIFESP-Diadema); Romanelli, M. M. (IAL-SP); Amaral, M. (IAL-SP); Tempone, A. G. (IAL-SP); Lago, J. H. G. (UFABC); Soares, M. G. (UNIFAL); Sartorelli, P. (UNIFESP-Diadema)
- QPN-028** Coproduction of surfactin and arginine by *Bacillus velezensis* 0G in Landy's medium: applications for environmental and health sciences. Cunha, L. H. D. (PUC-Campinas); Silveira, T. C. (PUC-Campinas); Gomes, W. E. (PUC-Campinas); Lataro, B. P. (PUC-Campinas); Beato, T. (PUC-Campinas); Tonon, G. C. (PUC-Campinas); Mendes, R. K. (PUC-Campinas); Etchegaray, A. (PUC-Campinas)
- QPN-029** Antileishmanial activity and ultrastructural changes of related tetrahydrofuran dineolignans isolated from *Saururus cernuus* L. (Saururaceae). Brito, J. R. (UNIFESP-Diadema); Lago, J. H. G. (UFABC); Ferreira, E. A. (UPM); Passero, L. F. D. (FMUSP); Romoff, P. (UPM); Laurenti, M. D. (FMUSP); Bezerra-Souza, A. (FMUSP)
- QPN-030** Comparative metabolomic profile of conventional and genetically modified soybean subjected to water stress conditions. Bueno, P. C. P. (FCFRP-USP); Mertz-Henning, L. M. (Embrapa Soja - Londrina); Nepomuceno, A. L. (Embrapa Soja - Londrina); Lopes, N. P. (FCFRP-USP)
- QPN-031** Using new tools for the metabolomic study and dereplication of marine actinomycetes extracts. Moreira, E. A. (FCFRP-USP); Teixeira, P. R. (ICB-USP); Costa-Lotufo, L. V. (ICB-USP); Lopes, N. P. (FCFRP-USP)
- QPN-032** Metabolomic study of Brazilian Orchidaceae species using molecular network and multivariate analysis. Godinho, C. C. (FCFRP-USP); Bauermeister, A. (FCFRP-USP); Pansarin, E. R. (FFCLRP-USP); Lopes, N. P. (FCFRP-USP); Gobbo-Neto, L. (FCFRP-USP)
- QPN-033** Antimicrobial activity of bergenin and its pentaacetyl derivative. Viana, J. S. (UFPA); Bezerra, F. A. S. (UFPA); Silva, L. O. (UFPA); Paes, S. S. (UFPA); Oliveira, D. G. (UFPA); Araújo, R. N. M. (UFPA); Guilhon, G. M. S. P. (UFPA); Santos, L. S. (UFPA)
- QPN-034** Toxicity of the *Pachira aquatica* AUBL. leaves on *Artemia salina*. Oliveira, D. G. (UFPA); Bezerra, F. A. S. (UFPA); Viana, J. S. (UFPA); Brasil, D. S. B. (UFPA); Corrêa, M. J. C. (UFPA); Júnior, J. O. C. S. (UFPA); Paes, S. S. (UFPA); Oliveira, L. S. (UFPA); Santos, L. S. (UFPA)
- QPN-035** New phenylphenalene isolated from *Eichhornia crassipes*. Costa, M. F. (IQAr-UNESP); Soares Filho, W. A. (IQAr-UNESP); Luiz, M. M. (IQAr-UNESP); Nascimento, I. R. (IQAr-UNESP)
- QPN-036** Tetrahydrofuran lignans from leaves of *Aristolochia warmingii* Mast. Cunha, C. L. (IQAr-UNESP); Antonio, P. V. G. (IQAr-UNESP); Nascimento, I. R. (IQAr-UNESP)
- QPN-037** Atividade antimicrobiana de ftalidas produzidas pelo fungo endofítico *Glomerella cingulata* associado a *Viola surinamensis*. Lopes Junior, M. L. (UFPA); Ribeiro, W. S. (UFPA); Paes, S. S. (UFPA); Pinto, F. T. (UFPA); Corrêa, M. J. C. (UFPA); Araújo, R. N. M. (UFPA); Da Silva, L. O. (UFPA); Guilhon, G. M. S. P. (UFPA); Santos, L. S. (UFPA)
- QPN-038** Comparison of biomimetic oxidation of isoorientin and orientin using Jacobsen's catalyst and [Mn(3MeOSalen)Cl] as a novel catalyst. Chagas, M. B. (UFRN); Ferreira, E. J. (UFRN); Alves, J. S. F. (UFRN); Paiva, A. S. (UFRN); Pontes, D. L. (UFRN); Langassner, S. M. Z. (UFRN); Ferreira, L. S. (UFRN)
- QPN-039** Mycotoxins produced by *Aspergillus* sp. (Rr3C1) an endophytic fungus isolated from the leaves of *Paspalum maritimum*. Araújo, R. N. M. (UFPA); Ribeiro, W. S. (UFPA); Pinto, F. T. (UFPA); Dos Santos, M. M. M. (UFPA); Corrêa, M. J. C. (UFPA); Lopes Junior, M. L. (UFPA); Guilhon, G. M. S. P. (UFPA); Santos, L. S. (UFPA)
- QPN-040** Pentacyclic triterpenes and the in vitro leishmanicidal of *Vochysia divergens* Pohl stem extract. Pimenta, L. P. (UNIFRAN); Pedroso, R. C. N. (UNIFRAN); Souza, W. P. (UFMT); Valerino-Diaz, A. B. (IQAr-UNESP); Santos, L. C. (IQAr-UNESP); Soares, M. A. (UFMT); Magalhães, L. G. (UNIFRAN); Silva, M. L. A. (UNIFRAN); Cunha, W. R. (UNIFRAN); Pauletti, P. M. (UNIFRAN); Januário, A. H. (UNIFRAN)
- QPN-041** Metabolomics as a tool for ecological analysis of the disturbance gradient from the Atlantic Forest. Pilon, A. C. (FCFRP-USP); Barros, D. R. P. (FCFRP-USP); Aidar, M. P. M. (IBot-SP); Bolzani, V. S. (IQAr-UNESP); Joly, C. A. (IB-UNICAMP); Lopes, N. P. (FCFRP-USP)
- QPN-042** Identification of steroidal alkaloids from roots of *Jurubeba* (*Solanum paniculatum* L.) by HR-ESI-MS. Gazolla, M. C. (FCFRP-USP); Pilon, A. C. (FCFRP-USP); Lopes, N. P. (FCFRP-USP)
- QPN-043** Chemical study by HPLC-DAD and HPLC-MS of extracts obtained from *Mimosa tenuiflora* and *Peganum harmala* simultaneously. Rolim, L. A. (UNIVASF); Amariz, I. A. (UNIVASF); Souza, N. A. C. (UNIVASF); Pereira, E. C. V. (UNIVASF); Oliveira, A. P. (IF-Sertão Pernambucano); Lopes, N. P. (FCFRP-USP)
- QPN-044** Chemical diversity of Fabaceae family species present in the Caatinga biome. Barros, D. R. P. (FCFRP-USP); Pilon, A. C. (FCFRP-USP); Domingues, T. F. (FFCLRP-USP); Lloyd, J. (Imperial College London); Lopes, N. P. (FCFRP-USP)
- QPN-045** Dereplication strategies for discovering cytotoxic compounds from *Swinglea glutinosa* (Rutaceae) and its associated endophytic fungi. Carvalho, A. C. (UNIFESP-Diadema); Rodrigues, L. C. (UNIFESP-Diadema); Ribeiro, A. I. (UFSCar); Vital, W. D. S. (UNIFESP-Diadema); Silva, M. F. G. F. (UFSCar); Medeiros, L. S. (UNIFESP-Diadema); Veiga, T. A. M. (UNIFESP-Diadema)
- QPN-046** Avaliação do perfil químico por CLAE-DAD e do potencial antioxidante de *Chamaecrista duckeana* I&B. Lima, D. R. (UFC); Paiva, C. F. (UFC); Franca, M. G. A. (UFC); Nascimento, F. W. M. (UFC); Silva, M. G. V. (UFC)
- QPN-047** Avaliação da atividade acetilcolinésterásica e antioxidante em *Libidibia ferrea* L.P. Queiroz e *Poincianella pyramidalis* Tul. nativas de Tauá-CE. Paiva, C. F. (UFC); Teixeira, M. I. G. S. (UFC); Lima, D. R. (UFC); Sousa, A. F. (UFC); Trevisan, M. T. S. (UFC); Silva, M. G. V. (UFC)

- QPN-048 Metabolism of sesquiterpene lactones and flavonoids in *Chlosyne lacinia* larvae feeding on *Tithonia diversifolia* leaves.** Gallon, M. E. (FCFRP-USP); Silva-Junior, E. A. (FCFRP-USP); Lopes, N. P. (FCFRP-USP); Gobbo-Neto, L. (FCFRP-USP)
- QPN-049 Evaluation of the cytotoxic potential of sesquiterpene lactones isolated from *Calea pinnatifida* against thyroid tumor cell lines.** Caldas, L. A. (UNIFESP-Diadema); Ferreira, M. J. P. F. (IB-USP); Lago, J. H. G. (UFABC); Teixeira, M. (UNIFESP-Diadema); Rubio, I. (UNIFESP-Diadema); Sartorelli, P. S. (UNIFESP-Diadema)
- QPN-050 BIO--reduction of chalcone (2E)-1-(4'-hydroxy-phenyl)-3-(2-methoxy-phenyl)-prop-2-en-1-one by fungus *Scedosporium apiospermum*.** Feitosa, A. O. (UFPA); dos Anjos, M. L. (UFPA); Bitencourt, H. R. (UFPA); Souza Filho, A. P. S. (CPATU); Marinho, P. S. B. (UFPA); Marinho, A. M. R. (UFPA)
- QPN-051 Chemical constituents and biological evaluation of the hexanic extract (HE) of the endophytic fungus *Exserohilum rostratum* isolated of *Phanera splendens*.** PINA, J. R. S. (UFPA); COBEL, A. C. (UFPA); WATANABE, L. A. (UFPA); SILVA, S. Y. S. (UNIFESSPA); SILVA, S. da C. (UNIFESSPA); MARINHO, A. M. do R. (UFPA); MARINHO, P. S. B. (UFPA)
- QPN-052 Synthesis of poly(lactic acid)-lemongrass essential oil nanocapsules and their activity against *C. gloeosporioides* and *C. acutatum*.** Antonioli, G. (UCS); Fontanella, G. (UCS); Echeverrigaray, S. (UCS); Pauletti, G. F. (UCS); Barcellos, T. (UCS)
- QPN-053 Desenvolvimento de método por CLAE-DAD para comparação do perfil químico de *Senna trachypus* H & B de cinco localidades do Ceará.** Franca, M. G. A. (UFC); Barros, J. F. S. (UFC); Cavalheiro, A. J. (IQAr-UNESP); Silva, M. G. V. (UFC)
- QPN-054 Structural elucidation of a bioactive fucomannogalactan from edible mushroom *Hypsizygus marmoreus*.** Oliveira, R. S. (UFG-Catalão); Biscaia, S. M. P. (UFPR); Bellan, D. L. (UFPR); Trindade, E. S. (UFPR); Di-Medeiros, M. C. B. (UFG-Catalão); Lião, L. M. (UFG); Carbonero, E. R. (UFG-Catalão)
- QPN-055 Phytochemical analysis and activities evaluation of the seed extracts of *Araucaria angustifolia*.** Neumann, I. C. (UEL); Russo, H. M. (IQAr-UNESP); Bolzani, V. S. (IQAr-UNESP); Zeraik, M. L. (UEL)
- QPN-056 Extractor solvent exploratory analysis for auxin biosynthesis from *Coffea arabica* L. leaves.** Scarminio, I. S. (UEL); Hatumura, P. H. (UEL); Rakocevic, M. (Embrapa Sede); Bruns, R. E. (UNICAMP)
- QPN-057 Estudo químico do extrato etanólico do caule de *Zeyheria montana* buscando atividade inibitória frente a enzima urease.** Barros, M. S. (UFG-Catalão); Sousa, L. R. F. (UFG-Catalão); Severino, R. P. (UFG-Catalão); Rosa, T. F. (UFG-Catalão); Santos, M. H. F. (UFG-Catalão)
- QPN-058 Acetylcholinesterase and beta-secretase co-immobilized in agarose beads: development of off-line assay for ligand screening.** Ferreira Lopes Vilela, A. (FFCLRP-USP); Mateo, C. (CSIC); Cardoso, C. L. (FFCLRP-USP)
- QPN-059 Chemical characterization by LC-MS/MS and antimicrobial activity on crude extracts of *Humiria balsamifera* (Aubl).** Dias, E. J. S. (IFMA); Cantanhede Filho, A. J. (IFMA); Carneiro, F. J. C. (IFMA); Rocha, C. Q. (UFMA); Silva, L. C. N. (UNICEUMA); Marques, J. C. (IFMA)
- QPN-060 Avaliação da atividade anti-helmíntica in vitro e in vivo de ácidos diterpênicos isolados de *Baccharis sphenophylla* (Asteraceae).** Sessa, D. P. (UFABC); Grecco, S. S. (UNIAN); Rodrigues, V. C. (UNG); de Moraes, J. (UNG); Lago, J. H. G. (UFABC)
- QPN-061 Seasonality effect on volatile profile of *Heliotropium indicum* from northern Ceara state (Brazil).** Moita, E. C. S. (UVA); Aguiar, D. C. (UVA); Frota, V. M. (UVA); Araújo, F. F. (UVA); Gomes, G. A. (UVA); Vale, J. P. C. (UVA); Bandeira, P. N. (UVA); Santos, H. S. (UVA); Rodrigues, T. H. S. (UVA)
- QPN-062 Dereplication of cytotoxic extracts of endophytic fungi obtained from *Casearia arborea* (Salicaceae) using molecular network approach.** Santos, A. L. (UNIFESP-Diadema); Medeiros, L. S. (UNIFESP-Diadema); Ionta, M. (UNIFAL); Horvath, R. O. (UNIFAL); Soares, M. G. (UNIFAL); Tangerina, M. M. P. (IB-USP); Ferreira, M. J. P. (IB-USP); Sartorelli, P. (UNIFESP-Diadema)
- QPN-063 Chemical profile of *Crotalaria spectabilis* extracts and evaluation of nematode control in *Heterodera glycines*.** Russo, H. M. (IQAr-UNESP); Scupinari, T. (UEL); Ferrari, A. B. S. (UEL); Nunes, E. O. (Embrapa Soja - Londrina); Bolzani, V. S. (IQAr-UNESP); Zeraik, M. L. (UEL)
- QPN-064 Metabolome prospection of the bioluminescent fungus *neonothopanus gardneri*.** Andrade, T. J. A. (IFMA); Machado, N. S. (UFPI); Oliveira, M. D. A. (UFPI); Silva, D. H. S. (IQAr-UNESP); Dias, L. P. (UFC); Castro, C. G. M. (UFC); Tabadravu, J. N. (University of York); Junior, J. S. C. (IFPI); Cito, A. M. G. L. (UFPI)
- QPN-065 Synthesis of water-soluble peptide complexes of silver (I) and copper (II) for future phytopathogenic assays.** Moraes, C. A. F. (UFSCar); Villarreal, W. (UFSCar); Silva, M. F. G. F. (UFSCar)
- QPN-066 Preliminary studies on the structure of polysaccharides from the wild mushroom *Favolus brasiliensis* from the Amazon Rainforest.** Brito de, D. R. (UFG-Catalão); Komura, D. L. (INPA); Di-Medeiros, M. C. B. (UFG); Lião, L. M. (UFG); Carbonero, E. R. (UFG)
- QPN-067 Isolation of two novel spirodrimanes through the molecular network study from *Stachybotrys levisporous*.** Ribeiro, A. I. R. (UFSCar); Oliveira, R. V. (UFSCar); Venâncio, T. (UFSCar); Forim, M. R. (UFSCar); Fernandes, J. B. (UFSCar); da Silva, M. F. F. (UFSCar)
- QPN-068 Chemical study of flower extracts from *Hortia oreadica* (Rutaceae).** Zequin, M. C. (UFSCar); Silva, M. F. das G. F. (UFSCar)
- QPN-069 Study of the endophytic fungus isolated from *Hortia Oreadica* (Rutaceae) and their Secondary Metabolites.** Silva, M. F. G. F. (UFSCar); Dominguez Formoso, D. F. (UFSCar); Ribeiro, R. B. (UFSCar)
- QPN-070 Fingerprint of Amazonian *Siparuna* species by mass spectrometry.** Leal, C. M. (UFRJ); Mendonça, S. C. (UFRJ); Campos, M. F. (UFRJ); Gomes, B. A. (UFRJ); Simas, R. C. (UFRJ); Leitão, S. G. (UFRJ); Leitão, G. G. (UFRJ)
- QPN-071 Identificação de piperamidas em extratos hexânico e diclorometânico dos resíduos agroindustriais de pimenta do reino (*Piper nigrum* L.).** Lucas, D. R. (UFES); Moura, P. R. G. (UFES); Kuster, R. M. (UFES)

- QPN-072 Chemical constituents from the leaves of *Adenocalymma axillarum*.** Andrade, J. P. C. (UNIFRAN); Alves, O. J. A. (UNIFRAN); Gimenez, V. M. M. (UNIFRAN); Cunha, W. R. (UNIFRAN); Silva, M. L. A. e (UNIFRAN); Januario, A. H. (UNIFRAN); Pauletti, P. M. (UNIFRAN)
- QPN-073 Antimicrobial and antileishmania activity of *Banisteriopsis malifolia* (Nessl& Mart.) B. Gates.** CHANG, R. (UFU); MARTINS, V. E. X. (UFU); SILINGARDI, H. M. T. (UFU); NASCIMENTO, E. A. do (UFU); CUNHA, L. C. S. (IFTM); MARTINS, C. H. H. (UNIFRAN); RODRIGUES, C. C. (UFU); Silva, C. V. da (UFU); MORAIS, S. A. L. DE (UFU); AQUINO, F. J. T de (UFU)
- QPN-074 Novos Derivados do Gingerol e suas Atividades Citotóxicas.** Silva, W. C. L (UFES); Conti, R (UFES); Junior, V. L (UFES); Moarais, P. A. B (UFES); Lotufo, L. V. C (IB-USP)
- QPN-075 Ligand Fishing: Search of binders of cysteine proteases in the stem ethanolic extract of *Melia azedarach* (Meliaceae).** Pereira, L. R. (UFSCar); Leandro, C. S. (UFSCar); Costa, R. P. (UFSCar); Costa, W. B. (UFSCar); da Silva, L. R. G. (UFF); Cass, Q. B. (UFSCar); da Silva, M. F. G. F. (UFSCar)
- QPN-076 Seasonality effect on volatile composition of a green propolis type from Caatinga biome at northern Ceara state (Brazil).** Mendonça, L. S. (IFCE); Frota, V. M. (UVA); Barrozo, Y. S. N. (IFCE); Fernandes, J. A. B. (IFCE); Rodrigues, T. H. S. (UVA); Zocolo, G. J. (Embrapa Agroindústria Tropical); Gomes, G. A. (UVA); Vale, J. P. C. (UVA); Bandeira, P. N. (UVA); Santos, H. S. (UVA)
- QPN-077 Glyphosate tank-mixtures and alternative herbicides for glyphosate-resistant weed control in Mexican citrus.** Amaral, G. S. (UFSCar); Cruz, R. A. (UFSCar); Silva, M. F. G. F. (UFSCar); Dominguez-Valenzuela, J. A. (UACH); Prado, R. D. (UCO)
- QPN-078 DEREPLICATION STUDY OF *Campuloclinium macrocephalum* BY UHPLC-HRMS AND MOLECULAR NETWORKING.** Cabral, M. R. P. (UEM); Silva, C. P. (UniCesumar); Gonçalves, M. G. M. (UEM); Carmo, M. R. B. (UEPG); Baldoqui, D. C. (UEM); Sarragiotto, M. H. (UEM)
- QPN-079 Genotypes evaluation of *C. sinensis* e *C. limonia* for micropropagation of resistant strains.** Amaral, J. C (UFSCar); da Silva, M. F. das G. F (UFSCar); Fernandes, J. B (UFSCar); Pina, E. S. (UNAERP); Lopes, A. A. (UNAERP); Pereira, A. M. S (UNAERP)
- QPN-080 Use of ionic liquid in the microwave assisted extraction of cotic acid from *Nectandra barbellata* (Lauraceae) with antiparasitic activity.** Londero, V. S. (UNIFESP-Diadema); Antar, G. M. (IB-USP); Baitello, J. B. (IF-SP); Costa-Silva, T. A. (UFABC); Tempone, A. G. (IAL-SP); de Oliveira, L. V. F. (UNIFESP-Diadema); Camilo, F. F. (UNIFESP-Diadema); Lago, J. H. G. (UFABC)
- QPN-081 Influence of temperature and dialysis separation on the antioxidant activity of *Cedrela odorata* and *Amburana cearenses*.** Pires, E. D. (UNEAL); Do Nascimento Junior, P. A. (UNEAL); Valentim, I. B. (IFAL); Santana, A. E. G. (UFAL); Barros, C. J. P. (IFAL); Barbosa, L. F. (IFAL); De Moraes, C. T. H. S. (UNEAL); Da Silva, E. M. (UNEAL); Da Silva, K. B. (UFAL)
- QPN-082 Chemical study of *Erythricium salmonicolor*, fungal phytopathogen of citrus.** PINTO, L. S. (UFSCar); FARIA, F. A. (UFSCar); SILVA, D. F. (UFSCar); FORIM, M. R. (UFSCar); SILVA, J. B. F. (UFSCar); SILVA, M. F. G. F. (UFSCar)
- QPN-083 Antibiotics from resistance genes as elicitors of the biosynthesis of Natural Products in *Burkholderia thailandensis*.** Baldim, J. L. (UFABC); Assis, D. M. (Bruker do Brasil); Chagas-Paula, D. A. (UNIFAL); Soares, M. G. (UNIFAL); Lago, J. H. G. (UFABC)
- QPN-084 Caramboxin analysis in unripe fruits of Star Fruit (*Averrhoa carambola*).** Pereira, P. R. R. (FCFRP-USP); Lopes, N. P. (FCFRP-USP)
- QPN-085 Limonoids glucosides in persian lime (*Citrus limettioides* T.) seeds.** Silva da, T. R. (UFRJ); Silva da, A. J. R. (UFRJ)
- QPN-086 Estudo das raízes de *Citrus sinensis* em fases ontogenéticas após infecção por *Candidatus Liberibacter asiaticus*.** Silva, M. G. F. (UFSCar); Silva, M. F. G. F. (UFSCar)
- QPN-087 Semi-synthesis and biological evaluation of fucosterol derivatives.** Da Silva, F. E. F. (UFC); Ávila, F. do N. (UFC); Pessoa, O. D. L. (UFC); Da Costa, J. G. M. (URCA); Santiago, G. M. P. (UFC)
- QPN-088 Identification of the compounds and evaluation of the antibacterial activity of *Celtis ehrenbergiana* leaves.** Padilha, H. A. (UNIPAMPA); Vargas, M. S. (UNIPAMPA); Gollino, G. (UNIPAMPA); Soares, J. (UNIPAMPA); Ribeiro, V. B. (UNIPAMPA); Denardin, E. L. G. (UNIPAMPA); Farias, F. M. (UNIPAMPA)
- QPN-089 Calystegines in *Solanum Paniculatum* L.** Souto, L. F. L. (IFRO); Silva da, A. J. R. (UFRJ)
- QPN-090 Insecticidal activity evaluation of polymeric nano/microparticles of Neem oil in *Aphis persica*.** Massaroli, M. (UFSCar); Durango, L. G. C. (UFSCar); da Silva, D. (UFSCar); Buss, D. (UFSCar); Forim, M. (UFSCar); Bruce, T. (UFSCar); da Silva, M. F. G. F. (UFSCar)
- QPN-091 Metabolomic fingerprint at different hydration states and structural identification of anabasin in *Selaginella convoluta*.** Santos Reginaldo, F. P. (UFRN); Freire, R. (IQAR-UNESP); Costa, I. C. M. (UFRN); Silva, I. B. (UFRN); Roque, A. A. (UFRN); Hallwass, F. (UFPE); Castro-Gamboa, I. (IQAR-UNESP); Fett-Neto, A. G. (UFRGS); Cavalheiro, A. J. (IQAR-UNESP); Giordani, R. B. (UFRN)
- QPN-092 Analysis and quantification of flavonoids in flowers of *Allamanda cathartica* L.** Rodrigues, D. W. (UNIVALI); Krueger, C de M. A. (UNIVALI); Müller, A. F. F. (UNIVALI); Bonomini, T. J. (UNIVALI); Klein-Júnior, L. C. (UNIVALI); Machado, M. da S. (UNIVALI); da Silva, R. M. L. (UNIVALI); Malheiros, A. (UNIVALI)
- QPN-093 Artemisinin, dihydroartemisinin and 10-dihydroartemisinin glutaric acid: Evaluation of in vitro schistosomicidal activity.** Boaventura Jr., S. (CPQBA-UNICAMP); Oliveira, R. N. (IB-UNICAMP); Corrêa, S. A. P. (IB-UNICAMP); Allegretti, S. M. (IB-UNICAMP); Garcia, V. L. (CPQBA-UNICAMP)
- QPN-094 Extraction of carotenoids from the microalgae *Chlorella vulgaris* grown in two different cultivation media.** Bignon, L. M. P. (UERJ); Oliveira, I. T. R. (IFRJ - Campus Nilópolis); Marques, M. R. C. (UERJ); Teixeira, C. M. L. L. (INT)
- QPN-095 Extraction of L-dopa from seeds of *Mucuna cinerea* by deep eutectic solvent.** Silva, B. T. (UFV); Demuner, A. J. (UFV); Superbi, R. C. S. (UFV); Cerceau, C. I. (UFV); Blank, D. E. (UFV); Santos, M. H. (UFV)

- QPN-096** **Constituents and Antifungal Screening of the Essential Oil from Leaves of *Rhabdocalon lavanduloides* (Bentham) Epling (Lamiaceae).** Rebelo, R. A. (FURB); Cunha, B. M. (FURB); Begnini, I. M. (FURB); Silva, L. E. (UFPR); Amaral, W. (UFPR); Munhão, V. A. S. (UFPR); Cruz, A. B. (UNIVALI); Cruz, R. C. B. (UNIVALI)
- QPN-097** **Understanding the infection process of *Candidatus Liberibacter asiaticus* (CLas) in *Citrus sinensis* using Imaging Mass Spectrometry.** Pontes, J. G. M. (IQ-UNICAMP); Fernandes, L. S. (IQ-UNICAMP); Vendramini, P. H. (IQ-UNICAMP); Magnani, R. F. (Fundecitrus); Wulff, N. A. (Fundecitrus); Eberlin, M. N. (IQ-UNICAMP); Fill, T. P. (IQ-UNICAMP)
- QPN-098** **Mass spectrometry as a tool for the dereplication of saponins from *Ampelozizyphus amazonicus* Ducke bark and wood.** Mendonça, S. C. M. (IPPN-UFRJ); Simas, R. C. S. (UFRJ); Simas, D. L. R. (UFRJ); Leitão, S. G. L. (UFRJ); Leitao, G. G. L. (IPPN-UFRJ)
- QPN-099** **Triterpenes isolated from *Miconia sellowiana* (Melastomataceae) fruits.** Correa, JGS (UEM); Bianchin, M. (UEM); Pomini, AM (UEM); Oliveira, SM (UEM)
- QPN-100** **Production of Pigments of Commercial Interest Obtained from *Arthrospira platensis* grown in two different LEDS.** Cavalcanti, L. P. de A. N. (UFRJ); Oliveira, I. T. R. (IFRJ - Campus Nilópolis); Teixeira, C. M. L. L. (INT); Martins, R. C. C. (UFRJ)
- QPN-101** **Rapid characterization of triterpene saponins from *Zornia brasiliensis* by HPLC-ESI-MS/MS and NMR.** NASCIMENTO, Y. M. (UFPB); ABREU, L. S. (UFPB); LIMA, R. L. (UFPB); COSTA, V. C. O. (UFPB); MELO, J. I. M. (UEPB); BRAZ-FILHO, R. (UENF); SILVA, M. S. (UFPB); TAVARES, J. F. (UFPB)
- QPN-102** ***Bidens segetum* Mart. Ex. Colla: estudo do extrato etanólico de folhas frescas liofilizadas por HPLC-DAD e LC/ESI-MS/MS.** Franco, S. D. (IBot-SP); Campos, J. P. S. (FCMSC-SP); Ferreira, M. J. P. (IB-USP); Melo, F. H. M. (FCMSC-SP); Torres, L. M. B. (IBot-SP)
- QPN-103** **Identification of biomarkers in *Glycine max* in resistance mechanisms against herbivory.** Aguiar, M. C. S. (UFSCar); Carneiro, R. L. (UFSCar); Freitas, M. M. (FCAV-UNESP); Freitas, C. A. (FCAV-UNESP); Boiça-Junior, A. L. (FCAV-UNESP); Fernandes, J. B. (UFSCar); da Silva, M. F. G. F. (UFSCar); Forim, M. R. (UFSCar)
- QPN-104** **Analysis and evaluation of endophytic fungi extracts in herbicidal activities.** Moura, M. S. (UFMT); Lacerda, J. W. F. (UFMT); Soares, M. A. (UFMT); Vieira, L. C. C. (UFMT); Sampaio, O. M. (UFMT)
- QPN-105** **Isolamento e identificação de novas saponinas do “Mandacaru” (*Cereus jamacaru*).** Abreu, L. S. (UFPB); Brito, A. F. S. (UFPB); Nascimento, Y. M. (UFPB); Dantas, C. A. G. (UFPB); Pereira, L. C. O. (UFPB); Lins, F. S. V. (UFPB); Braz-Filho, R. (UENF); Costa, V. C. O. (UFPB); da Silva, M. S. (UFPB); Tavares, J. F. (UFPB)
- QPN-106** **Detecção dos biomarcadores presentes no óleo de copaíba pelas técnicas de HPTLC e TLC-MS.** Pereira, J. N. (IME); Nascimento, L. S. (IME); Felisberto, F. K. (IME); Lima, M. C. F. (UFAM); Veiga-Jr, V. F. (IME)
- QPN-107** **SEASONAL VARIATIONS OF BUTENOLIDES IN AERIAL PARTS OF *Piper malacophyllum*.** Machado, M. S. (UNIVALI); Zermiani, T. (UNIVALI); Santos, M. C. (UNIVALI); Lobato, F. M. (UNIVALI); Costa, M. (UNIVALI); Athayde, A. E. (UNIVALI); Mattos, P. A. (UNIVALI); Malheiros, A. (UNIVALI); Meyre-Silva, C. (UFSC)

QVE – Química Verde

- QVE-001** **Green alternative for the identification of phenolic compounds in Brazilian red wines by HPLC.** Pelissari, J. H. (IQAr-UNESP); Funari, C. S. (FCA-UNESP-Campus Botucatu); Carneiro, R. L. (UFSCar); Rinaldo, D. (FC-UNESP-Campus Bauru)
- QVE-002** **Evaluation of residual frying oil oxidation collected by Verde Vida Institute - Vila Velha-ES.** Vasconcelos, I. M. (IFES-Vila Velha); Casagrande, G. V. (IFES-Vila Velha); Bozi, N. (IFES-Vila Velha); Vindilino, R. A. B. (IFES-Vila Velha); Porto, C. F. C. (IFES-Vila Velha); Soares, A. B. (IFES-Vila Velha); Dias, M. C. (IFES-Vila Velha)
- QVE-003** **Microwave assisted 5-HMF production from water-soluble sugars using betaine-based natural deep eutectic solvents (NADES).** Gomes, G. R. (UNICAMP); Pastre, J. C. (UNICAMP)
- QVE-004** **Fast and Green synthesis of maleinized vegetable oil by microwave irradiation.** Alarcon, R. T. (UNESP-Bauru); Gaglieri, C. (UNESP-Bauru); Souza, O. A. (UNESP-Bauru); Rinaldo, D. (UNESP-Bauru); Bannach, G. (UNESP-Bauru)
- QVE-005** **Approaching Nanotechnology and Green Chemistry in Teaching Chemistry from the Green Synthesis of Silver Nanoparticles.** Schram, M. (UNICENTRO); Guimarães, E. G. (UNICENTRO); Takata, N. H. (UNICENTRO)
- QVE-006** **Acid Black 210 dye adsorption by activated carbon from seed of Guava.** Luna, J. H. M. (UFS); Freitas, L. D. S. (UFS); Marques, J. J. (UFS)
- QVE-007** **Synthesis of halohydrins via SN2 solvent free reaction from glycerol dichlorohydrin using homogeneous media or solid-supported reagents.** SANTOS, P. F. (UFRJ); SILVA, S. R. B. (UFRJ); SILVA, F. P. N. R. (UFRJ); PEREIRA, V. L. P. (UFRJ)
- QVE-008** **Development of a green HPLC-PAD method for determination of the Vancomycin in human plasma.** FERRAZ, I. P. F. (FC-UNESP-Campus Bauru); PONCE, D. (FOB-USP-Bauru); RINALDO, D. (FC-UNESP-Campus Bauru)
- QVE-009** **Lipase lactonization as an alternative process for lichenysin-A cyclization obtained by solid-phase peptide synthesis.** BOFINGER, M. R. (IQ-UNICAMP); MARSAIOLI, A. J. (IQ-UNICAMP)
- QVE-010** **Um olhar em produções acadêmicas sobre práticas de ensino da Química Verde.** Dias, E. D. S. (UFSC); Marques, C. A. (UFSC)
- QVE-011** **Sustainable synthesis of gold nanoparticles in heterogeneous systems.** de Faria, D. C. (UFV); Chagas, F. O. (UFV); da Silva, L. H. M. (UFV); Hespagnol, M. C. (UFV)

QVE-012 Development of green HPLC methods for analysis of metabolites in *Bauhinia Forficata* Link using multivariate analysis. Oliveira, M. E. (UNESP-Bauru); Borges, M. S. (IQAR-UNESP); Funari, C. S. (IBB-UNESP); Rinaldo, D. (UNESP-Bauru)

QVE-013 Cellulose extraction from green coconut fiber for potential application in biodegradable materials. VIANA, L. C (PUCPR); WITT, M. A (PUCPR)

QVE-014 The Application of an immobilized microorganism in mesoporous material (MCM48) as a biocatalyst in transesterification reactions for the production of monoacylglycerols. Paranhos, B. A. (UFRJ); Queiroz, M. S. R. (UFRJ); Mignoni, M. L. (URI); Valduga, E. (URI); Itabiana Júnior, I. (UFRJ); Malafaia, C. R. A. (UFRJ); Leal, I. C. R. (UFRJ)

QVE-015 MIL-101(Cr): A brief comparison of synthesis cost and sustainability between the mechanochemical and solvothermal synthetic method. Miranda, J. L. (); Moura, L. C. (); Moraes, P. M. (UFRJ)

QVE-016 Synthesis of piperidine and pyrrolidine alkaloid scaffolds through cascade reaction involving transaminases and Aza-Michael addition. Orejon, K. L. R. (IQ-UNICAMP); Nasario, F. D. (IQ-UNICAMP); Marsaioli, A. J. (IQ-UNICAMP)

QVE-017 New methodology for the synthesis of Sirtuin 2 inhibitor analogues in *Trypanosoma cruzi* parasites. Fornari, E. (FCF-USP); Gomes, R. A. (FCF-USP); Stefani, H. A. (FCF-USP); Trossini, G. H. G. (FCF-USP)

QVE-018 Synthesis of alpha-nitroketones via nitroaldol/oxidation reactions using green basic systems and PV-PCC as solid oxidant reagent. Souza, D. L. F. (UFRJ); Moura, J. A. (IFRJ - Campus Nilópolis); Coutinho, A. R. (UFRJ); Gomes, A. O. (UFRJ); Pereira, V. L. P. (UFRJ)

QVE-019 Reuse of sugarcane bagasse to obtain carboxymethylcellulose: Characterization and thermochemical degradation. Ito, F. M. (IFMS); Oliveira, E. S. (IFMS); Silva, A. G. P. (IFMS); Santos, T. M. N. (UFMS); Silva, A. C. L. (IFMS); Beatriz, Adilson (UFMS); Oliveira, L. C. S. (UFMS); Cristani, V. (UFMS); Novais, A. R. (UFMS)

QVE-020 Trends in Green Chemistry Research. Marcelino, L. V. (UFSC); Marques, C. A. (UFSC)

TEC – Química Tecnológica

TEC-001 Knowledge Management in Chemical Data Science applied to anticancer drugs for the Brazilian National Health System. Magalhães, J. L. (FIOCRUZ); Silva, D. C. P. R. (FIOCRUZ); Costa, J. C. S. (FIOCRUZ); Antunes, A. M. S. (INPI)

TEC-002 Oxidative stability and cold filter plugging point of biodiesel blends derived from fats and soy oil. Santos, S. J. (ULBRA); Braun, J. V. (ULBRA); Espíndola, G. C. (ULBRA); Mattos, G. F. (ULBRA); Ongaratto, D. P. (ULBRA); Fontoura, L. A. M. (ULBRA)

TEC-003 Effect of CaCO₃/MgO nanoparticle and PHB solutions nebulization cycle, and PHB concentration on nitrogen release profile from coated urea. da Silva, A. R. (IFES-Campus Aracruz); Bosi, J. F. L. (IFES-Campus Aracruz)

TEC-004 Study of Sofosbuvir Patent Protection Process and its Commercialization in Brazil. Cotrim, B. A. (IFRJ-Campus Rio de Janeiro); Rafael, R. A. (IFRJ - Campus Nilópolis)

TEC-005 Methane production from a mixture of vinasse and pentose liquor using a new hybrid anaerobic reactor. Torres, M. C. (UFOP); Adarme, O. F. H. (UFOP); Baêta, B. E. L. (UFOP); Gurgel, L. V. A. (UFOP); de Aquino, S. F. (UFOP)

TEC-006 Optimization of the transesterification reaction of soy oil catalyzed by potassium glyceroyde. Jancke, M. (ULBRA); dos Santos, L. W. (ULBRA); Santos, S. J. (ULBRA); Fontoura, L. A. M. (ULBRA)

TEC-007 GC-MS study of the aqueous fraction obtained by the slow pyrolysis of *Passiflora edulis* and *Jatropha curcas* seeds cakes. Schroeder, P. (UFF); Fernandes, T. S. (UFF); Cabral, T. S. (UFF); Figueiredo, M. K-K. (IFRJ-Campus Duque de Caxias); Veloso, M. C. C. (UFF); Romeiro, G. A. (UFF)

TEC-008 Effect of ultrasonic pretreatment in the phenolics production by cowpeabean pod catalytic pyrolysis. Bispo, D. F. (UFS); Santos, R. M. (UFS); Granja, H. S. (UFS); Freitas, L. S. (UFS)

TEC-009 Perfluoropolieter thermal stability (PFPE) employed as a lubricant. Rosa, E. C. A. (ITA); Gonçalves, R. F. B. (ITA); Domingues, M. G. (ITA); Silva, A. C. (EEL-USP); Rocco, J. A. F. F. (ITA)

TEC-010 PRODUCTION AND ANALYSIS OF BIODIESEL OBTAINED FROM DIFFERENT AGRICULTURAL WASTE. Figueiredo, M. K.K. (IFRJ-Campus Duque de Caxias); Conceição, J. V. (IFRJ-Campus Duque de Caxias); Sales, C. M. S. (IFRJ-Campus Duque de Caxias); Oliveira, L. M. (IFRJ-Campus Duque de Caxias)

TEC-011 Avaliação de dois métodos de transesterificação na obtenção de biodiesel a partir de diferentes óleos vegetais. Bernal, B. P. N. (SENAI CIMATEC); Anjos, J. P. (SENAI CIMATEC); Guarieiro, L. L. N. (SENAI CIMATEC); Almeida, E. S. (SENAI CIMATEC)

TEO – Química Teórica

TEO-001 On the Mechanism of Eosin Y Catalyzed Diastereoselective [2+2] Cycloadditions of Erlenmeyer Azlactones: a Theoretical Investigation. De Castro, P. P. (UFJF); Marra, I. F. S. (UFJF); De Almeida, A. M. (UFJF); Silva, L. P. (UFJF); Amarante, G. W. (UFJF)

TEO-002 Free energy profile of a model palladium catalyzed nucleophilic fluorination of phenyl bromide. Pliego, J. R. (UFSJ).

TEO-003 Computational studies of alkaline and carboxylesterases hydrolysis reaction of methyl, ethyl and n-propyl benzoates. FOKOUE, H. H. F. (UFRJ); DE SOUZA, H. M. R. D. S. (UFRJ); GELVES, L. G. V. G. (UFRJ); FREITAS, R. H. C. N. F. (UFRJ); GUEDES, J. S. G. (UFRJ); BARREIRO, E. J. B. (UFRJ); LIMA, L. M. L. (UFRJ); SANT'ANNA, C. M. R. S. (UFRJ)

- TEO-004** Ab-initio Study of Catalytic Activity of Two-Dimensional Tungsten Dichalcogenides in CO₂ Reduction. Fonseca, H. A. B. (IQSC-USP)
- TEO-005** Quantum Tunneling in Selenoxide elimination: A DFT study. Porto, C. M. (IQ-UNICAMP); Morgon, N. H. (IQ-UNICAMP)
- TEO-006** Study of Blue CVS dye electrochemical reduction by using Molecular Modeling. Copola, J. P. (UFF); Souza, M. M. (UFF); Yoneda, J. D. (UFF); Carneiro, P. A. (UFF)
- TEO-007** Application of the multireference coupled-cluster method to the reaction $F + H_2O \rightarrow HF + OH$. Aoto, Y. A. (UFABC)
- TEO-008** Theoretical Study of a series of sulfonamide tubulin inhibitors against the growth of *Trypanosoma brucei* (T. brucei). Anunciação, E. L. S. (IFPA); Corrêa, S. M. V. (IFPA); Miranda, R. M. (IFPA)
- TEO-009** Theoretical evaluation of quinoline-phosphoramidate compounds as corrosion inhibitors for low carbon steels. Proença, G. S. (UFF); Romani, P. (UFF); Oliveira, C. J. (UFF); Machado, L. A. (UFF); Baêso, R. M. (Inmetro); Souza, M. C. (UFF); Yoneda, J. (UFF); Pedrosa, L. F. (UFF)
- TEO-010** Computational study of saccharide solvation using minimum-distance distribution functions. Vicente, R. A. (UNICAMP); Martínez, L. (UNICAMP)
- TEO-011** Phenalenone-Type Compounds and Their Activity over *Mycosphaerella fijiensis*: a Theoretical Approach by Density Functional Theory (DFT). Fachini, L. G. (UFPR); Sá, E. L. (UFPR)
- TEO-012** Accurate quantum mechanical simulation of bulk water. Lourenço, M. P. (UFES); Dos Santos, E. C. (UFMG); Pettersson, L. G. M. (SU); Duarte, H. A. (UFMG)
- TEO-013** Estudo por DFT e DFT-DT de estruturas com efeito push-pull e propriedades espectrais para aplicações fotovoltaicas. Carmo, M. E. G. (UFG-Catalão); Romualdo, L. L. (UFG-Catalão)
- TEO-014** Computational study of the performance of glycerol/base system in CO₂ capture. Carneiro, J. W. M. (); Fiorot, R. G. (); Vasconcelos, L. F. (UFF)
- TEO-015** Ab Initio Investigation of Nano-interfaces formed by Fe and (ZrO₂)₁₃ Nanoclusters. Zibordi-Besse, L. (IQSC-USP); Da Silva, J. L. F. (IQSC-USP)
- TEO-016** Estudo teórico de novos complexos com bases de Schiff visando obtenção de altos valores de hiperpolarizabilidade (beta). Kunizaki, F. C. C. (UFG-Catalão); Carmo, M. E. G. (UFG-Catalão); Romualdo, L. L. (UFG-Catalão)
- TEO-017** Theoretical Study of the stereoelectronic interactions that rule Peroxide analogue geometries. Afonso, M. A. S. (UNICAMP); Cormanich, R. A. (UNICAMP)
- TEO-018** Estudo Computacional de Parâmetros de Ressonância Magnética Nuclear de ^{99m}Tecnécio com Potencial Aplicação Radiofarmacêutica. Andrade, T. F. C. B. (UFRJ); Guerra, C. F. (VU.NL); Santos, H. F. (UFJF); Paschoal, D. (UFRJ)
- TEO-019** Non-covalent interactions as a tool for improving the selectivity of the Heck reactions: a DFT study of spiro systems. Menezes da Silva, V. H. (IQ-UNICAMP); de Oliveira, V. C. (IQ-UNICAMP); Correia, C. R. D. (IQ-UNICAMP)
- TEO-020** First-principles Investigation of Structural and Electronic Properties of Solar Cell Materials. Inui, G. K. (IQSC-USP); Besse, R. (IFSC-USP); Da Silva, J. L. F. (IQSC-USP)

A

- A. Vieira, A.; ORG-078
Aaraújo de, J. I. F.; ORG-019
Abatti, M.; ORG-082
Abatti, P. P.; MAT-085
Abram, U.; INO-013
Abreu, B. F.; ORG-037
Abreu, C. B. F. T.; MED-038
Abreu, K. V.; ELE-008
Abreu, L. M.; QPN-008
Abreu, L. S.; QPN-101, QPN-105
Abreu, P. M. B.; QPN-001
Abreu, T. P.; MAT-100
Abreu de, H. A.; INO-075
Adaime, M. B.; AMB-075
Adarme, O. F. H.; TEC-005
Adati, R. D.; INO-009, MAT-025, MAT-067
Addla, D.; ORG-031
Affeldt, R. F.; CAT-039, FOT-002, ORG-083, ORG-161
Afonso, M. A. S.; TEO-017
Afonso, R. J. C. F.; AMB-027
Afonso, R. J. C. F.; ANA-076
Agostinho, S. M. L.; EDU-054
Agudelo, A. J. P.; COL-007
Aguar, A. C. C.; MED-050
Aguar, C. D.; COL-008
Aguar, D. C.; QPN-061
Aguar, G. R.; ORG-142
Aguar, M. C. S.; QPN-103
Aguar, P. F.; ANA-114
Aguar, T. L. C.; MED-032
Aguilar de, A. C.; MAT-044
Aguilar, A. M.; FOT-004, FOT-010, MAT-127, MED-059
Ahmad, A.; ORG-098, ORG-137
Aidar, M. P. M.; QPN-041
Ainstein, L. M.; ANA-004
Akahoshi, L. H.; EDU-058
Akiba, N.; ANA-091
Alarcon, R. T.; QVE-004
Alavarse, A. C.; FIS-011
Alberti, E. R.; EDU-012
Albuquerque, J. F. C.; ORG-164
Albuquerque, L. J. C.; FIS-011
Albuquerque, L. P.; BIO-005
Alcantara, AFC; ORG-180
Alcántara-de la Cruz, R.; AMB-010
Alcántara-Pinto, D. C.; MED-014, MED-022
Aldi, A.; MAT-066
Alexandrino, F.; ANA-096
Allegretti, S. M.; QPN-093
Almeida, A. L.; INO-046
Almeida, C. M.; ORG-043
Almeida, D. C. A. R.; EDU-006
Almeida, D. T.; BEA-011
Almeida, E. S.; TEC-011
Almeida, E. S. A.; ANA-042
Almeida, G. A.; ANA-085
Almeida, G. C.; CAT-036
Almeida, J.; ANA-122
Almeida, J. C.; INO-037
Almeida, J. S. F. D.; MED-009, MED-038
Almeida, L. A.; ORG-006
Almeida, L. S.; ELE-015
Almeida, R. T. R.; BIO-010
Almeida, R. A.; BIO-008
Almeida, R. C.; EDU-056
Almeida, R. C. B.; ORG-126
Almeida, R. G.; ORG-005
Almeida, R. M.; MAT-020
Almeida, T.; ORG-015
Almeida, V. E.; ANA-054
Almeida, V. F.; MAT-021
Almeida, V. G. K.; ANA-074, EDU-056
Almeida de, L. G.; ANA-092
Almeida de, P. S. V. B.; INO-017
Almerindo, G. I.; EDU-051
Almerindo, G. I.; BIO-003, FIS-030
Altmayer, T.; AMB-078
Alvarenga, E. S.; ORG-054
Alvarez, L. X.; ELE-038
Álvarez, N. S.; ORG-010
Alves, A. S.; EDU-063
Alves, B. J.; CAT-004
Alves, C. M. A. C.; BEA-001
Alves, C. N.; BIO-004
Alves, C. R.; ELE-008, ELE-051
Alves, D.; ORG-113
Alves, D. P.; ANA-074
Alves, D. R.; EDU-025
Alves, D. S.; AMB-054
Alves, E. A.; INO-056
Alves, G. C. V.; ORG-058
Alves, J. S. F.; QPN-038
Alves, L.; ANA-116
Alves, O. J. A.; QPN-072
Alves, P. B.; MED-018, MED-034
Alves, R. B.; ORG-022, ORG-050, ORG-093
Alves, R. S.; MAT-109
Alves, S. L. G.; ORG-047
Alves, T. F.; QPN-025
Alves, V. A.; EDU-063
Alves, V. A. A.; ANA-118
Alves, V. N.; ANA-028
Alves, V. N.; ANA-078, ANA-110
Alves, W. A.; FOT-011
Alves, W. A.; FOT-004, FOT-010, MAT-020, MAT-039, MAT-127, MED-059
Alviano, C. S.; MED-034
Alviano, D. S.; MED-034
Amaral, G. S.; AMB-010, QPN-077
Amaral, J. C.; QPN-079
Amaral, M.; QPN-027
Amaral, M. C.; EDU-003
Amaral, P. de A.; ORG-082
Amaral, W.; QPN-096
Amarante, G. W.; ORG-030, TEO-001
Amariz, I. A.; QPN-043
Amaro, L. S.; MED-031
Ambrosio, MALV; QPN-023
Amildon Ricardo, I.; AMB-004
Amorim, A. F. G.; BEA-015
Amorim, L. H.; MAT-137
Amorim, M. R. A.; QPN-018
Amorim, V.; EDU-003
Ana Cristi Basile Dias, A. C. B. D.; ANA-094
Andrade, D. F.; ANA-114
Andrade, E.; AMB-024
Andrade, F. M.; INO-028
Andrade, G. P.; AMB-032
Andrade, J.; ANA-073
Andrade, J. M. A.; CAT-004
Andrade, J. P. C.; QPN-072
Andrade, J. T.; ORG-048
Andrade, L. H.; CAT-025
Andrade, L. H.; ORG-068, ORG-117, ORG-165
Andrade, L. S.; ELE-004
Andrade, M. A.; ELE-030, ELE-034
Andrade, M. V.; EDU-028
Andrade, T. F. C. B.; TEO-018
Andrade, T. J. A.; QPN-064
Andrade de, B. M.; ANA-047
Andrade de, D. F.; ANA-066
Andrade de, E.; AMB-025
Andrade Jr., M. A. S.; FIS-013
André, M.; AMB-040, AMB-042
Andricopulo, A. D.; MED-030, MED-054, MED-055, MED-057, ORG-021
Angiolino, C. F. F.; ORG-106
Anjos, A. A.; INO-099
Anjos, J. P.; TEC-011
Anjos dos, B.; AMB-024
Anjos dos, J. P.; AMB-055
Anjos dos, V. E.; AMB-048
Anschau, K. F.; ANA-019
Antar, G. M.; QPN-004, QPN-080
Antonio, P. V. G.; QPN-036
Antonoli, G.; QPN-052
Antunes, A. M. S.; TEC-001
Anunciação, D. S.; AMB-007, AMB-043
Anunciação, E. L. S.; TEO-008
Aoto, Y. A.; TEO-007
Aqui, G. M. F. V.; ORG-001
Aquino, C. B.; MAT-050
Aquino, F. J. T.; MED-035, MED-048, QPN-023, QPN-073
Aquino, L. G. S. A.; AMB-001
Aquino, P. F.; BIO-008
Aquino, T. M.; MED-015
Arandas, A. M.; FOT-009
Araújo, A. L. S.; ANA-032
Araújo, A. R.; QPN-019
Araújo, B. Q.; ORG-168
Araujo, C. S. T.; ELE-001
Araújo, F. F.; QPN-061
Araújo, I. P.; EDU-018, EDU-072, INO-010
Araújo, L. D.; EDU-049
Araújo, L. G.; QPN-013
Araújo, M. C. U.; ANA-054, ELE-057
Araujo, M. D.; AMB-032
Araújo, M. H.; CAT-027
Araujo, M. H.; INO-050, MAT-021
Araújo, M. H.; MAT-032
Araujo, M. H. A.; MAT-078
Araújo, M. S.; MED-018, MED-034
Araújo, R. J. S.; EDU-025
Araújo, R. N. M.; EDU-041, QPN-033, QPN-037, QPN-039

Araújo, T. P.; CAT-018
 Araújo, W. S.; MAT-081
 Araújo, W. S.; MAT-011
 Araujo, Y. B.; EDU-005
 Araujo de, M. P.; INO-019
 Araújo-Chaves, J. C.; FOT-010
 Arbilla, G.; AMB-040, AMB-042
 Arduini, F.; ELE-027
 Areas, E. S.; INO-077
 Arend, K. A.; HIS002
 Argüello, K. A. B. A.; MED-059
 Armoa, M. H.; MAT-052
 Arpini, B.; AMB-022
 Arpini, B. H.; CAT-038, CAT-040
 Arroio, T. R.; ORG-060
 Arroyo, P. A.; MAT-073
 Assis, A. A.; ORG-048
 Assis, A. F. S.; MAT-041
 Assis, D. A.; ELE-007
 Assis, D. M.; QPN-083
 Assis, D. R.; INO-088
 Assis, M. A. P.; EDU-067
 Assis, N. M.; ANA-006
 Assis, R. N. A.; QPN-026
 Assunção, N. A.; ANA-105
 Athayde, A. E.; QPN-107
 Athayde, G. P. B.; ANA-017
 Aucélio, R. Q.; ANA-092, ANA-122, ELE-052
 Augusti, R.; ANA-077, BEA-016
 Augusto, L. C.; ORG-089
 Augusto de Oliveira Barbosa, L. A. de O. B.;
 ORG-042
 Augusto Ferreira Perez Villar, J. A. F. P. V.;
 ORG-042
 Auras, B. L.; INO-039
 Avelar, J. L. S.; MED-053
 Avelino, L. M.; EDU-013
 Aversa, I. S.; COL-008
 Ávila, B. M. F.; ANA-008
 Ávila, F. do N.; QPN-087
 Ávila, L. A. de; ANA-018
 Ávila-Costa, M.; ELE-003
 Azeredo, J. B.; ORG-144
 Azeredo, J. B.; EDU-030
 Azeredo, M. S.; EDU-056
 Azevedo, A. D. A.; ANA-001
 Azevedo, C. C.; EDU-069
 Azevedo, D. A.; ANA-002, ANA-003,
 ANA-004, ANA-008, ANA-010,
 ANA-071, ANA-072
 Azevedo, E. B.; AMB-029, AMB-067
 Azevedo, E. M.; EDU-053
 Azevedo, L. L.; MED-003
 Azevedo, P. V. N.; CAT-004
 Azzellini, G. C.; FOT-001, FOT-003,
 FOT-007
 Azzoni, A. R.; MAT-006

B

Back, D. F.; INO-092
 Badaró, W. P. D.; INO-031
 Baêso, R. M.; TEO-009
 Baêta, B. E. L.; TEC-005

Bagatin, I. A.; INO-004, INO-015, INO-054,
 INO-098
 Bagnis, D.; MAT-019
 Baia, F. H.; AMB-055
 Baitello, J. B.; QPN-080
 Balbinot, F. P.; ANA-079, BEA-013
 Baldim, J. L.; MED-016, QPN-083
 Baldoqui, D. C.; QPN-078
 Balzer, R.; CAT-003
 Bandeira, P. N.; ELE-002, ORG-019,
 QPN-007, QPN-061, QPN-076
 Bannach, G.; QVE-004
 Baptista, M. S.; MED-040
 Baptistella, G. B.; INO-060
 Barata, P. H. da S.; ORG-094
 Baratto, R. A.; MAT-037
 Barbará, M.; MAT-142
 Barbará, M. A. S. G.; MAT-066
 Barbosa, A. C.; EDU-013
 Barbosa, A. G.; INO-067
 Barbosa, C. S.; MED-019
 Barbosa, E. C. M.; MAT-141
 Barbosa, E. C. M.; CAT-018
 Barbosa, E. F.; ANA-122
 Barbosa, F. H.; MED-035
 Barbosa, H.; QPN-010
 Barbosa, H. P.; MAT-131, MAT-135
 Barbosa, J. L. V.; ANA-045
 Barbosa, J. M. C.; MED-005
 Barbosa, L.; INO-051
 Barbosa, L. A.; MAT-026
 Barbosa, L. F.; QPN-081
 Barbosa, L. S.; CAT-019
 Barbosa, M. C. S.; MED-019
 Barbosa, M. I. F.; INO-028, INO-038
 Barbosa, R. S.; INO-054
 Barbosa, V. E.; EDU-034, INO-064
 Barbosa-Dekker, A. M.; MED-024
 Barboza, R. S.; AMB-073
 Barcellos, I. O.; AMB-083
 Barcellos, I. O. B.; FIS-029
 Barcellos, J. T.; ORG-156
 Barcellos, T.; CAT-028, QPN-052
 Baréa, P.; MED-047, ORG-138
 Barin, J. S.; ANA-024
 Barra, C. M.; ANA-046, ANA-102, ANA-117,
 EDU-069
 Barra, T. A.; ANA-010
 Barraviera, B.; ORG-110
 Barreira, R. Q.; EDU-008
 Barreiro, E. J.; MED-013, MED-053
 Barreiro, E. J. B.; TEO-003
 Barreiros, A. L. B. S.; MED-018
 Barreiros, M. L.; MED-018
 Barrenha, P. I. I.; AMB-067
 Barreto, C. N.; ANA-105
 Barreto, I. A. R.; AMB-006
 Barreto, I. A. R.; AMB-003
 Barreto, J.; FIS-022
 Barreto, L. C. P.; ELE-004
 Barreto, R. S. N.; ORG-032
 Barrios, A. C. M.; ELE-038
 Barros, A. L. C.; AMB-027
 Barros, A. S.; ORG-094

Barros, B. S.; MAT-099
 Barros, C. J. P.; QPN-081
 Barros, C. R.; EDU-046
 Barros, C. S.; ORG-058
 Barros, D. R. P.; QPN-041, QPN-044
 Barros, H. R.; COL-007
 Barros, J. C.; EDU-009
 Barros, J. F. S.; QPN-053
 Barros, M. S.; QPN-057
 Barros, O. S. do R.; CAT-010
 Barros, W. A.; BIO-006
 Barros, W. O.; ANA-048
 Barros, W. P.; INO-093
 Barros, W. P.; INO-005, INO-085
 Barros, W. R. P.; CAT-012
 Barros-Barbosa, A.; ELE-003
 Barrozo, Y. S. N.; QPN-007, QPN-076
 Barth, M. T.; FIS-020
 Barth, M. T.; FIS-011
 Bartilotti Garcia, M.; ANA-123
 Basilio, M. M.; ANA-044
 Bassani, J. C.; CAT-009, ELE-010
 Bassi, M. J.; MAT-019
 Basso, E. A.; ORG-167
 Basting, R. T.; QPN-001
 Bastos, E. L.; FOT-008
 Bastos, K. F.; AMB-003, INO-101
 Bastos, R. B.; ANA-049
 Bataglion, G. A.; AMB-049
 Batalha, P. N.; ORG-118, ORG-119,
 ORG-122
 Bathalha, P. N.; ORG-120
 Batista, A. A.; INO-028, INO-096, MAT-071,
 MAT-093, MAT-095, MAT-104
 Batista, A. D.; AMB-062, ANA-035,
 ANA-038, ANA-067
 Batista, A. O.; EDU-056
 Batista, B. L.; ANA-111
 Batista, B. M.; EDU-027
 Batista, F. H.; ELE-026
 Batista, F. H. F.; ELE-044
 Batista, G. M.; AMB-024, AMB-025,
 AMB-031
 Batista, G. M. F.; ORG-030
 Batista, J. P.; MAT-112
 Batista, M. de P.; ORG-122
 Batista, M. P.; MED-025
 Batista, V. S.; MED-029, MED-041
 Batista Junior, A. C.; ANA-103
 Batistela, V. R.; AMB-037
 Bauab, T. M. B.; QPN-018
 Bauerfeldt, G. F.; ELE-020
 Bauermeister, A.; QPN-032
 Baumann, L.; ANA-045
 Baungarten, P. B.; MAT-044
 Bazon, P. C.; EDU-022
 Beal, R.; ORG-113
 Beato, M. O.; BEA-021
 Beato, T.; QPN-028
 Beatriz, Adilson; QVE-019
 Bechtold, I. H.; MAT-115
 Becker, D.; MAT-060, MAT-088
 Becker, D. B.; MAT-124
 Begnini, I. M.; QPN-096

Bego, A. M.; EDU-006
 Bellan, D. L.; QPN-054
 Bellettini, I. C.; FIS-020
 Bellettini, I. C.; FIS-011
 Belo, E. C. C.; INO-081
 Beltrame, A. C. F.; AMB-070
 Beluomini, M. A.; ELE-035
 Benati, F. R.; ORG-066
 Bender, N. C. T.; FIS-024
 Benite, A. M. C.; EDU-025
 Benite, C. R. M.; EDU-025, EDU-052
 Benkendorf, R.; EDU-038, EDU-040
 Bento, I. X.; ANA-036
 Bento, L. R.; AMB-059
 Bergamini, M. F.; ELE-049
 Beringui, K.; AMB-063
 Beringui de Oliveira da Silva, K.; AMB-079
 Bernal, B. P. N.; TEC-011
 Bernardi, G.; ANA-011
 Bernardino, A. M. R.; ORG-037
 Bernardo, R. A.; ANA-064, ANA-068
 Bernardo-Gusmão, K.; MAT-001
 Bertallo, C. R. S.; ORG-060
 Bertholdo, R.; MAT-047
 Bertoli, A. C.; INO-075
 Bertozzi, J.; ANA-106
 Bertozzi, J.; AMB-070
 Bertran, C. A.; COL-002, FIS-006, MAT-012, MAT-072
 Bessa, I. A. A.; MAT-117
 Besse, R.; TEO-020
 Bevilacqua, A. C.; INO-066
 Bezerra, F. A. S.; BIO-004, QPN-033, QPN-034
 Bezerra, W. A.; INO-007, INO-023
 Bezerra, Y. M. S.; EDU-057
 Bezerra-Souza, A.; QPN-029
 Biaggio, S. R.; ELE-043
 Bianchin, M.; QPN-099
 Biavatti, M. L.; AMB-024, AMB-025
 Biazati, L. B.; CAT-022
 Biazzi, J. C.; COL-004, EDU-060
 Biazotto, J. C.; INO-043, INO-087
 Bibiano, T. A.; ORG-140
 Bichinho, K. M.; ELE-057
 Bignon, L. M. P.; QPN-094
 Bilić, P. N.; ORG-110
 Bim, L. F. B.; INO-006
 Birolli, W. G.; ORG-091
 Biscaia, S. M. P.; QPN-054
 Biscoli, L. O. B.; INO-099
 Bisinoti, M. C.; AMB-056, AMB-057, AMB-059
 Bisognin, D. A.; BEA-001
 Bispo, D. F.; TEC-008
 Bispo, D. F.; ANA-070
 Bispo, M. L. F.; MED-025
 Bispo-Jr, A. G.; MAT-097
 Biswas, A.; ELE-051
 Bitencourt, H. R.; QPN-050
 Bizzi, C. A.; ANA-026, MAT-028
 Blanc, L.; MED-049
 Blanes, L.; ANA-096
 Blank, D. E.; QPN-095
 Boaventura, T. M.; ORG-036
 Boaventura Jr., S.; QPN-093
 Bocchi, N.; ELE-043
 Bock, F. C.; ANA-041
 Boechat, F. C. S.; ORG-120
 Boechat, F. C. S.; ORG-058, ORG-090, ORG-112, ORG-118, ORG-119, ORG-176
 Boechat, F. da C. S.; ORG-122
 Boechat, N.; MED-028, MED-033, MED-040, MED-050, MED-052
 Boechat, V. B.; ORG-033
 Boeira, A. C. S.; ANA-021
 Boeira, E. O.; ORG-041
 Bofinger, M. R.; QVE-009
 Bogado, A. L.; CAT-013
 Böhs, L. M. C.; ORG-153
 Boiça-Junior, A. L.; QPN-103
 Boldrin, M. V.; ANA-123
 Bolzan, R. C.; BEA-001
 Bolzani, V. S.; QPN-019
 Bolzani, V. S.; MED-030, QPN-041, QPN-055, QPN-063
 Bombonato, F. I.; ANA-016, MAT-036
 Bonemann, D. H.; ANA-088
 Bonfim, L.; INO-086
 Bonifácio, V. G.; ELE-001
 Bonomini, T. J.; QPN-092
 Bonturim, E.; MAT-144
 Borba, E. S.; ORG-044
 Bordin, J. R.; MAT-018
 Borges, A. P.; INO-024
 Borges, E. M.; BEA-019
 Borges, F. A.; ANA-027
 Borges, F. H.; MAT-090, MAT-103
 Borges, G. E.; MAT-070
 Borges, G. M.; BIO-001
 BORGES, J. C.; ORG-037
 Borges, K. C. M.; MAT-007
 Borges, K. R.; BIO-006
 Borges, L. C.; QPN-011
 Borges, M. F.; ELE-051
 Borges, M. S.; QVE-012
 Borges, W. S.; QPN-074
 Borghesi, J.; ORG-032
 Bortolot, C. S.; INO-079
 Bortoluzzi, J. H.; ANA-012, CAT-021
 Bosa, G.; INO-095
 Bosi, J. F. L.; TEC-003
 Botas, A. M. P.; INO-035
 Botero, W. B. B.; QPN-018
 Botero, W. G.; AMB-007, FIS-033
 Bottini, R. C. R.; INO-069
 Bozi, N.; QVE-002
 Braga, A. H.; CAT-038
 Braga, G. U. L.; INO-043
 Braga, H. C.; ORG-078, ORG-082
 BRAGA, H. C. B.; ORG-084
 Braga, I. B.; ORG-123
 Bragaia, G. P.; ANA-062
 Bragila, T. A.; MAT-044
 Bragueroli, H. S.; ORG-102
 Brahmachan, G.; MED-015
 Braibante, M. E. F.; EDU-029
 Brandão, G. P.; BEA-002
 Brandão, P.; INO-063
 Brandão, P. F.; ANA-009
 Brandellero, M. V.; AMB-031
 Brandt, J. V.; MAT-121
 Brasil, D. S. B.; QPN-034
 Braun, J. V.; TEC-002
 Braun, R.; ORG-163
 Braz, V. A.; FOT-010
 Braz-Filho, R.; QPN-101, QPN-105
 Bregadiolli, B. A.; ORG-089
 Bregalda, M. B.; INO-070
 Breitenbach, G. L.; MAT-120
 Bressan, G. C.; ORG-040
 Brighente, I. M. C.; MED-057
 Briggmann, M.; EDU-072
 Bringmann, M. B.; EDU-036
 Brites, C. D. S.; MAT-103
 Brito, A. F. S.; QPN-105
 Brito, C. C. S. M.; ANA-103, ANA-120
 Brito, C. F. A.; MED-019
 Brito, C. L.; ELE-047
 Brito, D. R.; QPN-015
 Brito, E. A.; EDU-008
 Brito, H. F.; INO-035, MAT-144
 Brito, J. R.; QPN-004, QPN-029
 Brito, M. R.; ORG-100, ORG-101
 Brito, S. A.; ORG-173
 Brito de, D. R.; QPN-066
 Brocksom, T. J.; ORG-074, ORG-147, ORG-148
 Brondani, D.; ELE-014, ELE-021
 Brondani, P. B.; ORG-034
 Brondani, P. B. B.; CAT-005, ELE-011
 Broterson, Y. B.; CAT-035
 Bruce, T.; QPN-090
 Brugnera, M. F.; INO-016
 Brum, J. O. C.; ORG-051
 Bruneau, C.; CAT-030
 Bruno, L. M.; ORG-156
 Bruns, R. E.; QPN-056
 Buarque, C. D.; ORG-018
 Buarque, C. D.; MAT-035, ORG-077
 Buarque, J. M. M.; MAT-135
 Bueno, H. Q.; EDU-024
 Bueno, J. F.; BEA-006
 Bueno, L. A.; MAT-132
 Bueno, P. C. P.; QPN-030
 Bueno, P. J. B.; AMB-071
 Buffon, E.; ELE-024
 Buhl, B.; BEA-004, QPN-014
 Bukman, L.; AMB-037
 Burtoloso, A. C. B.; ORG-097, ORG-098, ORG-104, ORG-111, ORG-134, ORG-137, ORG-174
 Busarello, P.; MAT-075
 Buss, D.; QPN-090
 Bustamante, L.; ORG-071
 Bustamante, R. A.; ORG-077

C

C.-Carpentero, V.; INO-050
 Cabeza, N. AP. C.; INO-099

Cabral, B. N.; INO-057
 Cabral, D. A.; EDU-037
 Cabral, M. R. P.; QPN-078
 Cabral, T. S.; TEC-007
 Caceres Quijano, M. F.; AMB-079
 Caetano, E. H.; MAT-055
 Caetano, I. K.; AMB-028
 Caetano, J.; MAT-120
 Caetano, J.; ELE-046
 Caetano, W.; AMB-037
 Caires, F. J.; ANA-101, ANA-104, ANA-107, MAT-068
 Caires-Junior, L. C.; ANA-105
 Caiuby, C. A. D.; ORG-104
 Caixeta, F. J.; MAT-090, MAT-103
 Caixeta Barboza, L. C. B.; EDU-017
 Calado, C. R.; MAT-129
 Calado, H. D. R.; ELE-003, MAT-051
 Caldas, L. A.; QPN-049
 Caldato, K.; INO-049, INO-062
 Caleffi, G. S.; ORG-051, ORG-152, ORG-179
 Camara, A. R.; MAT-064
 camara, M. B. P.; ORG-032
 Câmara, V. R. F.; MED-005, MED-006
 Câmara, V. S.; MED-045
 Camargo, E. R.; ANA-018
 Camargo, L. C.; INO-073
 Camargo, P. H. C.; CAT-018, CAT-029, COL-007, MAT-091, MAT-141
 Camargo, T. P.; INO-018, INO-070
 Camargo de, L. C.; INO-071
 Camila S. Dourado, C. S. D.; ANA-094
 Camilo, F. F.; ELE-042, QPN-080
 Camilo, M. T.; EDU-022
 Campedelli, R. R.; ORG-061, ORG-083
 Campos, D. V. B. C.; AMB-065
 Campos, E. A.; INO-063
 Campos, J. B.; CAT-015, CAT-016
 Campos, J. P. S.; QPN-102
 Campos, M. F.; QPN-070
 Campos, M. L. A. M.; AMB-012, AMB-052, AMB-053
 Campos, O. S.; ELE-007
 Campos, R. B.; FIS-015, FIS-017
 Campos, S. D.; INO-063
 Campos, V. R.; ORG-067
 Campos Rubio, J.; MAT-133
 Campovilla, O. C. Jr.; ORG-098
 Campuzano, A. M. G.; MAT-105
 Campuzano, A. M. G.; MAT-125
 Candido, C. C.; INO-028
 Candido, G. A.; ELE-030
 Cândido, G. C.; AMB-085
 Caño, L. M.; ORG-115
 Cantanhêde, W.; INO-047
 Cantanhede Filho, A. J.; QPN-024, QPN-059
 Cantanhede Filho, A. J.; ORG-032
 Canuto, A. V. S.; ANA-046, ANA-102
 Capanema de Oliveira, G. C. de O.; ORG-042
 Capelini, C.; MED-006
 Capitão, R. M.; ORG-126
 Carapelli, R.; ANA-049, ANA-113
 Cararo, J. H.; ORG-082
 Carasek, E.; ANA-011
 Carbonero, E. R.; QPN-015, QPN-054, QPN-066
 Cardoso, A. A.; AMB-074
 Cardoso, A. A.; AMB-064, ANA-009, BEA-020
 Cardoso, A. M. A. C.; HIS002
 Cardoso, C. L.; QPN-058
 Cardoso, E. R.; ORG-043
 Cardoso, E. R. S.; ORG-091
 Cardoso, G. S. R. H.; MED-017
 Cardoso, L. P.; INO-009
 Cardoso, R. M.; ANA-098
 Cardoso, T. M. G.; AMB-076
 Cardoso, V. A.; EDU-047, EDU-057
 Cardozo, T. M.; INO-001
 Carlos, L. D.; INO-035, MAT-097, MAT-103
 Carlos, M. F. L. P.; ELE-020
 Carlos, W. A.; ANA-121
 Carmo, M. E. G.; TEO-013, TEO-016
 Carmo, M. R. B.; QPN-078
 Carmo, P.; ANA-108
 Carneiro, C. E. A.; FIS-002
 Carneiro, C. R. O.; EDU-045, EDU-046, EDU-064
 Carneiro, F. J. C.; QPN-024
 Carneiro, F. J. C.; ORG-032, QPN-059
 Carneiro, J. W. de M.; ORG-027
 Carneiro, J. W. M.; ORG-035, TEO-014
 Carneiro, L. A.; MAT-035
 Carneiro, M. T. W. D.; ANA-017, BEA-002
 Carneiro, P. A.; TEO-006
 Carneiro, P. G.; MAT-026
 Carneiro, R. L.; ORG-110, QPN-103, QVE-001
 Carneiro, V. M. T.; ORG-026, ORG-054
 Caro, M. S. P.; COL-009
 Carpanez, A. G.; ORG-030
 Carregosa, J. C.; ANA-069
 Carreira, A. C.; MAT-139
 Carreiro, A. P.; EDU-056
 Carriço, M. R. S.; QPN-020
 Carvalho, A. C.; QPN-045
 Carvalho, A. C. S.; ANA-107
 Carvalho, A. de S.; MED-036
 Carvalho, A. S.; MED-052
 Carvalho, A. S.; MED-028, MED-050
 Carvalho, A. Z.; ANA-090
 Carvalho, B. S.; ANA-082
 Carvalho, C. L. C.; INO-047
 Carvalho, D. F.; CAT-036
 Carvalho, D. T.; MED-016
 Carvalho, E. G. B.; MED-011, ORG-016
 Carvalho, E. P.; BIO-005
 Carvalho, F. G.; AMB-011
 Carvalho, G. A.; ELE-023
 Carvalho, G. C.; ORG-005
 Carvalho, H. de O.; ORG-094
 Carvalho, H. L.; ORG-094
 Carvalho, J. A.; EDU-046
 Carvalho, J. C. T. de; ORG-094
 Carvalho, J. E.; QPN-001
 Carvalho, L. C.; ANA-058
 Carvalho, L. M. O.; QPN-025
 Carvalho, M. D. P.; MED-042
 Carvalho, M. P.; AMB-055
 Carvalho, P. C.; QPN-001
 Carvalho, P. D.; EDU-033
 Carvalho, R. L.; ORG-005
 Carvalho, S. A.; MED-006
 Carvalho, T. N.; AMB-018, AMB-069, CAT-017
 Carvalho, W. A.; CAT-030, MAT-030
 Carvalho de, M. G.; QPN-005
 Carvalho Júnior, A. R. C.; QPN-024
 Carvalho Rocha, S. C. R.; ORG-042
 Carvalho Teixeira, A. P. C. T.; MAT-078
 Carvalho-Neto, A. G. V.; MAT-004
 Casagrande, G. A.; INO-051
 Casagrande, G. V.; QVE-002
 Casanova, L. M.; MED-042
 Cascarano, M. de M.; AMB-023
 Casellato, A.; INO-030
 Cass, Q. B.; MED-004, QPN-075
 Cassaro, R. A. A.; INO-079
 Cassella, R. J.; ANA-081, ANA-083
 Castelo-Branco, F. S.; MED-040
 Castiblanco, J. E. B.; ANA-069
 Castilho, M. S.; MED-008, MED-010, MED-017, MED-056
 Castilho, R. B.; EDU-015, EDU-049
 Castro, A. A. C.; MAT-131
 Castro, A. C.; MED-051, QPN-020
 Castro, A. S. B.; FIS-012
 Castro, C. E.; MAT-033
 Castro, C. G. M.; QPN-064
 Castro, E. I.; ELE-032
 Castro, E. V. R.; AMB-047, CAT-022
 Castro, E. V. R. de; ANA-056
 Castro, K. A. D. F.; INO-043
 Castro, K. P. R.; CAT-006
 Castro, L.; ANA-027
 Castro, L. F.; CAT-004
 Castro, L. S.; MAT-062
 Castro, M. C. M.; MAT-021
 Castro, M. O.; MAT-048
 Castro, M. T. P. O.; ANA-046
 Castro, N.; FIS-025
 Castro, P. M. A.; EDU-054
 Castro, R. N.; MED-022
 Castro, S. V. F.; ANA-098, ANA-099
 Castro de, E. V. R.; AMB-050
 Castro de, P. P.; ORG-030
 Castro-Gamboa, I.; QPN-091
 Catai, M. A.; AMB-074
 Catalani, L. H.; MAT-139, MAT-140, MAT-143
 Catricala-Fernades, V. H.; ORG-007
 Cauduro, V. H.; ANA-024
 Caumo, S. E.; AMB-041
 Cavada, B. S.; MAT-048
 Cavalcante, S. F. A.; MED-009
 Cavalcante, T. Q.; AMB-026
 Cavalcanti, G. K.; MAT-017
 Cavalcanti, J. C. M.; FIS-033
 Cavalcanti, L. P. de A. N.; QPN-100
 Cavalheiro, A. J.; QPN-053, QPN-091

Cavalheiro, C. C. S.; FOT-009
 Cavalheiro, E. T. G.; MAT-042
 Cebim, M. A.; INO-006, INO-088
 Celestino, T. A. C.; FIS-005
 Centurion, H. A.; CAT-039
 Ceolin, B. C.; ANA-018
 Cerceau, C. I.; QPN-095
 Ceron, J. M.; MAT-035
 Cerqueira, G.; MAT-134
 Cerqueira, S. C. A.; ANA-058, ANA-112
 César-Oliveira, M. A. F.; ORG-169
 Cesca, E. C.; INO-010, INO-072
 Ceschi, M. A.; MED-045
 Cestari, A. R.; COL-005
 Chafran, L. S.; CAT-001
 Chagas, A. L. S.; MED-052
 Chagas, F. O.; ANA-097, FIS-016, QVE-011
 Chagas, M. B.; QPN-038
 Chagas, R. P.; INO-057
 Chagas-Paula, D. A.; MED-016, QPN-083
 CHANG, R.; QPN-073
 Chauque, S.; ELE-016, ELE-030
 Chaves, A. R.; ANA-064, ANA-068
 Chaves, J. C. A.; MED-019
 Chaves, M. H.; ORG-168
 Cheleski, J.; MED-043, MED-044
 Cheng, H. N.; ELE-051
 Chepluki, A.; ORG-078
 CHEPLUKI, A. A. C.; ORG-084
 Chiapetta, S. C.; CAT-004
 Chiavassa, L. D.; ELE-015, ELE-042
 Crispim, P. B. H.; INO-026
 Chung, M. C.; MED-049
 Cipriano, T.; ELE-016
 Cipriano, T. C.; ELE-030, ELE-034
 Cistia, C. N. D.; MED-031
 Cito, A. M. G. L.; QPN-064
 Ciuffi, K. J.; INO-086
 Clemente, M. C. H.; CAT-019
 Clososki, G. C.; ORG-007, ORG-060,
 ORG-072, ORG-080
 Clososki, G. C. C.; ORG-079
 Clososki, G. C.; ORG-133
 Cobel, A. C.; QPN-051
 Coberlini, V. A.; QPN-014
 Cocca, L. H. Z.; INO-066
 Codognoto, L.; ELE-026, ELE-036,
 ELE-044, ELE-048, ELE-053, ELE-055
 Coelho, C. T. P.; QPN-013
 Coelho, E. C.; MAT-071, MAT-104
 Coelho, F.; ORG-088, ORG-106
 Coelho, F. A. S.; ORG-021, ORG-059,
 ORG-085
 Coelho, F. L.; ORG-073, ORG-161
 Coelho, G. A.; BIO-011
 Coelho, L. M.; AMB-005
 Coelho, N. M. M.; ANA-080
 Coelho, R. M.; ANA-061
 Coelho, Y. L.; COL-007
 Colaço, M. V.; INO-102, MAT-013
 Colina Vegas, L. A.; INO-096
 Coltro, W. K. T.; AMB-076, ANA-093
 Comiotto, T.; EDU-038, EDU-040, EDU-070
 Conceição, J. M.; QPN-027
 Conceição, J. V.; TEC-010
 Conceição, V. N.; ANA-017
 Condakes, M. L.; ORG-172
 Conserva, G. A. A.; QPN-010
 Consoni, D. C.; MAT-063
 Constantino, I. C.; AMB-056
 Constantino, V. R. L. C.; MAT-128
 Conti, C.; ORG-106
 Conti, R.; QPN-074
 Copola, J. P.; TEO-006
 Corazza, G.; ANA-011
 Cordeiro, C. S.; ORG-169
 Cordeiro, S. G.; AMB-078
 Córdoba de Torresi, S. I.; ELE-023
 Cormanich, R. A.; TEO-017
 Corona, R. R. B.; ANA-056
 Corona, R. R. B.; AMB-047, AMB-050,
 ANA-050, ANA-055
 Corrêa, A. G.; CAT-035, MED-004,
 ORG-128
 Correa, G. S.; MAT-113
 Corrêa, J. A.; INO-082
 Correa, J.G.S.; QPN-099
 Corrêa, M. C. N.; AMB-030, INO-048
 Corrêa, M. J. C.; EDU-041, QPN-034,
 QPN-037, QPN-039
 Correa, R. J.; MAT-069
 Corrêa, R. S.; INO-028
 Corrêa, S. A. P.; QPN-093
 Corrêa, S. M. V.; TEO-008
 Correia, A. N.; ELE-007
 Correia, C. R. D.; ORG-162
 Correia, C. R. D.; ORG-123, ORG-126,
 ORG-154, TEO-019
 Correia, G. R. B.; ORG-035
 Cossio, F. P.; ORG-152
 Costa, A. B.; ANA-045
 Costa, A. P.; FIS-010
 Costa, A. P. L.; MED-026
 Costa, A. R. P.; ORG-118
 Costa, A. S. P. N.; AMB-007
 Costa, A. T.; ORG-051
 Costa, B. A.; ANA-103, ANA-120
 Costa, B. E. S.; ANA-080, ANA-110
 Costa, C. F.; MED-027
 Costa, C. M. X.; MED-053
 Costa, C. S.; ANA-087
 Costa, D. P.; AMB-021
 Costa, E.; AMB-028
 Costa, E. C.; EDU-028
 Costa, E. V.; MED-018, MED-034, QPN-017
 Costa, F. F.; MED-049
 Costa, G.; ORG-078
 Costa, G. B.; ANA-042, ANA-043, ANA-044,
 ANA-054
 Costa, G. C. C.; ORG-084
 Costa, G. M. G.; ORG-155
 Costa, I. C. M.; QPN-091
 Costa, I. P.; ANA-043
 Costa, I. P.; ANA-044
 Costa, J. C. S.; CAT-006, CAT-034,
 TEC-001
 Costa, J. M. S.; AMB-045
 Costa, K. R.; ANA-089
 Costa, L. C.; MAT-071, MAT-093, MAT-095,
 MAT-104
 Costa, L. D. R.; EDU-015, EDU-049
 Costa, L. G. B. A.; ANA-086
 Costa, L. M.; ANA-077, ANA-082
 Costa, L. N.; CAT-008
 Costa, M.; QPN-107
 Costa, M. B.; MED-011, MED-021,
 ORG-016
 Costa, M. C.; ANA-006
 Costa, M. C. C.; BIO-011
 Costa, M. F.; QPN-035
 Costa, M. L.; AMB-003
 Costa, M. L. A.; MED-019
 Costa, M. S.; MED-048
 Costa, M. S. S. P.; QPN-003
 Costa, N. M.; AMB-009
 Costa, N. P. A. V.; MAT-024
 Costa, P. R. R.; ORG-012, ORG-051,
 ORG-152, ORG-179
 Costa, R. P.; QPN-075
 Costa, S. C.; AMB-060
 Costa, T. G.; MAT-087
 Costa, T. S.; EDU-013, ORG-054
 Costa, V. C. O.; QPN-101, QPN-105
 Costa, V. G.; MAT-017
 Costa, W. B.; QPN-075
 Costa da, B. L.; MAT-133
 Costa da, J. S.; ORG-023
 Costa da, R. P. M.; ANA-066
 Costa da, W. F.; ORG-138
 Costa-Lotufo, L. V.; QPN-031
 Costa-Silva, T. A.; QPN-006, QPN-010,
 QPN-016, QPN-080
 Costódio, P. F. S.; EDU-051
 Cotrim, B. A.; ORG-010, TEC-004
 Couri, S.; BIO-011
 Coutinho, A. R.; QVE-018
 Coutinho, B. A.; CAT-022
 Coutinho, D. M.; ANA-004, ANA-008,
 ANA-010
 Coutinho, J. P.; MED-050
 Couto, G. H.; ORG-013
 Couto, N. A. F.; MAT-057
 Couto, R. T.; MAT-064
 Couto, U. R.; ORG-056
 Coval, D.; MAT-136
 Cózar, A.; ORG-152
 Crispim, G. O.; MAT-122
 Cristani, V.; QVE-019
 Cristiano, R.; MAT-106, ORG-150
 Crocoli, L. C.; ANA-059
 Cruz, A. B.; BIO-003, QPN-096
 CRUZ, G. F. B.; ANA-083
 Cruz, L. A. D. D.; AMB-080
 Cruz, L. B.; BEA-013
 Cruz, L. V.; QPN-013
 Cruz, M. M. C.; INO-099
 Cruz, N. C.; MAT-056
 Cruz, R. A.; QPN-077
 Cruz, R. C. B.; QPN-096
 Cruz, R. P.; EDU-015, EDU-049
 CRUZ, S. L. G. S.; BEA-003
 Cruz Júnior da, J. W.; INO-021

Cubas, A. L. V.; AMB-036
Cunha, A. L. M. C.; ANA-122
Cunha, B. M.; QPN-096
Cunha, C. L.; QPN-036
Cunha, F. A. S.; ANA-033
Cunha, L. C.; QPN-013
CUNHA, L. C. S.; QPN-073
Cunha, L. H. D.; QPN-028
CUNHA, LCS; QPN-023
CUNHA, LM; MAT-089
Cunha, S.; ORG-103
Cunha, S. D.; MED-001
Cunha, V. S.; ANA-096
Cunha, W. R.; QPN-026, QPN-040,
QPN-072
Curti, M. V.; AMB-073
Cury, N. M.; ORG-126
Custódio, T.; MAT-117
Cutolo, L. O.; MAT-091

D

d'Ávila, L. A.; ANA-066
D'Ávila, R. A. P.; EDU-065
Da Costa, J. G. M.; QPN-087
da Costa, J. S.; MED-005, ORG-041
da Costa, L. H.; BIO-003
da Costa, M. L.; AMB-006
da Costa, W. F.; MED-047
Da Fonseca, M. B.; ORG-021
Da Hora, J. P.; MAT-123
da Luz, L. C.; ORG-041
Da Mata, A. F. A.; INO-007
da Rocha, D. R.; ORG-081
Da Rocha, G. O.; AMB-081, ANA-065
da Rocha, N. S.; BEA-006
da Silva, A. B.; BEA-006
Da Silva, A. C.; MAT-134
Da Silva, A. F. R.; BEA-016
da Silva, A. G. M.; ELE-016
da Silva, A. R.; TEC-003
da Silva, C. M.; ORG-062
da Silva, D.; QPN-090
Da Silva, D. S.; MAT-123
da Silva, E. F.; MED-005, MED-006
Da Silva, E. M.; QPN-081
da Silva, F. C.; INO-079, ORG-105
Da Silva, F. E. F.; QPN-087
Da Silva, H. J.; MAT-112
Da Silva, J. L. F.; TEO-015, TEO-020
da Silva, J. P.; INO-092
Da Silva, J. P.; FIS-032
Da Silva, K. B.; QPN-081
da Silva, L. C. L.; EDU-056
Da Silva, L. H. M.; ANA-097, COL-007,
FIS-007, FIS-008, FIS-016, QVE-011
da Silva, L. O.; FIS-010, QPN-037
da Silva, L. R. G.; QPN-075
da Silva, M.; ANA-050
da Silva, M. A.; CAT-021
da Silva, M. A. N.; INO-027
da Silva, M. F. das G. F.; QPN-079
da Silva, M. F. F.; QPN-067
da Silva, M. F. G. F.; QPN-090

da Silva, M. F. G. F.; QPN-075, QPN-103
da Silva, M. S.; ORG-095, QPN-105
da Silva, P. H. L.; FOT-005
da Silva, R. C.; ORG-112
da Silva, R. M. L.; QPN-092
da Silva, R. M. R.; INO-068, INO-085
da Silva, S. S.; ORG-082
Da Silva, S. S. S.; ORG-084
Da Silva, T. L.; ORG-031
da Silva, V. A. F.; CAT-035
da Silva, V. D.; ORG-018
da Silva, V. H. M.; EST-001
da Silva, W. A.; ANA-092
da Silva-Filho, L. C.; ORG-155
Dahwache, T. A. C.; ORG-137
Dal-Pizzol, F.; ORG-082
Dal-Pont, G. C.; ORG-082
Dalalibera, A.; AMB-084
Dalfior, B. M.; ANA-017
Dalla Corte, C. L.; MAT-018
Dallazen, M. C.; BEA-004
Dalmolin, C.; MAT-060, MAT-088
Dalmolin, C. D.; MAT-124
Damasceno, F. D.; ANA-119
Dantas, A. N. S.; ANA-036
Dantas, C. A. G.; QPN-105
Dantas, E. P.; QPN-027
Dantas, G. B. O.; EDU-041
Dantas, M. D. A.; MED-015
Dantas, R. F.; MED-002, MED-032,
MED-045
Dantas, S. E. A.; ANA-042, ANA-043,
ANA-044, ANA-054
Dantas, V. S.; ANA-043, ANA-044
Dantzger, D. R. C.; MED-035
Dantzger, D. R. C.; MED-037, MED-048
Dardenne, L. E.; MED-045
Darvalho, S. A.; MED-005
Das, S.; MED-015
Das Chagas, J. A. O.; MAT-122
Das Chagas, R. P.; CAT-010, INO-007,
INO-023
Davalos, M. R.; INO-064, INO-088
Davols, M. R.; INO-029
de A. Amaral, P.; ORG-078
De Almeida, A. M.; TEO-001
de Almeida, E. T.; INO-031
de Almeida, P. S. V. B.; INO-055
de Almeida, V. G. K.; EDU-065
De Andrade, J. B.; ANA-065
de Andrade, M. A.; ELE-016
de Andrade, V. S. C.; ORG-036
De Angelis, L. D.; ELE-050
de Aquino, S. F.; TEC-005
De Araujo, M. P.; INO-092
de Araújo, T. C.; ANA-111
de Barros, A. L. B.; MED-039
de Barros, M. R.; ELE-028
de Barros, W. A.; BIO-001
De Bona, T. F.; EDU-051
de Boni, L.; INO-066
de Campos, N. R.; INO-068, INO-085
de Carvalho, M. G.; EDU-056
De Castro, A. S. B.; FIS-007, FIS-008

De Castro, D. L.; EDU-001
de Castro, E. V. R.; ANA-055
De Castro, P. P.; TEO-001
de Castro, P. R.; INO-006
de Castro, S. L.; MED-005, MED-006
de Faria, D. C.; QVE-011
de Faria, E. H.; INO-086
de Farias, E. A.; MAT-086
de Fátima, Â.; BIO-001
De Fátima, A.; INO-007
de Figueiredo, C. D. M.; BEA-006
de Freitas, E. M.; BEA-004, QPN-014
de Freitas, R. P.; ORG-050
De Jesus, C. dos S.; MAT-007
De Jesus, D. S.; AMB-038
De Jesus, P. C.; FIS-026
de Lima, H. H. C.; MAT-073
de Lima, P. G.; EDU-034
de Lima-Neto, P.; ELE-007
de Mattos, M. C. S.; ORG-036
de Melo, C. E. A.; FIS-004
de melo, L. C.; INO-055
de Molfetta, F. A.; FIS-010
De Moraes, C. T. H. S.; QPN-081
de Moraes, J.; QPN-060
de Moraes, M. C.; MED-042, ORG-112
De Moura, C. V. R.; CAT-006
De Moura, E. M.; CAT-006
de Oliveira, A. R.; MED-047
de Oliveira, A. R. M.; ORG-065
de Oliveira, A. S.; ORG-057
de Oliveira, A. S. B.; ORG-088
De Oliveira, Alberto; MED-035
de Oliveira, E. C.; ANA-050
de Oliveira, H. P. M.; ELE-044
de Oliveira, J. E. F.; ORG-112
de Oliveira, K. T.; INO-083, ORG-074
De Oliveira, L. H.; AMB-020
de Oliveira, L. S.; ANA-050, ANA-055
de Oliveira, L. V. F.; QPN-080
de Oliveira, V. C.; TEO-019
de Oliveira, V. K.; ANA-096
De Paula, H. M. C.; FIS-007, FIS-008
de Paula, K. A.; INO-083
De Pontes, L. G.; ORG-110
de Quadros, S.; MAT-010
De Sá, D. S.; ORG-077
de Salles, H. D.; ORG-073
De Sousa, S. A. A.; CAT-006
De Souza, A. O.; ANA-088
De Souza, A. S.; MED-055, ORG-175
de Souza, E. M.; FOT-007
De Souza, H. M. R. D. S.; TEO-003
de Souza, M. C. B. V.; ORG-112
de Souza, M. M.; ANA-113
De Souza, M. V. N.; MED-027
De Souza, RM; MAT-089
Debia, N. P.; ORG-113
Decarli, N. O.; MAT-115
Decoté-Ricardo, D.; MED-014, MED-022
Defon, V. M.; INO-051
DeFreitas-Silva, G.; INO-061
del Colle, V.; ELE-023

- Del Colle, V.; FIS-033
 Delavy, V. C. T.; AMB-031
 Delfino, J. R.; ELE-045
 Deliberto, L. A.; ORG-060
 Demarco, M.; AMB-075
 Demos, W.; CAT-031
 Demuner, A. J.; ORG-026, ORG-039, QPN-095
 Denardin, E. L. G.; QPN-020, QPN-088
 Denbinski, L. G.; AMB-020
 Deroco, P. B.; ELE-027
 Deus, T. C.; EDU-020
 Di Bonaventura, G. D. B.; BIO-009
 Di-Medeiros, M. C. B.; QPN-015, QPN-054, QPN-066
 Dias, B. G.; EDU-060, EDU-072
 Dias, B. K. M.; MED-060
 Dias, C.; EDU-051
 Dias, D. F.; MED-016
 Dias, E. C. L. A.; INO-020
 Dias, E. D. S.; QVE-010
 Dias, E. J. S.; QPN-059
 Dias, F. M. F.; MED-035, MED-037, MED-048
 Dias, G. M.; QPN-025, QPN-026
 Dias, J. A.; CAT-001, CAT-019
 Dias, L. P.; QPN-064
 Dias, M. C.; QVE-002
 Dias, M. C. F.; ORG-039
 Dias, M. R. G.; INO-009
 Dias, R. F. C.; MED-035, MED-037, MED-048, QPN-023
 Dias, S. C.; AMB-085
 Dias, S. C. L.; CAT-001, CAT-019
 Dina, L. N. D.; ANA-118
 Dinelli, L. R.; CAT-013
 Dinhani, L. L.; ANA-104
 Diniz, B. P.; EDU-063
 Diniz, M.; MAT-138
 Diniz, M. M.; INO-030
 Diniz, P. H. G.; ANA-042, ANA-054
 Diniz, R.; INO-012
 Diógenes, I. C. N.; INO-091
 Dionisio Calderon, E. R.; AMB-079
 Dionizio, T. P.; INO-030
 Divalpa, M. G. V.; CAT-022
 Dixneuf, P. H.; CAT-030
 Do Nascimento Junior, P. A.; QPN-081
 Dockal, E. R.; INO-021, INO-033
 Dolezal, R.; MED-009
 Domanski, T.; AMB-027
 Domingos, J. B.; CAT-032
 Domingos, J. L. O.; ORG-012, ORG-051, ORG-179
 Domingos da Cruz, L. A.; MAT-026
 Domingues, M. G.; TEC-009
 Domingues, N. L. C.; ORG-138
 Domingues, S. H.; ANA-020, MAT-027, MAT-050, MAT-076, MAT-083
 Domingues, T. F.; QPN-044
 Dominguez Formoso, D. F.; QPN-069
 Dominguez-Valenzuela, J. A.; QPN-077
 Donato, R. M.; MED-023
 Doneda, M.; ANA-024
 Donegatti, T. A.; ANA-005
 Donnici, C. I.; INO-050
 Donnici, C. L.; ELE-003
 Donolato, B. M.; ORG-085
 Donza, M. R. H.; MED-032
 Doriguetto, A. C.; INO-028, INO-038, INO-085
 Doring, T. H.; INO-021
 Dornellas, R. M.; ANA-092
 Dörr, F.; AMB-011
 Dörr, F. A.; AMB-011
 dos Anjos, F. E.; AMB-017
 dos Anjos, F. S. C.; COL-005
 dos Anjos, M. L.; QPN-050
 dos Reis, G. B.; INO-015, ORG-129
 Dos Santos, A. A.; ORG-143
 dos Santos, A. M. P.; AMB-038
 dos Santos, A. S. S.; CAT-021
 dos Santos, C.; ANA-109
 Dos Santos, E. C.; TEO-012
 dos Santos, E. N.; CAT-030
 Dos Santos, G T.; BIO-010
 Dos Santos, L. D.; ORG-110
 dos Santos, L. W.; TEC-006
 Dos Santos, M. M. M.; QPN-039
 dos Santos, N. E.; ELE-038
 Dos Santos, P. A.; INO-007
 Dos Santos, T.; ORG-080
 dos Santos, T. A. R.; CAT-026
 Dos Santos, T. C.; MAT-119
 dos Santos Rosa, D.; MAT-043
 Dourado, A. H. B.; ELE-023, ELE-040, ELE-050
 Dourado, I. L. A.; MAT-140
 Dourado, L.; MAT-133
 Dragunski, D. C.; ELE-046, MAT-120
 Dressler, V. L.; ANA-023
 Dreyer, J. P.; FIS-020
 Druzian, G. T.; ANA-022
 Duan, Ceola; BEA-010
 Duarte, E. A.; EDU-035
 Duarte, E. D. R. S.; EDU-047
 Duarte, E. S. A.; ANA-054
 Duarte, F. A.; BEA-001
 Duarte, F. A.; ANA-019
 Duarte, H. A.; INO-075, TEO-012
 Duarte, L. C.; ANA-093
 Duarte da Silva, G. V. B. M.; ANA-049
 Duarte Figueiredo, M. D. F.; MAT-078
 Ducatti, D. R. B.; ORG-009
 Dulmovits, B. M.; MED-049
 Durango, L. G. C.; QPN-090
 Durigon, M. C. S.; ORG-013
 Dutra, A. J. B.; ANA-081
 Dutra, K. O.; EDU-057
 Dutra, L. A.; ORG-056
 Dutra, M. J.; MED-013
 Duyck, C.; ANA-086
- E**
- Eberlin, M. N.; ORG-106
 Eberlin, M. N.; QPN-097
 Echevarria, A.; ELE-017
 Echevarria, A.; ELE-020, ORG-100, ORG-101
 Echeverrigaray, S.; QPN-052
 Eckersall, P. D.; ORG-110
 Egert, P. E.; MAT-063
 Ehrhardt, A.; BIO-003, EDU-051
 Eiseler, A.; MAT-053
 Ekawa, B.; ANA-107
 Eli, F.; ORG-082
 Elias, A. C.; ANA-099
 Elias, W. C.; ELE-028
 Ellena, J. A.; INO-028, MED-041
 Ely, F.; ORG-078
 Emiliano, H. V.; ORG-146
 Enders, M. S. P.; ANA-019
 Enzirio, M. J.; ORG-076
 Erchenberger, G.; EDU-024
 Erislene S. Almeida, E. S. A.; ANA-094
 Espindola, F. S.; MED-037
 Espíndola, G. C.; TEC-002
 Espinelli Junior, J. B. S.; ANA-049, ANA-113
 Esteves, P. M.; MAT-035
 Estrela, I. O.; MED-001
 Etchegaray, A.; ANA-057, QPN-028
 Ethur, E. M.; AMB-078, BEA-004, QPN-014
 Evangelista, T. C. S.; MED-032, ORG-031
 Ezirio, M. J. A.; AMB-060
- F**
- Fabian, C.; FIS-031
 Fabiana Casarin, F. C.; ANA-094
 Fabris, M.; MED-025
 Facchin, Gianella; INO-092
 Facco, J. T. F.; INO-099
 Fachini, L. G.; TEO-011
 Fadel, V. S.; ORG-130
 Fadini, P. S.; AMB-013
 Fairbanks, J. P. A.; CAT-024
 Faleiros-Santos, M. H.; ORG-092
 Falqueto, J. B.; ELE-043
 Fantinel, M.; ORG-099
 Faria, A. F. M.; MED-046
 Faria, B. M. G.; EDU-025
 FARIA, F. A.; QPN-082
 Faria, M. I. C.; ORG-062
 Faria, P.; MAT-133
 Faria, P. R. S.; EDU-056
 Faria, R. B.; FIS-001
 Faria, R. X.; MED-046, ORG-081
 Farias, A. K. M. C.; MAT-011, MAT-049, MAT-082
 Farias, B. F.; MED-016
 Farias, F. M.; QPN-088
 Farias, N. R.; FIS-026
 Farias, R. L.; MED-041
 Farias, R. R. S.; ORG-168
 Farias de, E. A.; MAT-023
 Farias de, G. R.; MAT-116
 Farias Filho, B. B.; ANA-048
 Faro, L. V.; ORG-058, ORG-090
 Farra, M. D.; ORG-083
 Fatibello-Filho, O.; ELE-027
 Fátima, A.; BIO-006, INO-023, MED-015

Favarin, L. R. V.; INO-051
 Favero, V. F. F.; INO-099
 Feitosa, A. O.; QPN-050
 Feitosa, C. R.; INO-102
 Feitosa, L. M.; MED-033
 Feliciano, J. M. O.; EDU-016
 Felinto, M. C. F. C.; INO-035, MAT-144
 Felisberto, F. K.; QPN-106
 Feller, J. C.; AMB-083
 Fengler, T. A. L.; MAT-051
 Fernandes, A.; ANA-081
 Fernandes, A. A. G.; ORG-136
 Fernandes, C.; MED-039
 Fernandes, C. M.; ELE-038
 Fernandes, C. S.; ORG-167
 Fernandes, D. D. S.; ANA-054
 Fernandes, F. S.; ORG-106
 Fernandes, G. F. S.; MED-049
 Fernandes, G. M.; AMB-062
 Fernandes, G. M.; ANA-038
 Fernandes, J. A. B.; QPN-007, QPN-076
 Fernandes, J. B.; QPN-067, QPN-079
 Fernandes, J. B.; QPN-103
 Fernandes, J. M.; FIS-015
 Fernandes, J. R.; MAT-004
 Fernandes, L. S.; CAT-030, QPN-097
 Fernandes, N. R. C.; AMB-037
 Fernandes, R. P.; ANA-107
 Fernandes, R. P. M.; MED-018
 Fernandes, T. S.; MAT-118, TEC-007
 Fernandes, W. S.; INO-001
 Fernandes da Silva, D.; INO-053
 Fernandes da Silva, M. F.; INO-053
 Fernandes da Silva, M. F. G.; AMB-010
 Fernandez, C.; EDU-054
 Ferrándiz-Saperas, M.; ORG-152
 Ferrão, M. F.; AMB-022, ANA-041
 Ferrari, A. B. S.; QPN-063
 Ferrari, A. C.; ORG-057
 Ferrari, J. L.; MAT-131, MAT-135
 Ferrari, V. C.; MAT-020
 FERRAZ, H. C.; MAT-100
 FERRAZ, I. P. F.; QVE-008
 Ferraz, N.; MAT-138
 Ferraz, R. C.; ORG-120
 Ferreira, A. B. B.; ORG-052
 Ferreira, A. G.; QPN-012
 Ferreira, A. H.; BEA-021
 Ferreira, A. M.; ORG-091
 Ferreira, A. P. G.; MAT-042
 Ferreira, B. B.; ORG-095
 Ferreira, B. S.; ORG-159
 Ferreira, C. H.; MAT-056
 Ferreira, C. R. C.; ANA-034
 Ferreira, C. S.; MED-034
 Ferreira, E. A.; ELE-041, QPN-029
 Ferreira, E. F. B.; MED-036
 FERREIRA, E. I.; ELE-047
 Ferreira, E. J.; QPN-038
 Ferreira, E. M. D.; FIS-020
 Ferreira, F. S.; MAT-016
 Ferreira, G. W.; ANA-106
 Ferreira, G.; EDU-018
 Ferreira, G. B.; EST-001, INO-020
 Ferreira, G. M. D.; COL-003, FIS-005
 Ferreira, I. M.; FOT-009, ORG-091,
 ORG-094, ORG-166, ORG-173
 Ferreira, J. G. L.; CAT-002
 Ferreira, J. H.; ORG-120
 Ferreira, J. M. S.; ORG-048
 Ferreira, J. S.; AMB-013
 Ferreira, L. E. M.; MAT-119
 Ferreira, L. G.; EDU-022
 Ferreira, L. L. G.; MED-055
 Ferreira, L. S.; QPN-038
 Ferreira, L. T.; ANA-104
 Ferreira, M.; FIS-004, MAT-053, ORG-125
 Ferreira, M. F.; MAT-130
 Ferreira, M. J. P.; QPN-062, QPN-102
 Ferreira, M. J. P. F.; QPN-049
 Ferreira, M. L. G.; MED-033
 Ferreira, M. M.; ANA-028
 Ferreira, M. P.; MAT-058
 Ferreira, O. P.; AMB-056, AMB-057,
 AMB-059, MAT-048
 Ferreira, P. G.; ANA-014
 Ferreira, P. H. L.; ELE-055
 Ferreira, R. A. S.; MAT-097, MAT-103
 Ferreira, S. B.; MED-002, MED-032,
 ORG-031
 Ferreira, S. F. A.; COL-001
 Ferreira, S. L. C.; ANA-039
 Ferreira, S. R. A.; ORG-007
 Ferreira, T. A. da S. F.; HIS002
 Ferreira, T. A. M.; MED-017
 Ferreira, T. L.; ELE-044
 Ferreira, V. F.; ANA-014, INO-079,
 MED-046, ORG-067, ORG-105,
 ORG-175
 Ferreira, Y. da S.; QPN-005
 Ferreira da Costa, J. V.; CAT-040
 Ferreira de, L.; MAT-051
 Ferreira Jr, R. S.; ORG-110
 Ferreira Lopes Vilela, A.; QPN-058
 Ferreira Neto, E. P.; MAT-092, MAT-102
 Ferreira Silva, C.; AMB-082
 Fett-Neto, A. G.; QPN-091
 Ficks, E. C. R.; EDU-042
 Fieszt, L.; AMB-024, AMB-025
 Figueira, B. A. M.; AMB-006
 Figueira, B. A. M.; AMB-003, AMB-015,
 AMB-030, INO-048, INO-101
 Figueiredo, A. T.; INO-067
 Figueiredo, C. R.; QPN-004
 Figueiredo, E. C.; ANA-027
 Figueiredo, I. M.; BIO-006, MED-015
 Figueirêdo, I. S.; AMB-055
 Figueiredo, I. S.; BIO-001
 Figueiredo, M. K-K.; TEC-007
 Figueiredo, M. K-K.; TEC-010
 Figueiredo, N. G.; CAT-004
 Filgueiras, C. A. L.; HIS001
 Filgueiras, P. R.; AMB-047, AMB-050,
 ANA-050, ANA-055, ANA-056
 Filho, F. S. M.; ANA-042, ANA-043, ANA-044
 Filho, J. C. D.; CAT-004
 Filho, J. C. S.; MAT-131
 Filho, R. B.; ORG-142
 Filho, R. D. F.; MAT-077
 Filippi, N. G.; COL-009
 Fill, T. P.; QPN-097
 Fiorin, B. C.; ORG-146
 Fiorio, J. L.; CAT-018
 Fiorot, R. G.; ORG-027, ORG-035, TEO-014
 Fischmeister, C.; CAT-030
 Flausino, A. M.; ANA-052
 Florêncio, J.; AMB-012
 Flores, E. L. M.; AMB-038, BEA-003,
 BEA-021
 Flores, É. M. M.; BEA-001
 Flores, E. M. M.; ANA-022, ANA-023,
 ANA-024, ANA-026, MAT-028
 Flumignan, D. L.; ANA-115
 Foglio, M. A.; QPN-001
 Fokoue, H. H. F.; TEO-003
 Fonsaca, J. E. S.; MAT-076
 Fonseca, A.; ANA-037
 Fonseca, E. B.; BEA-006
 Fonseca, H. A. B.; TEO-004
 Fonseca, K. T.; ANA-085
 Fonseca, R. S.; AMB-031
 Fonseca, V. V. P.; FIS-007, FIS-008,
 FIS-012
 Fontanella, G.; QPN-052
 Fontes, C. O.; MAT-072
 Fontes-Sant'Ana, G. C.; BIO-011
 Fontoura, L. A. M.; ORG-014, ORG-071,
 TEC-002, TEC-006
 Forezi, L. S. M.; ORG-067, ORG-175
 Forim, M.; QPN-090
 Forim, M. R.; QPN-067
 Forim, M. R.; QPN-082, QPN-103
 Fornari, E.; QVE-017
 Fornari, M. R.; INO-034
 Fornaro, A.; AMB-033
 Fortes, A. Z. S.; EDU-013
 Fortes, G. A. C.; AMB-021
 Forti, M. C.; AMB-052
 Fostier, A. H.; AMB-008
 Foston, M.; CAT-017
 Fraga, C. A. M.; MED-005
 Fraga, M. A.; AMB-061
 Franca, M. G. A.; QPN-046, QPN-053
 Franca, T. C. C.; MED-009
 França, D.; ANA-004
 França, D.; ANA-008, ANA-010
 França, I. V.; INO-033
 França, L. P.; QPN-005
 França, R. R. F.; MED-040
 França, R. S.; AMB-049
 França, T. C. C.; ORG-051
 França, T. C. C.; INO-045, MED-038
 França de, J. O. C.; CAT-001
 França Martins, F. M.; QPN-009
 Franceschini, S. B.; FIS-031
 Francisco, C. B.; ORG-167
 Francisco, K. C. A.; ANA-009, BEA-020
 Francisco, L. H. C.; MAT-144
 Francisquini, J. A.; BEA-008
 Franco, D. F. P.; MED-003
 Franco, D. V.; ANA-061

Franco, L. S.; MED-013
Franco, S. D.; QPN-102
Franzoi Guenther, F. G.; FIS-027
Fratelli, J. R. F.; MAT-137
Fredericci, C.; MAT-132
Fregolente, L. G.; AMB-057
Freire, E. S.; AMB-043
Freire, R.; QPN-091
Freire de Lima, M. E.; MED-014
Freitas, A. D. L.; MAT-003
Freitas, C. A.; QPN-103
Freitas, C. S.; AMB-062
Freitas, D. V.; ANA-032
Freitas, L. D. S.; QVE-006
Freitas, L. P. B.; EDU-045
Freitas, L. S.; ANA-058, ANA-070, ANA-112, TEC-008
Freitas, M. C. R.; FOT-005
Freitas, M. G.; ANA-076
Freitas, M. M.; QPN-103
Freitas, P. P.; ORG-105
Freitas, R. H. C. N. F.; TEO-003
Freitas, R. P.; ORG-093
Freitas, R. P.; ORG-170
Freitas, W. J. E.; MED-023
Freitas de, E. M.; AMB-078
Freitas de, R. P.; ORG-022
Freits, G. F.; INO-003
Friedrich, L. C.; FIS-024
Frim, K. P. M.; INO-029
Fritsch, L.; ORG-004, ORG-055
Fritzen, D. L.; MAT-066
Frizon, T. E. A.; ORG-078, ORG-082
Frizon, T. E. A. F.; ORG-084
Froes, T. Q.; MED-010, MED-017, MED-056
Frohlich, A. C.; ANA-026
Frojuello, M.; ORG-029
Frota, V. M.; QPN-007, QPN-061, QPN-076
Fruchting, A.; AMB-055
Fuganti, O.; INO-092
Fujiwara, S. T.; MAT-055
Funari, C. S.; QVE-001, QVE-012
Furlong, E. B.; ANA-049
Furniel, L. G.; ORG-097
Furtado, C. A.; MAT-058
Furtado, D. Z. S.; ANA-105
Furtado, R. F.; ELE-008, ELE-051
Furtado, R. X. S.; AMB-029
Fuscaldo, R. S.; ORG-023, ORG-041
Futuro, D. O.; ANA-014, MAT-017, MED-046

G

Gaglieri, C.; QVE-004
Gaia, I. A. T.; INO-024
Galaço, A. R. B. S.; INO-080, INO-089
Galan, A.; ORG-110
Galletto, F.; ORG-078
Galletto, F. Z.; ORG-144
Galletto, F. Z.; ORG-153
Galletto, F. Z. G.; ORG-084
Galhardi, L. C. F.; MED-024
Galhiane, M. S.; MAT-004
Gallardo, H.; MAT-053, MAT-085, MAT-106

Gallimberti, M.; ANA-064
Gallo, R. D. C.; ORG-098
Gallon, M. E.; QPN-048
Galvão, D. S.; MED-001
Galvão, R. M. dos S.; MED-046
Gama, B. T. A. F.; QPN-013
Gama, M. R.; ANA-015
Gamba, L. E. R.; MED-053
Gandi, M. O.; MED-050
Garcia, A. C.; QPN-019
Garcia, C. C.; ANA-006
Garcia, C. R. S.; MED-060
Garcia, F.; MAT-118
Garcia, F. P.; ORG-096
Garcia, M. A. S.; CAT-006, CAT-034
Garcia, T. N.; ELE-040
Garcia, V. L.; QPN-093
García-Lojo, D.; MAT-108
Gariani, R. A.; ORG-130
Gariani, R. A.; FIS-025, ORG-109, ORG-115, ORG-131, ORG-143, ORG-178
Gaspar, A. B.; CAT-004
Gaspar, F. V.; ORG-012, ORG-179
Gatiboni, T. L.; MAT-028
Gatti, F. M.; ELE-015
Gaubeur, I.; ANA-020, ANA-084, ANA-091
Gauze, G. F.; MED-047
Gazolla, M. C.; QPN-042
Gazolla, P. A. R.; ORG-044
Gehrke, V. R.; ANA-018
Gelves, L. G. V.; MED-007
Gelves, L. G. V. G.; TEO-003
Geonmonond, R. S.; CAT-029
Gerbelli, B. B.; FOT-011
Gerbelli, B. B.; MAT-127
Gerent, G. G.; ELE-009
Gerlach, O. M. S.; BIO-003
Gerola, A. P.; ORG-069
Ghavami, K.; ORG-077
Giacomelli, F. C.; FIS-011
Gibin, G. B.; EDU-068
Gierschner, J.; ORG-135
Giertyas, C. J.; CAT-021
Giese, S. O. K.; INO-025, INO-081
Gil, A.; INO-086
Gimba, E. R. P.; ORG-105
Gimenez, V. M. M.; QPN-072
Ginoble Pandoli, O.; ORG-077
Gioda, A.; AMB-014, AMB-063, AMB-079
Giordani, R. B.; QPN-091
Giordano, L.; MAT-061, MAT-066
Giroto, E.; MAT-024, MAT-106
Giuberti, C. S.; MED-039
Giuntini, F.; FOT-011
Giuntini, F.; FOT-004, FOT-010
Gobbo-Neto, L.; QPN-032, QPN-048
Godinho, C. C.; QPN-032
Godinho, M. J.; MAT-007
GODOI, D. R. M.; EDU-006
Godoi, M.; ORG-153
Godoy, C. V.; ANA-052
Godoy, N. V.; MAT-108

Godoy, R. L. de O.; QPN-005
Goelzer, A. K.; BEA-018
Goes, L. F.; EDU-054
Gois, A. R. S.; ANA-058, ANA-112
Gois de, J. S.; ANA-047
Golçalves, A. G.; INO-099
Gollino, G.; QPN-088
Gomes, A. A.; ANA-039, ANA-041
Gomes, A. O.; QVE-018
Gomes, B. A.; QPN-070
Gomes, B. R. S.; AMB-049
Gomes, D. C. C.; INO-032
Gomes, E. L.; INO-015
Gomes, G. A.; QPN-007, QPN-061, QPN-076
Gomes, G. R.; QVE-003
Gomes, H. I. O.; AMB-003, INO-101
Gomes, J. F.; MAT-001
Gomes, J. P. S.; ANA-018
Gomes, M. J. C. G.; ORG-070
Gomes, M. W. L.; ORG-058
Gomes, N.; BEA-007
Gomes, N. F.; QPN-024
Gomes, R. A.; MED-058, QVE-017
Gomes, R. C.; ORG-021
Gomes, R. K. M.; ORG-164
Gomes, R. S. P.; ORG-058
Gomes, W. E.; ANA-057, QPN-028
Gonçalves, A. G.; ORG-009
Gonçalves, B. O.; AMB-023
Gonçalves, B. R.; AMB-004
Gonçalves, D. C. B.; ANA-078
Gonçalves, E. C.; FIS-010, MED-026
Gonçalves, E. K. S.; ORG-043
Gonçalves, E. S.; ORG-177
Gonçalves, I. C.; ANA-035
Gonçalves, J. E.; QPN-022
Gonçalves, J. V. G. S. T.; AMB-077
Gonçalves, K. R.; EDU-062
Gonçalves, L. L.; MED-014
Gonçalves, L. M.; ANA-009
Gonçalves, M.; CAT-020
Gonçalves, M. G. M.; QPN-078
Gonçalves, N.; ELE-044
Gonçalves, N. S.; FIS-018
Gonçalves, P. F. B.; ORG-113
Gonçalves, R. A. C.; QPN-022
Gonçalves, R. F.; MAT-007
Gonçalves, R. F. B.; TEC-009
Gonçalves, R. G. L.; AMB-009
Gonçalves, R. R.; MAT-090, MAT-103
Gonçalves, R. V.; CAT-039
Gonçalves, S. G.; ANA-099
Gonçalves, T. C. R.; ORG-118
Gonçalves, W. B.; BEA-017
Gonzalez, P. H. G.; ELE-008
Gonzalez, R.; CAT-032
Gonzatto, V.; BIO-005
Goulart, E.; ANA-105
Goulart, G.; MAT-133
Goulart, J. S.; EDU-009
Goulart, M. M.; ORG-144
Goulart, M. O. F.; ANA-089

Gouvêa, D. P.; ORG-125
Graça, J. P.; ANA-052
Graceli, J. B.; ANA-087
Graebin, C. S.; ORG-021
Granja, H. S.; ANA-070, TEC-008
Grassi, M. T.; AMB-039
Grecco, S. S.; QPN-060
Greco, S. J.; ORG-027
Gregório, J. R.; MAT-001
Greiner, R.; BEA-011
Grigolo, J.; EDU-051
Grillo, F.; ORG-078
Grillo, F. G.; ORG-084
Grosseli, G. M.; AMB-013
Gruber, J.; BEA-017
Guarieriro, L. L. N.; AMB-055, TEC-011
Guedes, A. P. M.; INO-028
Guedes, G. P.; INO-055
Guedes, G. P.; INO-017, INO-077, INO-079
Guedes, I. A.; MED-045
Guedes, J. S. G.; TEO-003
Guerra, C. C.; ANA-041
Guerra, C. F.; TEO-018
Guerra, M. B. B.; ORG-092
Guerra, W.; INO-037
Guilherme, M. M.; ORG-107
Guilherme, M. R.; INO-044, MAT-073
Guilhon, G. M. S. P.; BIO-004, QPN-033,
QPN-037, QPN-039
Guillemin, N.; ORG-110
Guimarães, D. O.; INO-097
Guimarães, D. S. M.; MED-019
Guimarães, E. G.; QVE-005
Guimarães, L.; MED-019
Guimarães, L. B.; INO-035
Guimarães, L. M. C.; ANA-042, ANA-043,
ANA-044, ANA-054
Guimarães, L. P.; EDU-001
Guimarães, O. M.; EDU-019, EDU-050
Gularte, T. Q.; ORG-039
Gurgel, L. V. A.; TEC-005
Gusmão, A. P.; ELE-046
Guterres, L. R.; ELE-025

H

Haddad, P. S.; MAT-033
Hajjoul, H.; AMB-057
Hallwass, F.; QPN-091
Hattori, Y.; MAT-138
Hatsumura, P. H.; QPN-056
Hauser-Davis, R.; AMB-063
Hauser-Davis, R. A.; AMB-014
Hazra, C.; MAT-107
Heidrich, G. M.; ANA-023
Heineck, R. G.; FIS-030
Helfer, G. A.; ANA-045
Hellinger, R.; EDU-072
Hellinger, R.; EDU-019, EDU-060, FIS-009
Hemmer, J. V.; BIO-003
Henn, A. S.; ANA-023, ANA-026, ANA-079
Hennemann, A. L.; INO-013
Heringer, O. A.; BEA-002
Hernandes, L. R. C.; QPN-006

Hernández, A. H.; AMB-008
Herrera, C. L.; ORG-162
Hespanhol, M. C.; ANA-051, ANA-097,
FIS-016, QVE-011
Hessel, C.; FIS-013
Heuko, J. G.; ORG-009
Hideko Yamanaka, H. Y.; ELE-012
Higashi, B.; QPN-022
Higino, G. S.; ELE-032
Hilario, F. H.; QPN-018
Hioka, N.; AMB-037
Hoehne, L.; AMB-078, BEA-004, QPN-014
Hoffman, J. H.; MAT-063
Hoffmann, K. F.; MED-002
Hoffmann-Campo, C. B.; ANA-052
Holakoei, S.; MAT-019
Holanda, F. H.; ORG-091
Homs, M. S.; CAT-029
Honorio, F. G.; MAT-130
Hoppe, T. D.; ELE-014, ELE-021
Horn, C. F.; CAT-023
Horn Jr., A.; CAT-023
Hornink, M. M.; ORG-117
Horowitz, F.; ELE-022
Horvath, R. O.; QPN-062
Horvatić, A.; ORG-110
Hottz, C. M.; EDU-003
Hudari, F. F.; ELE-054
Hudzinski, A. V.; EDU-043
Huelsmann, R. D.; CAT-037
Hughes, D. L.; INO-060, INO-074
Hung, K.; ORG-172
Huws, S A.; BIO-010

I

Iamamoto, Y.; INO-082
Iamamoto, Y. I.; INO-083
Iglesias, B. A.; INO-012, INO-066
Iglesias, C.; ORG-002
Ignácio, M. P.; EDU-070
Ignatti, G. R. M. P.; ELE-056
Imbroisi Filho, R.; ORG-090
Immich, A. P. S.; MAT-143
Inácio, J. G.; EDU-060, EDU-072
Inácio, K. C.; MAT-004
Inácio, N.; ORG-131
Inoue, B. S.; MAT-098
Inui, G. K.; TEO-020
Ionashiro, M.; ANA-101, ANA-107
Ionta, M.; QPN-062
Iop, G. D.; MAT-028
Iorio de Castro, E. I. C.; BIO-009
Isoppo, V. G.; ORG-163
Itabaiana Júnior, I.; QVE-014
Ito, F. M.; QVE-019
Ito, V. Y.; MED-024
Iulek, J.; BIO-007
Izabella F. Ferreira Domingues, I. F. F. D.;
ANA-094
Izumi, C. M. S.; MAT-036

J

Jacinto, G. S.; FIS-030
Jaconiano, Y. R.; EDU-009
Jafellici Jr, M.; INO-088, MAT-121
Jafellici Jr., M.; MAT-052
Jaimes, R. F. V. V.; EDU-062
Jancke, M.; TEC-006
Janoni, C. R.; AMB-038
Januario, A. H.; QPN-025
Januário, A. H.; QPN-026, QPN-040
Januario, A. H.; QPN-072
Jesus, H. C.; ANA-087
Jesus, N. A. M.; AMB-032
Jesus de, R. M.; AMB-081
Ji, K. N. K.; ORG-067
Jimenez, D. E. Q.; ORG-094
Joly, C. A.; QPN-041
Jordão, A. K.; MED-060
Jordão, A. K.; ORG-024
José Augusto, da Col; BEA-010
Jost, C. L.; ELE-010, ELE-028, MAT-014
Jotta, V. F. M.; ANA-116
Juliana, M. C. B.; MED-006
Julião, M. S. S.; ELE-002
Juliatto, L.; EDU-060, EDU-072
Julve, Miguel; INO-036
Jun, D.; MED-009
Juncques, E. S.; MAT-060, MAT-088
Junior, A. C. B.; ANA-120
Junior, C. C. S.; AMB-058
Júnior, C. S. N.; MED-019
Junior, E. P.; AMB-011
Junior, F. B.; ANA-064
Júnior, F. E. B.; CAT-012
Junior, G. P. B.; BIO-008
Júnior, J. G. S.; FIS-033
Junior, J. M. S.; EST-001
Júnior, J. O. C. S.; QPN-034
Junior, J. S. C.; QPN-064
Júnior, J. W. C.; INO-033
Junior, M. G.; AMB-005
Junior, M. L. L.; BIO-004
Júnior, M. L. L.; FIS-010
Junior, N. F. X.; ELE-020
Junior, P. A. S.; MED-052
Junior, P. A. S.; MED-028
Junior, V. L.; QPN-074
Jurberg, I. D.; ORG-136
Justino, A. B.; MED-037
Juvenato, M. E. M.; BEA-002

K

Kadooca, JY; ORG-180
Kagohara, E; CAT-025
Kaiser, C. R.; MED-032, ORG-031
Kalinke, C.; ELE-049
Kalinke, L. H. G.; INO-032
kamil, K.; MED-009
Kanis, L. A.; MAT-024
Karpfenstein, R.; ANA-075
Kato, L.; QPN-008
Kato, M. J.; QPN-021

Kauffmann, C.; QPN-014
 Keller, M. H.; ORG-061
 Kellner Filho, L. C.; QPN-025
 Kemmerich, M.; AMB-075, ANA-018
 Khalaf, P. I.; FIS-023
 Kist, T. L.; ELE-022
 Klein, V.; EDU-031
 Klein-Júnior, L. C.; QPN-092
 Klimpovuz, C. R.; MAT-067
 Kloss, J. R.; MAT-055
 Kobayashi, T. Y.; MAT-135
 Kobori, M. H.; EDU-068
 Kochany, D.; ORG-132
 Kochevka, D. M.; ORG-169
 Koentopp, A. C.; EDU-055
 Köhler, M. H.; INO-066
 Kolanthai, E.; MAT-139
 Komatsu, J. S.; MAT-030
 Komura, D. L.; QPN-066
 Koolen, H. H. F.; QPN-017, QPN-026
 Korili, S.; INO-086
 Kosctiuk, J. B.; ORG-157
 Kosera, V. S.; MAT-055
 Krama, A. R.; MAT-105, MAT-125
 Kramer, M. G.; INO-092
 Krepsky, L. M.; BEA-019
 Krettli, A. U.; MED-050
 Kreuz, A.; FOT-001, FOT-003, FOT-007
 Krieger, N.; ORG-013
 Krueger, C de M. A.; QPN-092
 Kuca, K.; MED-038
 Kuhn, D.; AMB-078
 Kuleš, J.; ORG-110
 Kummerle, A. E.; INO-055
 Kümmerle, A. E.; INO-017, MED-003,
 MED-031
 Kunicki, L.; EDU-040
 Kunizaki, F. C. C.; TEO-016
 Kupfer, V. L.; INO-044
 Kupfer, V. L.; MAT-073
 Kuster, R. M.; BEA-002, QPN-071

L

Lã, O. R.; ANA-117, EDU-069
 La Porta, F. L. P.; MAT-137
 La Scalea, M. A.; ELE-015, ELE-042,
 ELE-047
 Labaki, H. P.; MAT-090
 Labes, R.; ORG-151
 Labuto, G.; MAT-030
 Lacava, A. B.; CAT-019
 Lacerda, J. L.; ORG-177
 Lacerda, J. W. F.; QPN-104
 Lacerda, P. S.; MED-008
 Lacerda Jr., V.; AMB-050, ORG-001
 Ladeira, P. C. C.; ANA-111
 Lage, A. L. A.; INO-016
 Lage, A. L. A.; INO-011
 Lago, J. H. G.; QPN-083
 Lago, J. H. G.; ORG-044, QPN-004,
 QPN-006, QPN-010, QPN-016,
 QPN-027, QPN-029, QPN-049,
 QPN-060, QPN-080

Lago, R. M.; CAT-007, CAT-027, MAT-114
 Lamarca, R. S.; ANA-040
 Lanaro, C.; MED-049
 Landgraf, F. J. G.; ANA-085
 Lang, E. S.; INO-013
 Langassner, S. M. Z.; QPN-038
 Lange, L. H.; INO-059
 Lanznaster, M.; INO-041
 Larrañaga, O.; ORG-152
 Lataro, B. P.; QPN-028
 Laurenti, M. D.; QPN-029
 Lavorante, A. F.; ANA-032
 Lavra, T. C. C.; AMB-003, AMB-015,
 AMB-030, INO-048, INO-101
 Lazzaris, M. J.; ORG-158
 Leal, C. M.; QPN-070
 Leal, I. C. R.; QVE-014
 Leandro, C. S.; MED-004, QPN-075
 Leão, L. Q. S.; BIO-008
 Leão, M. B.; MAT-018
 Leão, V. A.; AMB-085
 Lebron, Y. A. R.; AMB-018, AMB-069,
 CAT-017
 Leça, R. G. C.; ANA-109
 Ledesma, C. M.; BEA-019
 Lefchak, A. X. F.; INO-049, INO-062
 Leitão, G. G.; QPN-070
 Leitao, G. G. L.; QPN-098
 Leitão, S. G.; QPN-070
 Leitão, S. G. L.; QPN-098
 Leite, B. S.; EDU-004
 Leite, C. M.; INO-028
 Leite, D. C.; ORG-178
 Leite, J. da S. D.; ANA-056
 Leite, J. S. D.; AMB-047, AMB-050,
 ANA-050, ANA-055
 Leite, L. R.; EDU-007
 Leite, O. D.; AMB-038, BEA-003, BEA-021
 Leitemberger, A.; ORG-153
 Leles, M. I. G.; ANA-103, ANA-120
 Lelis, M. F. F.; CAT-022
 Leme, L. B. P.; EDU-050, INO-074
 Leme, L. M.; ANA-052
 Lemes, G. F.; MED-021
 Lemes, L. C.; EDU-063
 Lemos, B. C.; ORG-027
 Lemos, T. L. G.; ORG-142
 Leonel, F. B.; AMB-068
 Leopoldino, E. C.; CAT-039, ORG-069
 Lepri, F. G.; ANA-092
 Ley, S. V.; ORG-151
 Lião, L. M.; QPN-015, QPN-054, QPN-066
 Librelotto, M.; ANA-045
 Lima, A. A. V.; ORG-096
 Lima, A. L.; ELE-036
 Lima, A. M.; ORG-168
 Lima, A. S.; AMB-036
 Lima, C. G. S.; ANA-014
 Lima, D. R.; QPN-047
 Lima, D. R.; QPN-046
 Lima, E. C. D.; AMB-054, COL-001
 Lima, F. A.; ORG-063
 Lima, G. C.; ANA-027
 Lima, G. F.; ANA-027

Lima, H. H. C.; INO-044
 Lima, J. F.; INO-080, MAT-013, MAT-064,
 MAT-096
 Lima, L. C. O.; COL-008
 Lima, L. M.; MED-007, MED-053
 Lima, L. M. L.; TEO-003
 Lima, L. R.; MAT-107
 Lima, M.; EDU-070
 Lima, M. C. F.; QPN-106
 Lima, M. E. F.; MED-020, MED-022
 Lima, M. F.; AMB-023
 Lima, M. J. A.; ANA-095
 Lima, M. L.; ORG-140
 Lima, M. P.; QPN-012
 Lima, P. A. A.; AMB-041
 Lima, R. A.; FOT-008
 Lima, R. L.; QPN-101
 Lima, R. N.; CAT-035
 Lima, S. A. M.; INO-029, MAT-034, MAT-097
 Lima, S. R.; ORG-085
 Lima, T. H. P.; MAT-009
 Lima, T. M.; MAT-119
 Lima, T. R. Q.; EDU-015, EDU-049
 Lima, T. S.; ELE-026, ELE-044
 Lima, W. M.; AMB-021
 Lima de, F. E.; EDU-037
 Lima de, L. R.; MED-036
 Lima Gomes, P. C. F.; ANA-040
 Lima Júnior, J. M.; ANA-020
 Lima Neto, J. L.; AMB-005
 Lima-Neto, B. S.; INO-022, INO-056
 Lindh, J.; MAT-138
 Linhares, R. E. C.; MED-024
 Lins, A. S. M.; MED-005
 Lins, F. S. V.; QPN-105
 Lins, R. F.; QPN-003
 Lira, W. A. S.; MAT-145
 Lisboa, M. T.; ANA-021
 Llanes, L. C.; MED-057
 Lloyd, J.; QPN-044
 Lobato, F. M.; QPN-107
 Lobo, B. A.; CAT-025
 Loeser, T. F. L.; ANA-070
 Loiola, A. R.; MAT-003
 Londero, V. S.; QPN-080
 Longhinotti, E.; INO-091
 Longo Jr., L. S.; ORG-075
 Lopes, A. A.; QPN-079
 Lopes, A. U.; ORG-117
 Lopes, B. R.; MED-004
 Lopes, D. S.; INO-100
 Lopes, F. C.; ORG-054
 Lopes, F. J. L.; QPN-008
 Lopes, J. L.; MED-024
 Lopes, L. C.; MAT-040, MAT-084
 Lopes, L. D.; ORG-064
 Lopes, L. G.; BIO-011
 Lopes, L. G. F.; INO-091
 Lopes, M. V.; BEA-011
 Lopes, N. P.; QPN-030, QPN-031,
 QPN-032, QPN-041, QPN-042,
 QPN-043, QPN-044, QPN-048,
 QPN-084
 Lopes Jr, M. A. A.; CAT-014

Lopes Júnior, M. A. A.; ORG-145
 Lopes Júnior, M. L.; EDU-041
 Lopes Junior, M. L.; QPN-037, QPN-039
 Lorençatto, R.; ANA-086
 Lotufo, L. V. C.; QPN-074
 Loureiro, H. A.; ORG-173
 Lourenço, A. A.; MAT-011, MAT-049, MAT-082
 Lourenço, A. S.; ELE-057
 Lourenço, L.; INO-043
 Lourenço, M. P.; TEO-012
 Louzada, S. H.; EDU-049, EDU-056
 Lube, L. M.; CAT-023
 Lucas, D. R.; QPN-071
 Lucca Jr., E. C.; ORG-123
 Luccas, P. O.; ANA-027
 Lučekci, C. A.; INO-058
 Lúcia Grego Alves, S. L. G. A.; ORG-042
 Luciano, V. A.; MAT-029
 Luckow, A. C. B.; ANA-088
 Lüdtke, D. S.; ORG-113
 Luigi, C. A. R.; EDU-048
 Luiz, E.; INO-040
 Luiz, K. Z.; EDU-062
 Luiz, M. M.; QPN-035
 Luiz, T. S.; INO-045
 Luna, A. S.; ANA-047
 Luna, J. H. M.; QVE-006
 Luz, M. S.; ANA-085

M

M-Souza, C.; INO-050
 M. Mesquita-Velez, A. S.; MED-014
 Macedo, R. C.; ANA-122
 Maceno, N. G.; EDU-055
 Machado, A. C. O.; CAT-004
 Machado, A. E. H.; INO-024
 Machado, D.; INO-015
 Machado, F. P.; ORG-043
 Machado, G.; MAT-059, MAT-099
 Machado, G. S.; ANA-045, EDU-012, INO-084
 Machado, I. P.; MAT-144
 Machado, J. T.; EDU-060, EDU-072
 Machado, L. A.; ELE-041, ORG-015, ORG-114, TEO-009
 Machado, L. S.; ANA-068
 Machado, M. da S.; AMB-025, QPN-092
 Machado, M. L. O.; ANA-091
 Machado, M. S.; AMB-031, QPN-107
 Machado, Marina da S.; AMB-024
 Machado, N.; ORG-017
 Machado, N. S.; QPN-064
 Machado, P. A. C.; ANA-008
 Machado, P. L. O. M.; AMB-065
 Machado, R. G.; AMB-013
 Machado, R. P.; INO-038
 Machado, V. G.; FIS-004, ORG-038
 Machini, M. T.; CAT-024
 Maciel, J. S.; CAT-023
 Maciel, V. E. M.; EDU-003
 Madari, B. E. M.; AMB-065
 Maddock, J. E. L. M.; AMB-065
 Madeira, F. B.; ANA-046
 Madriaga, V. G. C.; MAT-118
 Madureira, L. A. S.; AMB-046
 Maffi, G. M.; CAT-003
 Mafra, G.; ANA-011
 Magalhães, A. B. F. F.; AMB-077
 Magalhães, C. E. C.; MAT-049, MAT-082
 Magalhães, C. E. de C.; MAT-011
 Magalhães, F. E. A.; ORG-019
 Magalhaes, J. A.; ANA-067
 Magalhães, J. L.; INO-047, TEC-001
 Magalhães, L. G.; MED-054, ORG-021, QPN-026, QPN-040
 Magdalena, A. G.; MAT-031
 Mageste, A. B.; COL-003, FIS-005
 Magnago, R. F.; AMB-060
 Magnago, R. F.; AMB-017, MAT-024, MAT-044, ORG-076
 Magnago, R. H.; MAT-063
 Magnani, R. F.; QPN-097
 Maia, A. L. C.; MED-039
 Maia, D. J.; EDU-053
 Maia, L. F. P. G.; AMB-063
 Maia, P. I. S.; INO-024
 Maia, R. A.; MAT-035
 Maia, R. C.; MED-013
 Maia, S. M.; AMB-022
 Maimone, T. J.; ORG-172
 Malachias, A.; MED-039
 Malafaia, C. R. A.; QVE-014
 Maldaner, A. O.; ANA-097
 Malheiros, A.; QPN-092, QPN-107
 Malheiros, R. O.; INO-061
 Malta, L. F. B.; CAT-015, CAT-016, INO-042, MAT-069
 Malta, LFB; MAT-089
 Malta, O. L.; INO-035
 Malvessi, G. S.; ELE-021
 Malvessi, G. S.; ELE-014
 Mamián López, M. B.; ANA-020
 Manarin, F.; MED-044
 Manarin, F. G.; MED-043
 Mancinelli, M. M.; BIO-009
 Mandelli, D.; CAT-030
 Mandle, R. J.; ORG-004, ORG-055
 Mangrich, A. S.; INO-034, MAT-087
 Maniezzo, R. S.; MAT-073
 Mann, M. A.; BEA-004
 Manoel Oliveira Feliciano, J. M. O. F.; EDU-017
 Mantilla, H. D. R.; AMB-009
 Mantovani, A.; AMB-020
 Mantovani, I.; AMB-045
 Marçal, L. L.; ORG-102
 Marcelino, C. P.; ANA-030, BEA-005, BEA-014, BEA-015
 Marcelino, L. V.; QVE-020
 Marchesi, L. F.; ELE-006
 Marchetti Maroneze, C. M. M.; BIO-009
 Marchi, M. I.; BEA-004, QPN-014
 Marchini, F. K.; ANA-096
 Marcolino-Junior, L. H.; ELE-049
 Marçon, H. M.; ORG-029
 Marcondes, M. E. R.; EDU-048
 Marcondes, M. E. R.; EDU-058
 Marcondes, T. H.; ORG-006
 Mariano, T. M.; ELE-035
 Mariano Junior, D. R.; ANA-074, EDU-056
 Maringolo, V.; ANA-090
 Marinho, A. H. O.; AMB-032
 Marinho, A. M. do R.; QPN-051
 Marinho, A. M. R.; QPN-050
 Marinho, J. S.; EDU-066
 Marinho, K. L. L.; AMB-006
 Marinho, K. L. L.; AMB-015, INO-048
 Marinho, M. V.; INO-025, INO-068, INO-081, INO-085
 Marinho, O. R.; ANA-095
 Marinho, P. A.; ANA-097
 Marinho, P. S. B.; QPN-050, QPN-051
 Marinho, S. F. M.; EDU-015
 Maroli, C.; CAT-011
 Marques, A. L. B.; ELE-045
 Marques, C. A.; QVE-010, QVE-020
 Marques, F. A.; ANA-105
 Marques, F. A.; AMB-016, AMB-082, EDU-060, EDU-072, ORG-139
 Marques, I. A.; COL-007
 Marques, J. C.; QPN-059
 Marques, J. J.; QVE-006
 Marques, J. R.; AMB-031
 Marques, L. F.; INO-102
 Marques, M. E. G.; ANA-029
 Marques, M. M.; EST-001
 Marques, M. R. C.; QPN-094
 Marques, M. V.; ORG-124
 Marques, R.; ANA-016
 Marques, R. F. C.; MAT-121
 Marques, V. S.; EDU-015
 Marra, I. F. S.; TEO-001
 Marsaioli, A. J.; QVE-009, QVE-016
 Marson, E. O.; AMB-004
 Marson, G. A.; EDU-005
 Martendal, E.; CAT-037
 Martendal, Edmar; BEA-010
 Martínez, L.; TEO-010
 Martinez, S.; ANA-073, ORG-103
 Martinez, S. T.; ORG-033
 Martínez-Huitile, C. A.; ANA-123
 Martins, B. S.; ORG-113
 Martins, C. H. H.; QPN-073
 Martins, C. H. G.; QPN-023
 Martins, D. C. da S.; CAT-010
 Martins, D. C. S.; INO-016
 Martins, D. C. S.; INO-003, INO-011, INO-014, INO-027
 Martins, D. M.; INO-022
 Martins, F. F.; EDU-053
 Martins, F. T.; INO-025
 Martins, G.; ANA-035
 Martins, G. A. V.; CAT-019
 Martins, J.; MAT-103
 Martins, J. B. L.; FIS-003
 Martins, J. M. A.; AMB-077
 Martins, L. F.; ORG-001
 Martins, L. M.; ORG-089
 Martins, L. Q.; EDU-035
 Martins, L. R.; ORG-114

Martins, M.; ORG-141
 Martins, M. M.; ORG-139
 Martins, M. V. A.; MAT-023, MAT-086
 Martins, R. C. C.; QPN-100
 Martins, S. M.; INO-097
 Martins, V. de C.; QPN-005
 Martins, V. E. X.; QPN-073
 Martins, V. G.; AMB-061
 Martins, V. H. N.; MAT-022
 Martins, V. L.; ELE-019
 Martins, V. L.; ELE-030, ELE-034
 Marto, V. V.; ORG-026
 Martucci, A. M.; BIO-009
 Mascaro, L. H.; MAT-094
 Massaroli, M.; QPN-090
 Massi, A.; ORG-077
 Mateo, C.; QPN-058
 Matias, C. A.; AMB-084
 Matos, A. B. M.; ANA-063
 Matos, A. P.; AMB-036
 Matos, C. F.; MAT-018
 Matos, J. M. E.; CAT-008
 Matos, L. N.; ANA-103, ANA-120
 Mattos, G. F.; TEC-002
 Mattos, M. C. S.; ORG-116
 Mattos, P. A.; QPN-107
 Mattoso, S. H.; ELE-043
 Mauad, C. R.; AMB-077
 Mauro, A. E.; MED-041
 Maximiano, A. P.; ORG-124
 Mazali, I. O.; MAT-016, MAT-108, MAT-109,
 MAT-110, MAT-111
 Mecca, C. Z. P.; ELE-053
 Medeiros, A. D.; EDU-013
 Medeiros, A. R.; ELE-046
 Medeiros, J. B. de; EDU-035
 Medeiros, J. V. S.; QPN-003
 Medeiros, L. S.; QPN-006, QPN-027,
 QPN-045, QPN-062
 Medeiros, M. E.; INO-030
 Medeiros, R. S.; MAT-042
 Medeiros Filho, F. S.; ANA-054
 Medina, A. L.; ANA-021
 Medina, M.; MAT-094
 Medina-Franco, J. L.; MED-030
 Meier, L.; ORG-057
 Meier, M. M.; FIS-021, FIS-025, MAT-098,
 MAT-105, MAT-125
 Meinol, K.; MAT-067
 Meireles, A. M.; CAT-010, INO-011, INO-014
 Meirinho, A. G.; EDU-032, ORG-107
 Melchert, W. R.; ANA-025, ANA-062,
 ANA-121
 Mello, A. L. N.; ORG-090
 Mello, G. A. B.; MAT-057
 Mello, G. B. S.; EDU-065
 Mello, L. S.; INO-021, QPN-015
 Mello, M. V. P.; INO-041
 Mello, P. A.; ANA-007, ANA-022, ANA-023,
 ANA-024, MAT-028
 Mello, P. de A.; EDU-031
 Melloti, M.; INO-090
 Melloti, M.; INO-065
 Melo, A. A. A.; ELE-008
 Melo, A. M. A.; ELE-051
 Melo, A. M. D.; EDU-013
 Melo, C. A.; AMB-059
 Melo, F. H. M.; QPN-102
 Melo, I. E. M. S.; CAT-006
 Melo, I. K. L.; FIS-033
 Melo, J. I. M.; QPN-101
 Melo, J. O. F.; BEA-016
 Melo, J. T.; EDU-064
 Melo, L. B.; INO-086
 Melo, L. E. S.; QPN-012
 Melo, M. O.; AMB-026
 Melo, P. M.; AMB-058
 Melo, R. S.; INO-097
 Melo, T. N.; MED-053
 Melo, T. R. F.; MED-049
 Melo, U. S.; ANA-105
 Mendes, D.; AMB-042
 Mendes, L. C.; MAT-136
 Mendes, L. G. E. S.; MAT-022
 Mendes, M. S.; MED-017
 Mendes, R. K.; ANA-057
 Mendes, R. K.; QPN-028
 Mendes, S. M.; ELE-022
 Mendes, S. R.; EDU-032, ORG-095,
 ORG-107, ORG-109, ORG-115,
 ORG-131, ORG-158
 Mendes, T. A. O.; ORG-039
 Mendonca, P. S.; QPN-006
 Mendonça, B. A. B.; MAT-044
 Mendonça, F. G.; MAT-114, MAT-116
 Mendonça, J. S.; MED-050
 Mendonça, L. da S.; QPN-007
 Mendonça, L. S.; QPN-076
 Mendonça, M. L. T. G.; EDU-015, EDU-049
 Mendonça, S. C.; QPN-070
 Mendonça, S. C. M.; QPN-098
 Mendonça, T. A. P.; CAT-020
 Meneghetti, M. R.; CAT-021
 Meneghetti, S. M. P.; CAT-021
 Menezes, B. A. T.; MAT-013, MAT-096
 Menezes, I. R. S.; MAT-114
 Menezes, J. R.; ORG-144
 Menezes, L. B.; INO-066
 Menezes, L. R. A.; FIS-015
 Menezes da Silva, V. H.; TEO-019
 Menezes de, L. C. W.; MAT-019
 Menozzi, C. A. C.; MED-040
 Mercury, J. M. R.; AMB-015, AMB-030,
 INO-048, INO-101
 Merib, J.; ANA-011
 Merizio, L. G.; MAT-144
 Merlo, A. A.; ORG-004, ORG-053,
 ORG-055, ORG-064
 Mertz-Henning, L. M.; QPN-030
 Mesko, M. F.; ANA-007, ANA-079, BEA-013
 Mesquita, J. P.; MAT-130
 Mesquita, N. A. S.; EDU-010, EDU-020
 Mesquita, T. L.; AMB-073
 Messias, M. S.; ANA-119
 Metwally, K.; MED-010
 Meurer, L.; INO-008, MAT-087
 Meyre-Silva, C.; QPN-107
 Mezalira, D. Z.; CAT-009, CAT-011, ELE-010
 Michel, A. R.; ORG-069
 Michel, R. C.; EDU-009
 Michels, M.; ORG-082
 Miglino, M. A.; ORG-032
 Mignoni, M. L.; QVE-014
 Miguel, E. C.; MAT-048
 Miguel, F. H. C.; ELE-037
 Miguel, T. B. A. R.; MAT-048
 Miguel, T. M.; FIS-029
 Mihranyan, A.; MAT-138
 Milagre, C. D. F.; ORG-002
 Milagre, H. M. S.; ORG-006
 Milagre, L. E.; MAT-021
 Minatelli, D. F.; MAT-105
 Miranda, F. da S.; FOT-005
 Miranda, F. S.; FOT-006, INO-045
 Miranda, J. L.; AMB-044, MAT-100,
 QVE-015
 Miranda, P. B.; FIS-019
 Miranda, R. M.; EDU-066, TEO-008
 Missina, J. N.; INO-074
 Mitsuhara, A. T.; MAT-092, MAT-102
 Mittersteiner, M.; FIS-026
 Mizobuchi, E. F.; ORG-111
 Mo, L. C. N.; MAT-122
 Moarais, P. A. B.; QPN-074
 Modesto, H. R.; MAT-030
 Modesto, L. A. M.; ANA-115
 Moecke, E. H. S.; AMB-036
 Mohalle, N. D. S.; MAT-002
 Moisés, M. P.; MAT-073
 Moita, B. S.; MED-053
 Moita, E. C. dos S.; QPN-007
 Moita, E. C. S.; QPN-061
 Molfetta, F. A.; MED-026
 Molina, E. F.; AMB-032
 Molon, V. B.; ANA-059
 Monfardini, J. D.; QPN-019
 Montanari, C. A.; MED-004
 Monte, F. J. Q.; ORG-142
 Monteiro, F.; AMB-063
 Monteiro, H. P.; ORG-049
 Monteiro, M. R.; ANA-115
 Monteiro, R. S.; CAT-036
 Monteiro Oliveira, Y. C.; MED-021
 Moraes, A. M.; ORG-047
 Moraes, A. S.; AMB-049
 Moraes, B. M.; AMB-024, AMB-025
 Moraes, B. R.; MAT-036
 Moraes, C. A. F.; QPN-065
 Moraes, L. A. F.; MED-044
 Moraes, M. C.; AMB-035, ANA-014,
 BIO-002, MED-051, ORG-118
 Moraes, M. G.; ORG-105
 Moraes, M. I.; ORG-002
 Moraes, P. M.; QVE-015
 Morais, A. A. A.; EDU-025
 Morais, E. S.; ORG-091
 Morais, J. G.; ORG-020, ORG-025,
 ORG-028
 Morais, S. A. L. DE; QPN-023, QPN-073
 Moreau, P. S.; COL-007
 Moreira, A. B.; AMB-056, AMB-057,
 AMB-059

Moreira, C. S.; ORG-105
 Moreira, D. E. B.; MAT-096
 Moreira, D. L.; QPN-002
 Moreira, E. A.; QPN-031
 Moreira, E. T. D.; ELE-057
 Moreira, J. S. de A.; EDU-064
 Moreira, L. F. P. P.; ELE-024
 Moreira, M. B.; MED-041
 Moreira, M. P.; QPN-008
 Moreira, N. M.; ORG-128
 Moreira, N. S.; ANA-053
 Moreira, R. P.; MAT-144
 Moreira, T. V.; EDU-067
 Moreira, V. R.; AMB-018, AMB-069, CAT-017
 Morelli, D. C.; AMB-046
 Morello, L. G.; ANA-096
 Moreno, R. P.; EDU-047
 Moreno, V. F.; ORG-086, ORG-155
 Morgon, N. H.; TEO-005
 Morinikeji, O. A.; AMB-041
 Moro, A. V.; ORG-041, ORG-163
 Morro, F. G.; AMB-002
 Moscardi, A. P. Z.; ELE-049
 Moscone, D.; ELE-027
 Mota, C. J. A.; CAT-036, MAT-122
 Mota, E. R.; AMB-081
 Mota, L. S. O.; AMB-035
 Motheo, A. J.; ELE-005
 Mounier, S.; AMB-057
 Moura, A.; ANA-104, MAT-068
 Moura, F. C. C.; AMB-071, CAT-026
 Moura, F. S.; INO-030
 Moura, J. A.; QVE-018
 Moura, L. C.; MAT-100, QVE-015
 Moura, M. S.; ORG-171, QPN-104
 Moura, P. R. G.; QPN-071
 Moura de, C. V. R.; CAT-034
 Moura de, E. M.; CAT-034
 Moura Neto, E.; QPN-003
 Mourão, H. A. J. L.; MAT-130
 Moya, H. D.; ANA-030
 Moya, H. D.; ANA-029, ANA-109, BEA-005, BEA-014, BEA-015
 Mrjajac, V.; ORG-110
 Müller, A. F. F.; QPN-092
 Müller, A. V.; ORG-148
 Muller, E. I.; ANA-019
 Munhão, V. A. S.; QPN-096
 Munhos, R. L.; ELE-023
 Munin, N. C. G.; AMB-068
 Munoz, R. A. A.; ANA-098, ANA-099, ELE-031
 Murie, V. E.; ORG-072, ORG-080
 Murie, V. E.; ORG-133
 Murta, S. M. F.; MED-040
 Musilek, K.; MED-009
 Mutti, A. M. G.; MAT-034

N

Naal, R. M. Z. G.; ORG-060
 Naal, Z.; ORG-060
 Nascimento, A. L. C. S.; ANA-101

Nadur, N. F.; MED-003
 Nagaoka, D. A.; MAT-083
 Naidek, K. P.; INO-073
 Naidek, K. P.; EDU-023, EDU-059, INO-071
 Naidek, N.; MAT-009, MAT-079
 Nájera, C.; ORG-152
 Nakagaki, S.; INO-078, INO-084, INO-095
 Nakamura, C. V.; ORG-096
 Nakamura, R.; ELE-005
 Nakazato, G.; MED-025
 Nalepa, K. T.; EDU-051
 Nalin, M.; ANA-040
 Nandi, L. G.; FIS-020
 Nantes, I. L.; FOT-011
 Nantes, I. L.; MED-059
 Nantes-Cardoso, I. L.; FOT-010
 Nasario, F. D.; QVE-016
 Nascimento, A. L. C. S.; ANA-107
 Nascimento, C. C.; QPN-012
 Nascimento, E. A. do; QPN-073
 Nascimento, E. O. O.; ANA-011
 Nascimento, F. W. M.; QPN-046
 Nascimento, I. R.; QPN-035, QPN-036
 Nascimento, J. A. A.; AMB-077
 Nascimento, K. S.; MAT-048
 Nascimento, L. S.; QPN-106
 Nascimento, M. E. C. V.; ANA-119
 Nascimento, M. M.; ANA-065
 Nascimento, M. P.; ANA-016
 Nascimento, M. S.; ANA-022
 Nascimento, M. S. S.; MED-005
 Nascimento, N. R. F.; INO-091
 Nascimento, R. M.; ANA-060
 Nascimento, R. R. C.; EDU-008
 Nascimento, R. S.; AMB-006, AMB-015, AMB-030, INO-048
 Nascimento, T. S.; ORG-103
 Nascimento, V.; MAT-118
 Nascimento, V. R.; ORG-068
 Nascimento, Y. M.; QPN-101, QPN-105
 Nascimento do, F. F. D.; BEA-005
 Nascimento do, G. M.; MAT-116
 Nascimento do, M. C. L.; ANA-047
 Nascimento-Júnior, N. M.; MED-029
 Nascimento-Júnior, N. M.; MED-041
 Nassar, E. J.; MAT-112
 Navarro, M.; ANA-032
 Navarro, M. V. A. S.; CAT-025
 Neiva, E. G. C.; MAT-038, MAT-075
 Nepomuceno, A. L.; QPN-030
 Neta, D. R. S.; EDU-013
 Neto, A. C.; ORG-001
 Neto, A. J. S.; CAT-021
 Neto, A. M. M.; ORG-096
 Neto, B. A. D.; ORG-011
 Neto, E. T.; MAT-111
 Neto, F. C. S.; EDU-008
 Neto, G. F. S.; ANA-037
 Neto, J. B. F.; ANA-085
 Neto, J. G. V.; ANA-042, ANA-044, ANA-054
 Neto, J. L. A.; AMB-064
 Neto, J. M. B.; AMB-044
 Neto, R. N.; MAT-041, QPN-011

Netto, A. V. G.; MED-041
 Neumann, I. C.; QPN-055
 Neves, A.; INO-039, INO-058
 Neves, A. P.; INO-017, INO-055
 Neves, E. S.; CAT-023
 Neves, J. C.; MAT-002
 Neves, V. A.; CAT-016
 Neves Silva, K. M. M.; MAT-133
 Neves-Garcia, T.; CAT-033
 Nguyen, H. H.; INO-013
 Nicoletti, C. R.; FIS-004
 Nicoletti, C. D.; MED-046
 Nicolini, J.; FIS-031, FIS-032
 Nicolini, K. P.; FIS-031, FIS-032
 Nikolaou, S.; INO-026
 Niño, O. M. S.; ANA-087
 Nishida, E. N.; CAT-039
 Nishimura, R. H. V.; ORG-080
 Nishimura, R. H. V.; ORG-133
 Nóbrega, J. A.; INO-096
 Nóbrega, L. N. N.; EDU-052
 Noda, L.; ELE-044
 Noda, L. K.; FIS-018, MAT-070
 Nogueira, A. B.; ANA-057
 Nogueira, A. F.; MAT-101
 Nogueira, M. O. T.; INO-045
 Nogueira, R. F. P.; AMB-009
 Nonaka, L. H.; MAT-126
 Noronha, G. T.; QPN-011
 Noronha, L. L.; ANA-014
 Noronha Jr, F. R. C.; MED-002
 Nosedá, M. D.; ORG-009
 Nosedá, M. E. D.; ORG-009
 Nossol, E.; ANA-067
 Novaes, H. B.; ANA-114
 Novaes, L. F. T.; ORG-172
 Novais, A. R.; QVE-019
 Novais, L. M. R.; EDU-002
 Novak, M. A.; INO-079
 Novo, D. L. R.; ANA-007, ANA-079
 Nudi, A. H.; AMB-014
 Nunes, A. M.; ANA-088
 Nunes, C. S.; BIO-006
 Nunes, E. O.; ANA-052, QPN-063
 Nunes, F. N.; ORG-084
 Nunes, G. G.; INO-060, INO-069, INO-074
 Nunes, R. J.; MED-057
 Nunes, R. S.; MAT-030
 Nunes, T. R.; MED-016
 Nunes, V. O.; ANA-072
 Nunes, V. O.; ANA-003
 Nunes, W. D. G.; ANA-101, ANA-107
 Nunomura, R. C. S.; BIO-008

O

Obana, T. T.; ELE-019
 Oka, T. N.; EDU-012
 Oliva, G.; MED-054
 Oliveira, A.; QPN-023
 Oliveira, A. B.; MED-041
 Oliveira, A. G. S.; ANA-048
 Oliveira, A. J. B.; QPN-022
 Oliveira, A. P.; QPN-043

Oliveira, A. R. M.; ORG-096
Oliveira, A. R. M.; ORG-132
Oliveira, A. R. S.; ORG-169
Oliveira, A. S.; MED-057
Oliveira, A. S.; QPN-003
Oliveira, B.; BEA-007
Oliveira, B. L.; ORG-132
Oliveira, B. R. M.; EDU-023, EDU-038, EDU-040, EDU-059
Oliveira, C. J.; TEO-009
Oliveira, C. J.; ORG-015
Oliveira, C. J. de; ORG-114
Oliveira, C. M.; QPN-019
Oliveira, C. M. A.; QPN-008
Oliveira, C. S.; MAT-110, MAT-111
Oliveira, D. C. B.; EDU-014
Oliveira, D. F.; ANA-006
Oliveira, D. G.; QPN-034
Oliveira, D. G.; BIO-004, FIS-010, QPN-033
Oliveira, D. M. de; ORG-071
Oliveira, E. A.; QPN-016
Oliveira, E. B.; EDU-008
Oliveira, E. S.; QVE-019
Oliveira, G. B.; EDU-040
Oliveira, G. C. C. A.; MAT-145
Oliveira, G. D. M.; ANA-013
Oliveira, G. H. C.; ORG-011
Oliveira, H. P. M.; ELE-055
Oliveira, H. S.; MAT-040
Oliveira, I. K. P.; AMB-028
Oliveira, I. M.; MED-043
Oliveira, I. T. R.; QPN-094, QPN-100
Oliveira, J. M.; QPN-019
Oliveira, J. M.; CAT-006
Oliveira, J. P. C.; MAT-023
Oliveira, J. P. de C.; MAT-086
Oliveira, K. E. C.; QPN-011
Oliveira, L. A.; EDU-022
Oliveira, L. B.; BEA-005, BEA-014
Oliveira, L. C. S.; QVE-019
Oliveira, L. F.; AMB-085
Oliveira, L. F. C.; BEA-008
Oliveira, L. G.; MED-033
Oliveira, L. L. F.; MAT-071, MAT-093, MAT-095, MAT-104
Oliveira, L. M.; TEC-010
Oliveira, L. S.; MAT-131, QPN-034
Oliveira, L. S. de; ANA-056
Oliveira, M. A. L.; ANA-016
Oliveira, M. C.; BEA-007
Oliveira, M. D. A.; QPN-064
Oliveira, M. E.; QVE-012
Oliveira, M. F.; ANA-052
Oliveira, M. J.; ANA-033
Oliveira, M. M.; MAT-025, MAT-067
Oliveira, M. N. N.; ANA-060
Oliveira, M. R. F.; ELE-051
Oliveira, M. R. F.; ELE-008
Oliveira, M. S. G.; EDU-025
Oliveira, M. Z.; MAT-059
Oliveira, N. A. P.; MAT-058
Oliveira, O. N.; INO-019
Oliveira, P. C. O.; AMB-034

Oliveira, P. V.; ELE-023
Oliveira, R. L.; ANA-087
Oliveira, R. N.; QPN-017, QPN-093
Oliveira, R. S.; QPN-015, QPN-054
Oliveira, R. V.; QPN-067
Oliveira, R. V.; ANA-105
Oliveira, SM; QPN-099
Oliveira, V. E.; EDU-003
Oliveira, V. G.; ORG-119, ORG-176
Oliveira, W. L.; MAT-130
Oliveira, W. X. C.; INO-036, INO-068, MAT-101
Oliveira Barcellos, O. B.; FIS-027
Oliveira de, A. R.; ORG-138
Oliveira de, C. K. B. Q. M.; MAT-019
Oliveira de, G. F.; ELE-054
Oliveira de, K. T.; ORG-147, ORG-148
Oliveira de, L. S.; AMB-050
Oliveira de, R. S.; ORG-166
Oliveira Neto, J. R.; QPN-013
Omori, A. T.; ORG-017
Onésio Ferreira Filho, A.; BEA-007
Ongaratto, D. P.; TEC-002
Orejon, K. L. R.; QVE-016
Ornellas, J. F.; EDU-016
Orsato, A.; MED-024, ORG-066
Orsi, C.; EDU-023
Orth, E. S.; CAT-002, FIS-009, FIS-014, FIS-017, MAT-009, MAT-054, MAT-076, MAT-079, ORG-087
Oshiro, P. B.; ORG-089
Ovalle, S.; MAT-053
Oyebayo, O. O.; AMB-041

P

Pacheco, F. S.; AMB-052
Pacheco, K. R. M.; MAT-019
Pacheco, P. A. F.; ORG-081
Pacheco, S.; QPN-005
Pacheco, W. F.; ANA-092
Padiilha, H. A.; QPN-088
Paes, S. S.; BIO-004
Paes, S. S.; EDU-041, FIS-010, QPN-033, QPN-034, QPN-037
Paim, A. P. S.; ANA-032
Paiva, A. S.; QPN-038
Paiva, C. F.; QPN-047
Paiva, C. F.; QPN-046
Paiva, J. C.; MAT-132
Paiva, M. F.; CAT-001
Paiva, R. K. C.; ORG-011
Paiva, V. A. B.; AMB-004
Paixão, D. B.; ORG-073
Paixão, I. C. N. P.; ORG-058
Paixão, M. W.; CAT-035
Palomino-Salcedo, D. L.; MED-054
Pamplona, S. G. S. R.; QPN-011
Panero, F. S.; EDU-047
Paniagua, C. E. S.; AMB-004
Paniz, J. N. G.; ANA-026
Pansarin, E. R.; QPN-032
Papai, R.; ANA-085
Papai, R.; ANA-084

Papardis, N. F. S.; ORG-174
Pappis, C.; ANA-045
Paqui, M. S. S.; INO-052
Paranhos, B. A.; QVE-014
Pardinho, R. B.; BEA-001
Parma, G. O. C.; MAT-044
Parra, Y. J.; AMB-041
Paschoal, D.; TEO-018
Paschoal, D. F. S.; ORG-145
Pasqualotto Severino, P. S.; QPN-009
Pasquini, C.; ANA-051
Passero, L. F. D.; QPN-029
Passos, C. G.; EDU-027
Pastorelli, M. N.; INO-076
Pastoriza-Santos, I.; MAT-108
Pastre, J. C.; ORG-029, ORG-162, QVE-003
Patrocínio, A. O. T.; INO-024
Patto, B. L.; AMB-018, AMB-069, CAT-017
Paula, C. E. R.; AMB-073
Paula, H. M. C.; FIS-012
Paula, I. L.; BEA-008
PAULA, P. L.; BEA-003
Paula, R. S. G.; EDU-052
Paula de, N. T. G.; ANA-032
Pauletti, G. F.; QPN-052
Pauletti, P. M.; QPN-026, QPN-040, QPN-072
Pauli, F. P.; MED-046
Paulino, A. T.; AMB-072, AMB-084, FIS-034
Paulino, R. P.; ORG-022
Paulino Neto, J.; BEA-007
Pavan, F. R.; INO-037
Pavan, L. P.; ORG-064
Paz, E. C.; ELE-026
Paz, I. A.; INO-091
Paz, W. H. P.; QPN-017
Pazinato, M. S.; EDU-027
Pedreira, J. G. B.; MED-013
Pedro, R. O.; FIS-019
Pedrosa, L. F.; ELE-041, ORG-015, ORG-114, TEO-009
Pedroso, R. C. N.; QPN-025, QPN-040
Pedrotti, J. J.; ELE-032
Pedrotti, J. J. P.; BIO-009
Pedrotti, M. F.; ANA-026
Pedrozo, M. J.; ELE-052
Peixoto, B. S.; AMB-035
Pelín, J. N. B. D.; MAT-127
Pelissari, J. H.; QVE-001
Pelisser, F.; ORG-078
Pelisser, F. P.; ORG-084
Penha, AFP; EDU-011
Penido, J. A.; COL-003
Penteado, R. F.; BIO-007
Peralta, R. A.; CAT-037, INO-040, MAT-014
Percebom, A. M.; MAT-035
Perecim, G. P.; ORG-149
Pereira, A. F.; MAT-067
Pereira, A. M. S.; QPN-079
Pereira, C.; INO-097
Pereira, C. C.; ANA-088
Pereira, C. D.; EDU-023, EDU-059
Pereira, C. L. M.; INO-036

Pereira, D. G.; MAT-026
 Pereira, E. A.; ANA-005
 Pereira, E. C. V.; QPN-043
 Pereira, G. E.; MED-027
 Pereira, G. T.; AMB-051
 Pereira, J. C. M.; MED-041
 Pereira, J. G.; BEA-017
 Pereira, J. N.; QPN-106
 Pereira, J. S. F.; ANA-007
 Pereira, L. B.; AMB-047, AMB-050,
 ANA-050, ANA-055, ANA-056,
 BEA-020
 Pereira, L. C. O.; QPN-105
 Pereira, L. F.; AMB-023
 Pereira, L. H. S. S.; AMB-014
 Pereira, L. N. dos S.; CAT-034
 Pereira, L. N. S.; CAT-006
 Pereira, L. R.; QPN-075
 Pereira, L. S.; MAT-067
 Pereira, M. B.; ELE-022
 Pereira, M. P.; ANA-016, MAT-036
 Pereira, N. F.; MED-016
 Pereira, N. R. L.; AMB-017
 Pereira, P. A. P.; AMB-081
 Pereira, P. R. R.; QPN-084
 Pereira, P. T. C.; BEA-018
 Pereira, R. M.; ANA-007
 Pereira, S. A. C.; AMB-030, INO-048
 Pereira, S. C.; INO-067
 Pereira, T. C.; ELE-033
 Pereira, T. M.; EDU-044, INO-017
 Pereira, V. B.; ANA-002, ANA-004,
 ANA-008, ANA-071
 Pereira, V. F.; EDU-032, ORG-107,
 ORG-108
 Pereira, V. L. P.; QVE-007, QVE-018
 Pereira, W. S. G.; MAT-039
 Pereira Netto, A. D.; ANA-006
 Pereira-Maia, E. C.; INO-094
 Perez, C. C.; ORG-066
 Perez, J.; ELE-013
 Pérez, R. E.; CAT-035
 Perez-Juste, J.; MAT-108
 Perini, N.; FIS-013
 Perondi Furtado, P. R.; FIS-025
 Perreira, L. H. S. S.; AMB-063
 Perrone, I. T.; BEA-008
 Pessoa, C. O.; ORG-005
 Pessoa, M. H. O.; CAT-013
 Pessoa, O. D. L.; QPN-087
 Pessotto, C.; FIS-032
 Petri, J. L.; BEA-012
 Petrucci, J. F. S.; AMB-062, AMB-064
 Petter da Silva, A. L. E.; MAT-010
 Pettersson, L. G. M.; TEO-012
 Pezzin, S. H.; MAT-037
 Pfau, S. C. J.; INO-081
 Philippot, K.; CAT-032
 Pianoski, K. E.; ORG-046
 Piazza, R. D.; MAT-121
 Piccolo, A.; AMB-059
 Pich, C. P.; ORG-084
 Picoloto, R. S.; ANA-022, ANA-024
 Pietezak, D.; ORG-178
 Pietezak, D. F.; MAT-060, MAT-088
 Pietre, M. K.; MAT-005
 PILAU, E. J.; BIO-010
 Pilau, E. J.; ANA-052, BEA-009, ORG-039
 Pilissão, C.; INO-009, MAT-008, ORG-121,
 ORG-157
 Pilissão, C.; ORG-013
 Pilli, R. A.; ORG-045
 Pilon, A. C.; QPN-041, QPN-042, QPN-044
 Pim do, W. D.; MAT-116
 Pimenta, JVC; ORG-180
 Pimenta, L. P.; QPN-025, QPN-026,
 QPN-040
 Pimentel, N.; BEA-001
 Pimentel, T.; CAT-011
 Pina, E. S.; QPN-079
 Pina, J. R. S.; QPN-051
 Pinheiro, A. C.; MED-027
 Pinheiro, A. C. N.; CAT-012
 Pinheiro, C. B.; INO-036
 Pinheiro, E. B.; ORG-034
 Pinheiro, G.; ORG-083
 Pinheiro, L. C. S.; MED-033
 Pinheiro, V. S.; ELE-026
 Pinho, P. A. R.; ANA-001
 Pinto, A. A.; MED-010
 Pinto, A. C.; MED-040
 Pinto, A. M. T. P.; ANA-021
 Pinto, B. N. S.; ORG-026, ORG-054
 Pinto, B. P.; MAT-122
 Pinto, C. S.; MAT-065
 Pinto, D. C. A.; MED-020
 Pinto, F. T.; QPN-037, QPN-039
 Pinto, G. A.; ELE-029
 Pinto, J. P.; AMB-045
 Pinto, L. M. C.; INO-051
 Pinto, L. S.; QPN-082
 Pinto, R. L.; ORG-101
 Pioli, R. M.; FOT-008
 Piovan, L.; ORG-065, ORG-096, ORG-132,
 ORG-151
 Piovesan, J. V.; EDU-043
 Piovezan, A. P.; MAT-024
 Piquini, P. C.; INO-066
 Pires, A. C. S.; COL-007, FIS-007, FIS-008,
 FIS-012
 Pires, A. M.; EDU-068, INO-029, MAT-034,
 MAT-097
 Pires, E. D.; QPN-081
 Pires, L. O.; MED-022
 Pita, S. S. R.; MED-001
 Pitasse-Santos, P.; MED-022
 Pizzuti, L.; INO-051
 Pliego, J. R.; TEO-002
 Polêto, M. D.; MED-058
 Polez, A. M. R.; MED-041
 Polinario, G. P.; QPN-018
 Polo, A. S.; INO-076, ORG-148
 Polo, E. C.; ORG-154
 Pomini, AM; QPN-099
 Pompilio, A. P.; BIO-009
 Ponce, D.; QVE-008
 Pontes, D. L.; QPN-038
 Pontes, J. G. M.; QPN-097
 Pontes, N. S.; ANA-003
 Pontes, P. N. S.; ANA-001
 Ponzio, E. A.; ELE-038
 Portella, D. P.; MED-060
 Porto, A. O.; MAT-062, MAT-077
 Porto, C.; BIO-010
 Porto, C.; ANA-052, BEA-009
 Porto, C. F. C.; QVE-002
 Porto, C. M.; TEO-005
 Porto De Sousa Justo, E.; AMB-079
 Porto-Carreiro, I.; MED-053
 Poruczinski, E. F.; INO-063
 Postal, K.; INO-074
 Prado, F. S.; INO-024
 Prado, I. P.; EDU-002
 Prado, R. M.; BIO-010
 Prado, R. D.; QPN-077
 Prado, R. M.; BEA-009
 Prandini, J. A.; INO-043
 Prants, N.; INO-090
 Prates, C. D.; CAT-007
 Pratti, L. M.; MAT-005
 Prestes, O. D.; AMB-075
 Preve, N.; ORG-078
 Preve, N. P.; ORG-084
 Proença, G. S.; ORG-015, ORG-114,
 TEO-009
 Puccinelli, T.; ORG-096

Q

Quadros, S.; FIS-028, MAT-075
 Quaresma, G. H.; MAT-129
 Quaresma, S. B.; EDU-041
 Queiroz, J. P. R.; FIS-001
 Queiroz, M. C. Q.; ANA-063
 Queiroz, M. de S. H.; MED-046
 Queiroz, M. P.; BIO-001, BIO-006
 Queiroz, M. S. R.; QVE-014
 Queiroz, R. V.; MAT-019
 Querino, A. L. A.; INO-012
 Quina, F. H.; FIS-024
 Quinelato, R. R. R.; MAT-136
 Quinteiro, L. M. da C.; EDU-069
 Quinteiro, V. S. T.; MED-024
 Quintiliano, N. F.; QPN-004
 Quiroz, J.; CAT-018

R

Rabelo, A. C.; MAT-145
 Rabelo, A. C. S.; ORG-032
 Rabelo, N. S.; INO-003
 Raddatz, E.; MAT-028
 Rafael, R. A.; TEC-004
 Rafique, J.; CAT-011, ORG-078, ORG-082
 RAFIQUE, J. R.; ORG-084
 Rakocevic, M.; QPN-056
 Ramaldes, G. A.; MED-039
 Rambo, M. C. D.; AMB-058
 Rambo, M. K. D.; AMB-058
 Raminelli, C.; ORG-149
 Ramos, A. M.; AMB-068
 Ramos, G. A.; MED-017

Ramos, J.; EDU-060, EDU-072
Ramos, L. M.; ORG-011
Ramos, L. M.; ORG-020, ORG-025, ORG-028
Ramos, M. K.; ELE-018
Ramos, R. M.; ANA-009
Ramos, V. S.; CAT-015, CAT-016
Ramos, Y. J.; QPN-002
Ramos, Z. S.; BEA-006
Rampon, D. S.; ORG-073
Raphael, E.; COL-008
Rasch, M. B.; ANA-017, BEA-002
Rebello, M. C.; EDU-013
Rebello, R. A.; QPN-096
Rebouças, L. O.; MAT-143
Rebouças, LMR; EDU-011
Receputi, C. C.; EDU-044
Rego, L. S.; MAT-006
Regueira, J. L. L. F.; ORG-045
Regufe, P. F.; ORG-176
Reichert, J. F.; EDU-031
Reina, L. D. C. B.; BEA-016
Reis, A. K. C. A.; ORG-049, ORG-075
Reis, B. F.; ANA-095
Reis, B. L.; MED-041
Reis, D. C. O.; AMB-012, AMB-052
Reis, D. O.; INO-068
Reis, F. D.; AMB-085
Reis, G. M.; MAT-005
Reis, M. A.; FOT-004
Reis, N. V.; INO-025
Reis, S. G.; INO-079
Reis, VSR; EDU-011
Reis, W. J.; COL-003
Reisdorfer, G.; AMB-078
Renda, C. G.; MAT-047
Resende, V. G.; MAT-058
Retamiro, K. M.; ORG-096
Rey, N. A.; ELE-052
Rezende, C. M.; ANA-013, ORG-063
Rezende, D. B.; EDU-044
Rezende, M. C. S.; MED-028
Rezende, P. S.; ANA-116
Rezende-Neto, J. M.; MED-002, MED-032
Rhiel, C. A. da S.; ANA-114
Ribeiro, A. I.; QPN-045
Ribeiro, A. I. R.; QPN-067
Ribeiro, A. O.; FOT-011
Ribeiro, A. S.; ANA-021, ANA-088
Ribeiro, C. E. S.; CAT-034
Ribeiro, D. C.; EDU-013
Ribeiro, E.; MAT-122
Ribeiro, E. O.; INO-085
Ribeiro, E. S.; MAT-069
Ribeiro, F. V.; INO-055
Ribeiro, J. M.; INO-011, INO-016, MED-025
Ribeiro, K. C.; QPN-002
Ribeiro, L. C.; AMB-075
Ribeiro, M. A.; INO-085
Ribeiro, M. S.; MAT-033
Ribeiro, R. B.; QPN-069
Ribeiro, R. C. B.; ORG-105, ORG-175
Ribeiro, R. R.; INO-074
Ribeiro, S. J. L.; INO-089, MAT-092, MAT-102, MAT-107
Ribeiro, S. L. da S.; CAT-010
Ribeiro, T. M.; ORG-081
Ribeiro, V. B.; QPN-088
Ribeiro, W. S.; EDU-041, QPN-037, QPN-039
Ribeiro-Santos, T. A.; MAT-021
Ricardo, D. D.; MED-020
Ricardo Dagnoni, Huelsmann; BEA-010
Richter, E. M.; ANA-098, ANA-099, ELE-031
Riegel-Vidotti, I. C.; CAT-002, COL-004
Rinaldi, A. W.; INO-044
Rinaldi, A. W.; MAT-015, MAT-073
Rinaldi, J. C.; INO-044
Rinaldo, D.; QVE-001, QVE-004, QVE-008, QVE-012
Rios, R. D. F.; AMB-071
Rios, R. R.; INO-087
Rissato, S. R.; MAT-004
Rivera, D. G.; CAT-035
Rivero, E. A. I.; ANA-075
Rives, V.; INO-086
Robert, J. V.; ANA-047
Rocco, J. A. F. F.; TEC-009
Rocco, M. L. M.; MAT-019
Rocha, A. A.; ANA-086
Rocha, A. P. C.; ORG-122
Rocha, B. L. F.; BEA-011
Rocha, C. E.; EDU-040
Rocha, C. E. R.; ORG-077
Rocha, C. G.; AMB-074
Rocha, C. Q.; QPN-059
Rocha, D. L.; ANA-090
Rocha, D. R.; ORG-105
Rocha, E. A.; ORG-134
Rocha, F. R. P.; ANA-015, ANA-035, ANA-038
Rocha, G.; ANA-073
Rocha, G. F. S. R.; CAT-029
Rocha, G. X.; EDU-056
Rocha, H. A. O.; QPN-003
Rocha, I.; MAT-134
Rocha, I. O.; MAT-138
Rocha, I. S.; INO-047
Rocha, J. M. L.; EDU-008
Rocha, L. A.; MAT-112
Rocha, L. D. S.; MAT-089
Rocha, P. S. M.; ANA-083
Rocha, R. C. C.; AMB-014
Rocha, R. G.; ELE-031
Rocha, S. F. L. S.; MED-012
Rocha, W. R.; INO-061
Rocha Jr, J. G.; ANA-102
Rocha Jr., J. G.; ANA-046, ANA-117, EDU-069
Rocha Jr., José Geraldo; EDU-065
Rocha-Filho, R. C.; ELE-029, ELE-043
Rodembusch, F. S.; ORG-041, ORG-113, ORG-163
Rodrigo Piovezani Rocha, F. R. P. R.; ANA-100
Rodrigues, A.; MAT-056
Rodrigues, A. P.; EDU-007
Rodrigues, B. M.; ANA-057
Rodrigues, C. A.; AMB-024, AMB-025, AMB-031
Rodrigues, C. C.; QPN-073
Rodrigues, D. A. S.; ANA-086
Rodrigues, D. W.; QPN-092
Rodrigues, E. A.; MAT-041
Rodrigues, E. F.; ANA-079
Rodrigues, E. J. R.; ORG-077
Rodrigues, F. H. A.; MAT-081
Rodrigues, F. H. A.; MAT-011, MAT-049, MAT-082, MAT-123
Rodrigues, J. A.; ANA-009
Rodrigues, L. C.; QPN-045
Rodrigues, L. C. V.; MAT-061, MAT-066, MAT-142
Rodrigues, L. C. V. R.; MAT-128
Rodrigues, L. V. S.; AMB-016, AMB-082
Rodrigues, M.; ELE-022
Rodrigues, M. H. M.; MAT-007
Rodrigues, M. L. A.; ANA-037
Rodrigues, M. P.; MAT-091, ORG-040
Rodrigues, P. G. S.; INO-087
Rodrigues, R.; INO-015
Rodrigues, T. H. S.; QPN-061
Rodrigues, T. H. S.; QPN-007, QPN-076
Rodrigues, T. S.; MED-035
Rodrigues, V. C.; QPN-060
Rodrigues, V. S.; EDU-024
Rodrigues Arroio, T. R. A.; ORG-079
Rodrigues de Souza Bertallo, C. B.; ORG-079
Rodrigues Júnior, R. O.; MED-023
Rodrigues, JR, M. T.; ORG-106
Rodrigues-Santos, C. E.; ELE-017, ORG-100, ORG-101
Rodríguez, S. G.; ORG-002
Roehrs, J. A.; ORG-144
Roehrs, R.; QPN-020
Rohers, J. A.; ORG-083
Roldao, J. C.; ORG-135
Rolim, L. A.; QPN-043
Roman, L. S.; MAT-019
Romanelli, M.; QPN-016
Romanelli, M. M.; QPN-027
Romanha, A. J.; MED-040
Romanhi, P.; ORG-015, ORG-114, TEO-009
Romano, E. G.; ORG-129
Romano, Y. R.; FIS-024
Romão, W.; ANA-050, ORG-001
Romeiro, G. A.; AMB-034, AMB-035, ANA-002, ANA-071, TEC-007
Romeiro, L. A. S.; MED-017
Romero, J. H. S.; EDU-034
Romero, J. H. S.; EDU-022, EDU-024, EDU-037, INO-064
Romero, O. A. S.; EDU-041, FIS-010
Romoff, P.; QPN-029
Romualdo, L. L.; TEO-013, TEO-016
Ronconi, C. M.; FIS-022, MAT-117, MAT-118, MAT-119
Rondan, F. S.; ANA-079, BEA-013
Roque, A. A.; QPN-091
Rosa, C. H.; ORG-153

Rosa, E. C. A.; TEC-009
Rosa, F. A.; ORG-046
Rosa, L. T. A.; COL-008
Rosa, T. F.; QPN-057
Rosa da, P. C. C.; MAT-018
Rosa Junior, M. Y.; BEA-003
Rosatelli, G. R.; BIO-009
Rosenberger, A. G.; ELE-046
Rosenberger, M. G.; MAT-120
Rosmaninho, M. G.; CAT-026, MAT-029
Rossi, L. M.; CAT-018
Rossi, L. M.; CAT-024, CAT-033, CAT-038,
CAT-040, ELE-040
Rozada, T. C.; ORG-146
Rubio, I.; QPN-049
Ruela, H. S.; BEA-006
Ruiz, A. L. T. G.; MED-015, QPN-001
Ruotolo, L. A. M.; ELE-043
Russo, H. M.; QPN-055, QPN-063
Russo, T. V. C.; ORG-127
Russowsky, D.; ORG-014, ORG-071

S

S. da Silva, S.; ORG-078
Sá, A. J. B.; EDU-045
Sa, E. L.; INO-060
SÁ, E. L.; INO-074, TEO-011
Sá, M. M.; ORG-099, ORG-124, ORG-125,
ORG-127
Sá, N. B.; ORG-057
Saba, S.; CAT-011, ORG-078, ORG-082
Saba, S. S.; ORG-084
Sabino, AA; ORG-180
Sacchelli, B. A. L.; ORG-165
Sachi, M. M.; EDU-060, INO-025
Sachini, R.; BEA-012, BEA-018
Saciloto, V. G.; AMB-060, ORG-076
Sacramento, I. S. A. P.; ANA-039
Sad, C. M. S.; ANA-056
Sad, C. M. S.; AMB-047, AMB-050,
ANA-050, ANA-055
Sagrillo, F. S.; ORG-119
Saide, V. G. P.; ANA-102
Saint' Pierre, T. D.; AMB-014
Salata, C. R.; AMB-051
Salcedo, W. J.; EDU-062
Saldivar-González, F. I.; MED-030
Sales, C. M. S.; TEC-010
Sales, K. L. R.; ORG-150
Sales, K. R. B.; AMB-068
Sales, M. C. M.; ORG-171
Sales, M. J. A.; CAT-001
Sales-Júnior, P. A.; MED-040
Salgado, A. M. S.; ANA-063
Salles, C. M. C.; MED-045
Salomão, K.; MED-005, MED-006
Saltarelli, M.; INO-086
Salvador, F. F. S.; MAT-144
Sampaio, O. M.; ORG-171, QPN-104
Sampaio dos Santos, M. S. S.; EDU-017
Sanchez, D. Y.; AMB-033
Sande, I.; ORG-103
Sandrino, B.; INO-019

Sangi, D. P.; ORG-043
Sangi, D. S.; ORG-177
Sansano, J. M.; ORG-152
Sant'Anna, C. M. R.; MED-012, MED-031
Sant'Anna, C. M. R. S.; TEO-003
Santa-Cruz, L. A.; MAT-059
Santana, A. E. G.; QPN-081
Santana, E. R.; ANA-031
Santana, F. S.; INO-060, INO-069, INO-074
Santana, G. C. S.; INO-057
Santana, M. H. P.; ANA-098, ELE-031
Santana, W. E. L.; ANA-030
Santana, W. E. L.; ANA-029
Santana Oliveira, R.; BEA-007
Santarelli, I. S.; EDU-059
Santelli, R. E. S.; AMB-065
Santiago, A. F.; ANA-076
Santiago, G. M. P.; QPN-087
Santiago, P. A. L.; BIO-008
Santilli, C. V.; AMB-009
Santo, D. R. E.; AMB-027
Santo, L. V. S.; AMB-018
Santos, A. C. R.; ORG-171
Santos, A. J. F.; CAT-027
Santos, A. L.; QPN-062
Santos, A. P.; MAT-058
Santos, A. R.; ORG-020, ORG-025,
ORG-028
Santos, A. S.; ELE-048
Santos, B. P. A.; COL-002
Santos, C.; ORG-141
Santos, C. A. L.; ANA-085
Santos, C. R.; MED-052
Santos, C. V. P.; ORG-116
Santos, D. C.; EDU-060
Santos, D. C.; CAT-014, EDU-072,
ORG-049, ORG-145
Santos, D. J. A.; ELE-001
Santos, D. O. A.; MAT-066
Santos, D. R. F.; AMB-045
Santos, D. S.; EDU-036
Santos, E. C. S.; MAT-117, MAT-118
Santos, E. H.; INO-084
Santos, F. D.; AMB-047, ANA-050
Santos, F. D. dos; ANA-056
Santos, F. K. F.; ANA-013
Santos, F. R. S.; ORG-048
Santos, F. S.; MAT-005, ORG-041,
ORG-170
Santos, F. V.; MED-019
Santos, G. C.; ORG-135
Santos, G. C.; ORG-089, ORG-155
Santos, H. F.; TEO-018
Santos, H. S.; ELE-002, ORG-019,
QPN-061, QPN-076
Santos, H. S. dos; QPN-007
Santos, I. M.; ORG-044
Santos, I. M. F.; MED-020
Santos, J.; EDU-050, MAT-084
Santos, J. A. N.; ORG-039
Santos, J. A. O.; MAT-034
Santos, J. C. C.; AMB-007, ANA-033,
ANA-089, BIO-001, BIO-006, MED-015
Santos, J. E. S.; ORG-024

Santos, J. H.; ANA-039
Santos, J. L.; MED-049
Santos, J. L. O.; AMB-038, BEA-003
Santos, J. L. Z.; ORG-167
Santos, J. M.; AMB-049, ANA-060
Santos, J. M.; ANA-069, ANA-108
Santos, J. R. N.; ORG-020, ORG-025,
ORG-028
Santos, J. S.; MAT-056
Santos, J. V.; AMB-057
Santos, L.; ANA-114
Santos, L. S.; QPN-034
Santos, L. A.; MAT-086
Santos, L. C.; QPN-040
Santos, L. C. S.; QPN-018
Santos, L. M.; ANA-058, ANA-112
Santos, L. O.; ANA-039
Santos, L. P.; CAT-025
Santos, L. P.; ANA-050
Santos, L. S.; BIO-004, EDU-041, FIS-010,
MAT-023, ORG-050, QPN-033,
QPN-037, QPN-039
Santos, L. V. S.; AMB-069, CAT-017
Santos, M. C.; ANA-091, ELE-026,
QPN-107
Santos, M. H.; QPN-095
Santos, M. H. dos; ORG-039
Santos, M. H. F.; QPN-057
Santos, M. I. N.; INO-090
Santos, M. J.; MAT-071, MAT-093, MAT-095
Santos, M. L.; EDU-070
Santos, M. N.; MED-043
Santos, M. R. C.; MAT-007
Santos, M. R. L.; ELE-020
Santos, M. S.; MAT-030, ORG-159
Santos, P. F.; QVE-007
Santos, P. J.; AMB-075
Santos, P. P.; MED-014, MED-020
Santos, R. B.; ANA-045
Santos, R. C.; EDU-047
Santos, R. M.; ANA-070, TEC-008
Santos, R. O.; ANA-045
Santos, S. J.; ORG-014, TEC-002, TEC-006
Santos, S. R. C.; BEA-011
Santos, S. S.; INO-013
Santos, S. S. O.; MAT-080
Santos, T.; ORG-072
Santos, T. M. N.; QVE-019
Santos, V. A. Q.; MAT-056
Santos, V. S.; AMB-056
Santos, W. P. C.; BEA-011
Santos, Y. H.; MAT-054
Santos, Y. P.; EDU-060, EDU-072
Santos dos, C. B. R.; MED-036
Santos dos, F. D.; AMB-050, ANA-055
Santos dos, F. P.; ORG-023
Santos dos, G. C.; ORG-086
Santos dos, G. P.; ORG-016
Santos dos, J. M.; ANA-053
Santos dos, M. S.; ORG-160
Santos dos, R. B.; ORG-001
Santos dos, R. C.; ANA-066
Santos dos, T. C.; FIS-022
Santos Filho, E.; ANA-061

Santos Reginaldo, F. P.; QPN-091
 Santos, R. M.; ANA-119
 Santucci, P. M.; INO-093
 Santucci, P. M.; INO-005
 Saponi, E. C.; EDU-062
 Saraiva, M. T.; ORG-113
 Saran, L. M.; AMB-051
 Sarmento, J. P.; EDU-015, EDU-049
 Sarquis, Í. R.; ORG-094
 Sarraggiotto, M. H.; MED-047, ORG-138, QPN-078
 Sarria, A. L. F.; ORG-092
 Sarto, L. E.; INO-031
 Sartorelli, P.; QPN-004, QPN-006, QPN-016, QPN-027, QPN-062
 Sartorelli, P. S.; QPN-049
 Sastre, D. E.; CAT-025
 Savanhago, R. M.; FIS-021
 Scaglioni, P. T.; ANA-007, BEA-013
 Scaldini, E. B.; BEA-008
 Scapin, V. L.; BEA-012, BEA-018
 Scapolan, M. I. X.; MAT-025
 Scaramboni, C.; AMB-053
 Scarminio, I. S.; QPN-056
 Scheibel, T.; BEA-004, QPN-014
 Schio, A. L.; CAT-028
 Schluter, L. G.; FIS-020
 Schmidt, A.; INO-002
 Schmitz, F.; MAT-010
 Schmoeller, L. A.; ORG-178
 Schneider, A. L. S.; MAT-098
 Schneider, C. C.; INO-018
 Schneider, L. A. E.; FIS-024
 Schneider, M. P.; ANA-041
 Schneider, P. H.; ORG-073, ORG-161
 Schnitzler, D. C.; AMB-002, AMB-080
 Schnitzler, D. C. S.; AMB-001
 Schnitzler, M. C.; MAT-026
 Schram, M.; QVE-005
 Schreiber, C. S.; CAT-005, ELE-011
 Schroeder, P.; TEC-007
 Schultz, J.; INO-034
 Schweitzer, B.; BEA-012, BEA-018
 Schwanke, A. J.; CAT-003, MAT-001
 Schweizer, Y. A.; AMB-078
 Sciuti, L. F.; INO-066
 Scorsin, L.; FOT-002
 Scupinari, T.; QPN-063
 Sebastião, R. C. O.; EDU-067
 Seckler, M. M.; MAT-006
 Seeber, A. S.; MAT-063
 Seixas, F. A. V.; MED-047
 Sell, F. S. F.; EDU-038, EDU-040
 Semaan, F. S.; ANA-092
 Sena, I. S.; ORG-091
 Sena, K. X. F. R.; ORG-164
 Sena, Y. W. B.; EDU-013
 Senger, C. M.; ANA-019
 Senger, M. R.; MED-032, MED-045
 Senra, J. D.; BIO-011, CAT-015, CAT-016, INO-042
 Serge-Correaes, Y. E.; MAT-107
 Serodre, T.; MAT-058
 Serpe, A. P.; EDU-060
 Serpe, A. P.; EDU-019, EDU-072
 Serra, O. A.; INO-080, INO-089
 Serralbo, A. S.; ORG-075
 Sessa, D. P.; QPN-060
 Severino, R. P.; ORG-092
 Severino, R. P.; QPN-057
 Severino, V. G. P.; QPN-013
 Severo, E. A.; BEA-003
 Severo, F. J. R.; ELE-057
 Sghedoni Artifon, S. E.; MAT-043
 Sghedoni Artifon, S. E.; AMB-072, FIS-034
 Shimamoto, G. G.; ANA-102
 Shirato, G. V.; MED-002
 Sibov, S. T.; QPN-008
 Sierpinski, S. F. D.; AMB-039
 Signini, R.; MED-011
 Signorelli, F.; FIS-006
 Sigoli, F. A.; MAT-016, MAT-109, MAT-110, MAT-111
 Sikora, M. S.; MAT-056
 SILINGARDI, H. M. T.; QPN-073
 Silva, A. A.; CAT-015, CAT-016
 Silva, A. A. T.; ORG-140, ORG-156
 Silva, A. C.; FIS-002, TEC-009
 Silva, A. C. F.; CAT-020
 Silva, A. C. L.; QVE-019
 Silva, A. F.; ANA-084
 Silva, A. F. S.; ANA-035
 Silva, A. G. P.; QVE-019
 Silva, A. L. N.; ANA-085
 SILVA, A. L. P. B.; ANA-042, ANA-044, ANA-054
 SILVA, A. L. P. B.; ANA-043
 Silva, A. M.; ORG-044, ORG-052
 Silva, A. M. H. O.; BIO-004
 Silva, A. T. M.; MED-039
 Silva, A. W. B. N.; MAT-074
 SILVA, B. N. M.; FOT-009
 Silva, B. R. F.; EDU-004
 Silva, B. T.; QPN-095
 Silva, B. V.; FOT-009, ORG-033
 Silva, C. A.; MED-023
 Silva, C. A. S.; ANA-078
 Silva, C. C.; EDU-042
 Silva, C. D. S.; INO-091
 Silva, C. E.; BEA-007
 Silva, C. F.; AMB-016, ANA-015
 Silva, C. G.; INO-095
 Silva, C. G. N.; INO-042
 Silva, C. M.; AMB-040, AMB-042, MED-015
 Silva, C. P.; FIS-024, QPN-078
 Silva, C. R.; MED-035
 Silva, C. S.; EDU-036, MED-056
 Silva, C. T.; MAT-015
 Silva, C. V.; MED-048
 Silva, C. V. da.; QPN-073
 Silva, C. V. O.; AMB-066
 Silva, C. Y. Y.; QPN-011
 Silva, D. C. P. R.; TEC-001
 Silva, D. E. S.; MED-041
 SILVA, D. F.; QPN-082
 Silva, D. H. S.; QPN-064
 Silva, D. O.; ANA-075, INO-015, ORG-129, QPN-016
 Silva, D. V. R. S.; ANA-063
 Silva, E.; ANA-052
 Silva, E. C. C.; EDU-013
 Silva, E. C. D.; MED-015
 Silva, E. C. S.; EDU-026
 Silva, E. E.; ORG-008
 Silva, E. L.; MAT-031
 Silva, E. N.; ORG-005
 Silva, F. C.; ANA-014, ORG-067
 Silva, F. C. S. S.; ANA-063
 Silva, F. D.; INO-013
 Silva, F. de C.; ORG-175
 Silva, F. M. A.; QPN-017
 SILVA, F. P.; INO-030
 SILVA, F. P. N. R.; QVE-007
 Silva, F. T. O.; ANA-040
 Silva, G. F.; INO-027
 Silva, G. H. O.; MAT-031
 Silva, G. M.; ORG-075
 Silva, H.; INO-051
 Silva, H.; INO-012
 Silva, H. S.; MAT-063
 Silva, I. A.; MAT-101
 Silva, I. B.; QPN-091
 Silva, I. C.; INO-037
 Silva, I. F.; CAT-029, MAT-046
 Silva, I. F. B.; CAT-026
 Silva, I. F. O.; AMB-077
 Silva, I. J. G.; ANA-048
 Silva, I. M. B.; MAT-031
 Silva, I. O.; EDU-015, EDU-049
 Silva, I. V.; ANA-087
 Silva, J. A.; ANA-060
 Silva, J. B. F.; QPN-082
 Silva, J. da.; EDU-039
 Silva, J. F.; EDU-028
 Silva, J. L.; ORG-118
 Silva, J. M. G.; AMB-070
 Silva, J. P.; EDU-067
 Silva, J. R.; INO-098
 Silva, J. S.; ORG-092
 Silva, J. S.; ANA-023, ORG-168
 Silva, J. T.; EDU-062
 Silva, K. M.; FIS-024
 Silva, K. P.; MED-018
 Silva, L. A.; AMB-019, EDU-060, EDU-072, INO-101, ORG-052
 Silva, L. A. da.; EDU-063
 Silva, L. A. S.; ANA-118
 Silva, L. B.; EDU-055, MED-036
 Silva, L. C.; EDU-016, EDU-060, EDU-072, INO-034
 Silva, L. C. L. F.; CAT-016
 Silva, L. C. N.; QPN-024, QPN-059
 Silva, L. E.; QPN-096
 Silva, L. F.; ELE-004
 Silva, L. F. Jr.; ORG-045
 Silva, L. F. O.; MAT-130
 Silva, L. H. M.; FIS-012
 Silva, L. L.; ANA-041
 Silva, L. M.; ANA-061
 Silva, L. O.; BIO-004, EDU-014, EDU-041, QPN-033
 Silva, L. P.; ORG-062, TEO-001

Silva, L. R. D.; ELE-002
 Silva, L. S.; ORG-052
 Silva, L. Z.; ANA-019
 Silva, M.; AMB-047
 Silva, M. A.; ANA-114
 Silva, M. A. F.; ORG-164
 Silva, M. A. N.; INO-003, INO-011
 Silva, M. B. C.; EDU-015
 Silva, M. C.; FIS-011
 Silva, M. da; ANA-056
 Silva, M. das C.; INO-080, INO-089
 Silva, M. F. das G. F.; QPN-068
 Silva, M. F. G. F.; QPN-065, QPN-082
 Silva, M. F. G. F.; QPN-045, QPN-069, QPN-077, QPN-086
 Silva, M. G.; ANA-012
 Silva, M. G. F.; QPN-086
 Silva, M. G. V.; QPN-047
 Silva, M. G. V.; EDU-021, QPN-046, QPN-053
 Silva, M. H. M.; INO-014
 Silva, M. H. V.; MAT-041, QPN-011
 Silva, M. J. C.; EDU-035
 Silva, M. L. A.; QPN-026, QPN-040
 Silva, M. L. A. e.; QPN-072
 Silva, M. M.; BIO-006, MED-015
 Silva, M. O.; MAT-072
 Silva, M. P.; MAT-031
 Silva, M. R.; BEA-016
 Silva, M. S.; EDU-013, EDU-032, ORG-139, QPN-101
 Silva, N. S.; ORG-148
 Silva, P. N. B.; ORG-173
 Silva, P. T.; ELE-002
 Silva, R.; MAT-133
 Silva, R. A.; ELE-039
 Silva, R. A. N.; INO-029, MAT-117
 Silva, R. B. M.; MAT-111
 Silva, R. C.; ORG-074, ORG-160
 Silva, R. C. F.; MAT-032
 Silva, R. H. S.; ORG-090
 Silva, R. L.; EDU-024
 Silva, R. M. R. J.; MED-050
 Silva, R. N.; QPN-011
 Silva, R. R.; ANA-032
 Silva, R. S.; INO-043, INO-087
 Silva, R. S. F.; CAT-016
 Silva, R. V. S.; ANA-002, ANA-003, ANA-071, ANA-072
 Silva, S. C.; ANA-067, ORG-047
 Silva, S. da C.; QPN-051
 Silva, S. G.; MED-056
 Silva, S. J. B.; FIS-005
 Silva, S. M.; ANA-059
 Silva, S. M. N.; INO-073
 Silva, S. R.; INO-100
 Silva, S. R. B.; QVE-007
 Silva, S. R. V. S.; ANA-001
 SILVA, S. Y. S.; QPN-051
 Silva, T. B.; ORG-067
 Silva, T. C.; MAT-008, ORG-044
 Silva, T. C. A.; MAT-092, MAT-102
 Silva, T. L.; EDU-008
 Silva, T. R.; EDU-008
 Silva, T. S.; ORG-059
 Silva, V. A. S.; CAT-015
 Silva, V. B.; FIS-009, ORG-087
 Silva, V. H. M.; INO-020
 Silva, V. I.; QPN-020
 Silva, W. C. L.; QPN-074
 Silva, W. L. L.; BIO-004
 Silva, W. P.; ELE-031, MAT-106, ORG-150
 Silva, W. R.; ANA-080
 Silva, W. T.; EDU-067, HIS001
 Silva Cunha, A.; MAT-133
 Silva da, A. J. R.; QPN-085, QPN-089
 Silva da, J. L.; ELE-054
 Silva da, J. P.; INO-019
 Silva da, L. R.; INO-017
 Silva da, M.; AMB-050, ANA-055
 Silva da, P. T.; ORG-019
 Silva da, R. M.; AMB-048
 Silva da, T. R.; QPN-085
 Silva de, F. C.; ORG-063
 Silva de Souza, E. H.; INO-092
 Silva Filho, L. C.; MAT-068
 Silva Gomes, A. K.; FIS-024
 Silva Gondin, A. C.; INO-092
 Silva Jr., F. P.; MED-032
 Silva Júnior, A. I.; ANA-006
 Silva Junior, C. R.; AMB-045
 Silva junior, R. C.; MAT-045
 Silva Neto, H. A.; AMB-076
 Silva Neto, S. L.; EDU-004
 Silva Vega, F. A.; MAT-088
 Silva-Caldeira, P. P.; MAT-133
 Silva-Filho, L. C.; ORG-135
 Silva-Filho, L. C.; ORG-089
 Silva-Filho da, L. C.; ORG-086
 Silva-Jr, F. P.; MED-002, MED-045
 Silva-Junior, E. A.; QPN-048
 Silva-Júnior, N. A.; ELE-023, ELE-040
 Silva-Neto, L.; BIO-001
 Silveira, C.; EDU-002, EDU-018
 Silveira, C. H.; INO-012
 Silveira, G. P.; ORG-008
 Silveira, J. R. F.; ANA-085
 Silveira, L. L.; EDU-040
 Silveira, L. L. da; EDU-039
 Silveira, N. S.; BEA-016
 Silveira, T. C.; QPN-028
 Silveira da, V.; ORG-001
 Silveira-Lacerda, E. P.; INO-028
 Simas, D. L. R.; QPN-098
 Simas, R. C.; QPN-070
 Simas, R. C. S.; QPN-098
 Simião, C. G.; ELE-053
 Simões, F. R.; ELE-026, ELE-044
 Simões, T. R. G.; INO-025, INO-081
 Simon, A. P.; MAT-056
 Singh, M. K.; MED-060
 Siqueira, A. G.; ANA-110
 Siqueira, D. E. U. S.; ANA-122
 Siqueira, D. R.; MAT-013
 Siqueira, J. G. M.; MAT-023, MAT-086
 Siqueira, K. A.; QPN-025, QPN-026
 Siqueira, K. P. F.; MAT-045
 Siqueira, R. P.; ORG-040
 Sitta, E.; FIS-013
 Slominski, W.; EDU-070
 Soares, A. B.; QVE-002
 Soares, A. J.; MED-045
 Soares, A. L.; ELE-006
 Soares, B. M.; MAT-127
 Soares, D. C. F.; MED-039
 Soares, D. P.; EDU-072, ELE-006
 Soares, E. R.; BIO-008
 Soares, F. Q.; ANA-068
 Soares, J.; QPN-088
 Soares, J. F.; INO-060, INO-069, INO-074
 Soares, J. J.; QPN-020
 Soares, K. P.; ANA-003
 Soares, L. F.; EDU-021, MAT-071, MAT-093, MAT-095, MAT-104
 Soares, M. A.; QPN-025, QPN-026, QPN-040, QPN-104
 Soares, M. G.; QPN-027, QPN-062, QPN-083
 Soares, M. H. F. B.; EDU-010, EDU-020
 Soares, M. R. F.; CAT-028
 Soares, P. M.; FIS-017
 Soares, R. S.; AMB-065
 Soares, S.; ANA-038
 Soares, S. S.; ANA-100
 Soares, T. A. S.; MAT-059
 Soares, T. S.; ANA-097
 Soares Filho, W. A.; QPN-035
 Soares Jr, A. L.; EDU-033
 Sobral, A. J. F. N.; ORG-142
 Sogayar, M. C.; MAT-139
 Sola-Penna, M.; ORG-090
 Solci, M. C.; AMB-045
 Solon, L. G. S.; ORG-091
 Sonai, B.; ORG-082
 Soriano, S.; INO-077, INO-079
 Sousa, A. F.; QPN-047
 Sousa, A. F.; ORG-142
 Sousa, B. L. de; ORG-039
 Sousa, C. P.; ELE-007
 Sousa, E. B.; ANA-117
 Sousa, E. H.; INO-091
 Sousa, E. Y. A.; ORG-142
 Sousa, G. P.; MAT-110
 sousa, J. C. P.; ANA-064
 Sousa, K. R. L.; MED-023
 Sousa, L. R.; ANA-093
 Sousa, L. R. F.; QPN-057
 Sousa, M. A.; ANA-085
 Sousa, M. F. B.; MAT-012
 Sousa, M. I. S.; QPN-003
 Sousa, M. O. B.; FOT-006
 Sousa, M. S.; EDU-013
 Sousa, N. C. O. S.; BIO-009
 Sousa, P. A. R.; AMB-005
 Sousa, R. M. F.; ANA-099
 Sousa Jr., P. T.; ORG-171
 Souto, F. T.; ORG-038
 Souto, L. F. L.; QPN-089
 Souza, A. A.; EDU-018
 Souza, A. E.; EDU-056
 Souza, A. F.; AMB-008

Souza, A. F. S.; EDU-052
Souza, A. G.; ORG-119
Souza, A. L. F.; CAT-014, ORG-145
Souza, A. R.; ORG-164
Souza, A. S. de; MED-057
Souza, B. S.; CAT-039, ORG-061, ORG-069, ORG-083
Souza, C. M.; MED-049
Souza, D. L. F.; QVE-018
Souza, D. M.; EDU-031
Souza, D. P.; AMB-044
Souza, D. S.; BEA-009
Souza, E. A.; AMB-019
Souza, E. J.; MAT-099
Souza, F. L.; EDU-058, MAT-020
Souza, F. M.; ELE-026
Souza, F. M. F. S.; CAT-005
Souza, F. M. F. S.; ELE-011
Souza, F. S.; QPN-006
Souza, G. A.; MED-003
Souza, G. B.; MED-018, MED-034
Souza, G. V.; ANA-077
Souza, H. M. R.; MED-007
Souza, I. P.; INO-094
Souza, J. C.; ANA-051
Souza, J. S.; MAT-020
Souza, J. M.; QPN-023
Souza, K. S.; ELE-022
Souza, L.; AMB-036
Souza, L. G.; ORG-012
Souza, M.; MAT-024
Souza, M. A.; AMB-052
Souza, M. C.; ORG-058, ORG-090, TEO-009
Souza, M. C. B. V.; ORG-058, ORG-090, ORG-118, ORG-119, ORG-120, ORG-122, ORG-176
Souza, M. C. O. E.; INO-032
Souza, M. da C.; QPN-005
Souza, M. J. P. G.; ELE-039
Souza, M. M.; INO-073
Souza, M. M.; TEO-006
Souza, MOGS; EDU-011
Souza, N. A. C.; QPN-043
Souza, N. L. T.; EDU-066
Souza, O. A.; QVE-004
Souza, R. A. de; EDU-026
Souza, R. O. M. A.; ORG-063
Souza, S. S.; EDU-013
Souza, T. B.; MED-016
Souza, V. C.; ORG-003
Souza, V. H. R.; MAT-074, MAT-126
Souza, V. H. R.; MAT-022
Souza, V. P.; ORG-014
Souza, V. R.; AMB-037
Souza, W. P.; QPN-040
Souza de, A. A. N.; ORG-147, ORG-148
Souza de, A. C. G.; ELE-041
Souza de, C. G.; ANA-066
Souza de, M. M.; INO-071
Souza de, M. S.; INO-079
Souza de, R. A.; EDU-061
Souza Filho, A. P. S.; QPN-050
Souza Lucas de, F. W.; MAT-094

Souza-Fagundes, E. M.; INO-011, INO-016
Spaccini, R.; AMB-059
Sparenberg, D. D.; AMB-031
Speranza, L.; EDU-040
Speziali, M. G.; MAT-080
Spinelli, A.; ANA-031, ELE-009
Spinello, P. G.; ORG-143
Stanton, M. A.; QPN-021
Stapelfeldt, D. M. A.; AMB-066
Stavale, F.; FIS-022
Stefani, H. A.; MED-043, QVE-017
Steffens, C.; AMB-078
Stelzer, K. T.; ANA-071
Stephani, R.; BEA-008
Stevanato, A.; ANA-106
Stevanato, A.; AMB-070
Stieven, W. S.; MAT-063
Stinghen, D.; INO-079
Stivanin, M. L.; ORG-136
Stöhr, D.; EDU-040
Stradiotto, N. R.; ELE-035
Stradiotto, N. R.; ELE-024, ELE-033, ELE-045
Streit, G. W.; INO-052, INO-065
Streit, S.; MAT-098
Strømme, M.; MAT-138
Stumpf, H. O.; INO-025, INO-068, INO-081, INO-085, MAT-046, MAT-116
Superbi, R. C. S.; QPN-095
Suzukii, V. Y. S.; MAT-137
Szpoganicz, B.; INO-008, MAT-087
Szpoganicz, B. P.; INO-008

T

Tabadravu, J. N.; QPN-064
Tadeu Palino, A.; MAT-043
Taffarel Cesco, C.; AMB-072, FIS-034, MAT-043
Takarada, W. H.; CAT-002
Takata, N.; ORG-143
Takata, N. H.; QVE-005
Tall, A.; ANA-089
Tamanaha, M. S.; BIO-003
Tambellini, M.; EDU-037
Tanaka, L. Y.; MAT-141
Tangerina, M. M. P.; QPN-062
Tapsoba, I.; ANA-089
Tarnowski, K. S.; EDU-040
Tasso, C. R. B.; INO-056
Tavares, A. C.; MED-001
Tavares, D. C.; QPN-025
Tavares, J. F.; QPN-101, QPN-105
Tavares, L. Q.; AMB-005
Tavares, M. C.; FIS-033
Taveira, M. L.; EDU-047
Teixeira, A. M. R.; ELE-002, ORG-019
Teixeira, A. P. C.; MAT-062
Teixeira, A. P. C.; CAT-007, CAT-027, MAT-021, MAT-029, MAT-032, MAT-077
Teixeira, A. P. de C.; MAT-046
Teixeira, A. R.; FIS-014, FIS-017
Teixeira, C. M. L. L.; QPN-094, QPN-100
Teixeira, E. H.; ORG-019

Teixeira, I. F.; CAT-029, MAT-046
Teixeira, J. A.; ANA-101
Teixeira, M.; QPN-049
Teixeira, M. I. G. S.; QPN-047
Teixeira, N. N.; ANA-025
Teixeira, P. R.; QPN-031
Teixeira, R. R.; ORG-039, ORG-040, ORG-044, ORG-170
Teixeira, V. C.; MAT-066
Teixeira Neto, E.; MAT-110
Teles, V. L. G.; ANA-077
Tempone, A. G.; QPN-006, QPN-010, QPN-016, QPN-027, QPN-080
Teodoro, B. I.; EDU-062
Teotônio, G. L. E.; INO-006
Tereski, L.; AMB-039, EDU-060
Terezan, A. P.; QPN-008, QPN-013
Terra, I. A.; EDU-045, EDU-046, EDU-064
Terzi, C. M.; INO-078
Texeira, W. S. R.; BEA-017
Thedy, M. E. C.; EDU-030
Thomas, J. C.; ORG-065, ORG-132, ORG-151
Thomeo, Y. M.; MAT-092, MAT-102
Tiba, D. Y.; MAT-027
Tibes, M. C. O.; ORG-121
Tiburtius, E. R. L.; MAT-055
Tillmann, A. I.; INO-059
Tinoco, L. W.; MED-042
Tofanello, A.; CAT-034
Toledo, J. B.; EDU-026
Toledo, S. P.; MAT-033
Toledo, V. H.; MAT-033
Tolentino, N. M. C.; ORG-120
Tomasi, C.; ORG-078
Tomasi, C. T.; ORG-084
Tomaz, M. N.; INO-052
Tomé, J. P. C.; INO-043
Tonet, G. A.; COL-004
Tonon, G. C.; QPN-028
Toresi, R. M.; ELE-019
Tormena, C. F.; ORG-056
Torres, L. M. B.; QPN-102
Torres, M. C.; TEC-005
Torres, N. M. P. O.; ORG-093
Torresi, R. M.; ELE-016, ELE-030, ELE-034, ELE-037
Torresi, S. I. C.; COL-007, ELE-037, ELE-039, ELE-040, MAT-091, MAT-134
Torresi de, S. I. C.; ELE-050
Tosato, F.; ANA-050
Trajano, P. C.; ORG-179
Trevisan, M. T. S.; QPN-047
Trevisan, M. T. S.; ORG-142
Trindade, E. S.; QPN-054
Trindade, G. M. S.; EDU-045, EDU-046, EDU-064
Trivinho-Strixino, F.; MAT-056
Trossini, G. H. G.; ELE-015, MED-058, QVE-017
Trovó, A. G.; AMB-004
Trujillano, R.; INO-086
Tsang, E.; CAT-029
Tubino, M.; ANA-046, ANA-102

U

Uchiyama, N. M.; INO-004
Uliana, C. V.; ELE-012
Ullah, S.; MAT-107
Ulloa, J. E.; FOT-011
Ungaro, V. A.; CAT-024
Urban, R. C.; AMB-013, AMB-076

V

Vailati, A. F.; CAT-037
Vailati, A. L.; ORG-109, ORG-115
Vairolette, L.; EDU-054
Vairolette, L. E.; ELE-055
Val, A. L.; AMB-049
Valadares, D. S.; CAT-019
Valbon, A.; ELE-017
Valbon, A.; ELE-020
Valduga, E.; QVE-014
Vale, J. P. C.; QPN-061, QPN-076
Vale, J. P. C. do; QPN-007
VALE, L. S. R.; ORG-139
Vale, T. M.; ORG-120
Valença, W. O.; ORG-005
Valencia, G.; MAT-136
Valente, W. C. G.; MED-002
Valentim, I. B.; QPN-081
Valerino-Diaz, A. B.; QPN-040
Valério, C. C.; ANA-122
Valezan, I. F.; MAT-024, ORG-076
Valeze, B. T.; ORG-138
Valim, D. Z.; ANA-113
Valle, E. M.; ELE-036
Valle, E. M. A.; ELE-048, ELE-053, ELE-055
Valli, M.; MED-030
Valvassori, S. S.; ORG-082
Valverde, B. P.; FIS-005
Vanini, G.; ANA-008, ANA-010
Vanoni, C. R.; ELE-010
Vanuchi, V. C. F.; EDU-029
Varanda, L. C.; MAT-052
Varela, H.; ELE-023, ELE-050
Vargas, G. N.; EDU-025
Vargas, M. D.; FOT-006
Vargas, M. S.; QPN-088
Vargas, M. S. N.; EDU-003
Vargas, T. S.; AMB-061
Varotti, F. P.; MED-019
Vasconcelos, P. C.; AMB-041
Vasconcelos, I. M.; QVE-002
Vasconcelos, L. F.; TEO-014
Vasconcelos Jr., J. A.; ANA-012
Vassiliades, S. V.; FOT-004, FOT-010, MAT-039
Vaz, B. G.; ANA-064
Vaz, J. M.; ANA-026
Vaz, M. G. F.; INO-077, INO-079
Vaz, R. C. A.; INO-005, INO-093
Vecchia, R.; MAT-068
Vecchia, P. D.; BEA-001
Vega, F. A. S. V.; MAT-124
Vega-Chacon, J.; MAT-121
Veiga, T. A. M.; QPN-045

Veiga-Jr, V. F.; QPN-106
Veigar-Júnior, V. F.; ANA-013
Veja, F. A. S.; MAT-060
Velasco, L. G.; ANA-103, ANA-120
Velez, A. S. M. M.; MED-020
Velloso, A. B. S.; EDU-026, EDU-061
Veloso, M. C. C.; AMB-034, AMB-035, TEC-007
Venâncio, M. F.; INO-061
Venancio, T.; MAT-042
Venâncio, T.; QPN-067
Vendramini, P. H.; QPN-097
Vendruscolo, V. V.; MAT-128
Venturini, S. I.; ELE-013
Veregue, F. R.; INO-044, MAT-015
Vergnano, G. S.; ORG-037
Verli, H.; MED-058
Vessecchi, R.; ORG-133
Vettori, R. P.; EDU-050
Viana, A. G.; AMB-048
Viana, D. D.; ORG-008
Viana, G. H. R.; MED-019
Viana, J. de S.; FIS-010
Viana, J. S.; BIO-004
Viana, J. S.; QPN-033, QPN-034
Viana, L. C.; QVE-013
Viana, M. M.; MAT-002
Viana, R. M. R.; MED-019
Viana, S. R. F.; QPN-015
Vicente, F. E. M.; CAT-035
Vicente, M. A.; INO-086
Vicente, R. A.; TEO-010
Vicentini, T. S.; AMB-051
Viçosa, A. L.; ANA-014
Victor, M. M.; ORG-003
Vidinha, P.; CAT-033
Vidotti, M.; COL-004, ELE-006, INO-034
Vieira, A. A.; MAT-115
Vieira, A. A. V.; ORG-084
Vieira, B. A.; CAT-027
Vieira, D. P. P.; ORG-010
Vieira, L. C. C.; ORG-171, QPN-104
Vieira, L. V.; BEA-002
Vieira, M. A.; ANA-021
Vieira, M. F.; INO-089
Vieira, N. I. D.; INO-003, INO-027
Vieira, P. C.; MED-004
Vieira, S. S.; CAT-027, MAT-021
Vieira, S. V.; INO-057
Vieira, T.; AMB-072
Vieira Júnior, J. C. A.; QPN-003
Vieira Machado, M. V. M.; ORG-042
Viera Júnior, G. M.; ORG-168
Vilela, P. B.; AMB-084
Vilela Prado, V. P.; QPN-009
Villar, J. A. F. P.; MAT-026, ORG-047, ORG-048
Villar, J. D. F.; MED-006
Villarreal, W.; QPN-065
Villarreal, W.; INO-053, INO-096
Vilela, L. F.; ORG-147
Vinci, F. S.; BEA-013
Vindiliino, R. A. B.; QVE-002

Vinhal, J. O.; ANA-081
Virtuoso, L. S.; COL-008
Vital, C. A.; BIO-006
Vital, W. D. S.; QPN-045
Vitoriano, A. P. G.; BEA-009
Vitorino, L. S.; MAT-117
Vivas, M.; ANA-073
Volpato, H. A. M.; COL-009
Voltolini, S.; ORG-130
Vontobel, P. H. V.; ORG-023, ORG-041

W

Wächter, N.; ELE-029
Wakui, V. G.; QPN-008
Walber, T. A.; MAT-024
Wang, M. F.; ORG-154
WATANABE, L. A.; QPN-051
Weber, A. C. H.; ORG-161
Weber, C. S. B.; ORG-053
Wecker, G. S.; FOT-002
Welzel, D. J.; INO-063
Westphal, E.; INO-010, INO-072
Westphal, E. W.; ORG-070
Whiteman, H. L.; MED-002
Wiggers, H. J.; MED-043, MED-044
Will, C.; ANA-011
Winiarski, J. P.; ELE-010, ELE-028, MAT-014
Winnischer, H.; INO-010, INO-072
Wisniewski, A.; ANA-069
WITT, M. A.; QVE-013
Wodtke, F.; ORG-115, ORG-178
Wohnrath, K.; INO-092
Wulff, N. A.; QPN-097
Wypych, F.; INO-078, INO-084

X

Xavier, F. R.; INO-090, ORG-130
Xavier, F. R.; CAT-037, INO-040, INO-052, INO-059, INO-065, ORG-109, ORG-115, ORG-131, ORG-178
Xavier, J. C.; ELE-002, ORG-019
XAVIER, M. B.; ANA-043, ANA-044
Xavier, R. S.; ANA-010
Xavier Jr., D. G.; EDU-065
Ximenes, I. A. T.; BIO-002
Ximenes, R. M.; ORG-164
Ximenes, X. V. L.; ANA-001

Y

Yamazaki, D. A. S.; MED-047
Yoneda, J.; TEO-009
Yoneda, J. D.; TEO-006
Yoshimura, T. M.; MAT-033
Yunes, J. A.; ORG-126

Z

Zaiat, M.; AMB-029
Zanardi, F. B.; INO-082, INO-083
Zanatta, L. D.; INO-082
Zancan, P.; ORG-090
Zanella, R.; AMB-075

Zanetti, G. I.; MAT-069
Zangaro, G. A. C.; ANA-107
Zanlunqui, L. A.; ANA-105
Zanoni, M. V. B.; ELE-054
Zanzarin, D M; BIO-010
Zapp, E.; ORG-034
Zapp, E. Z.; CAT-005, ELE-011
Zaramello, L.; CAT-032, CAT-039
Zarbin, A. J.; MAT-040
Zarbin, A. J. G.; ELE-018, INO-002,
MAT-009, MAT-054, MAT-065,
MAT-076, MAT-079, MAT-084
Zatta, L.; INO-049, INO-062
Zatz, M.; ANA-105
Zeoly, L. A.; ORG-106
Zeoly, L. A.; ORG-059, ORG-088
Zeplin, G.; MAT-038, MAT-075
Zequin, M. C.; QPN-068
Zeraik, M. L.; QPN-055, QPN-063
Zermiani, T.; QPN-107
Zibordi-Besse, L.; TEO-015
Zilse, M. S.; FIS-011
Zilse, M. S.; FIS-020
Zimmermann, L. M.; FIS-028, MAT-010,
MAT-075
Zocolo, G. J.; QPN-076
Zornitta, R. L.; ELE-043
Zugman, T.; ORG-132

α -Alkylidene- γ -butyrolactone; ORG-088
 β -Caryophyllene; QPN-076
 β -cyclodextrin; ORG-003
 β -iron oxyhydroxide; MAT-020
 β -lapachone; MED-046
 β -nitrostyrene; ORG-128
 β -Zeolite; MAT-005
 γ -Alumina; CAT-036
 γ -Lactone; ORG-088
[2 + 2]-Cycloaddition; TEO-001
[3+2]-1,3-dipolar cycloadditio; ORG-004
 μ PAD's; AMB-062
1,10-fenantrolina; FOT-005
1,10-phenanthroline; BEA-015, INO-056
1,10-phenanthroline-5,6-dione; INO-054
1,2,3-triazole, "click" reacti; ORG-039
1,2,3-triazole; ELE-038, ORG-018,
ORG-050, ORG-093, ORG-175
1,2,3-triazoles; ORG-113
1,2,4-Oxadiazol; ORG-150
1,2,4-triazole; FIS-015
1,2-Aminoalcohols; ORG-151
1,2-Dimetoxiantraquinona; ORG-149
1,3,4-oxadiazol; INO-010, INO-072
1,3,4-oxadiazole; MAT-053, ORG-122
1,3-dipolar cycloadditions; ORG-152
1,4-Dihydropyridines; FOT-002
1,4-Naftoquinona; ORG-119
1,4-Naphthoquinones; ORG-103
1,8-Cineol; QPN-014
1020 Carbon Steel; MAT-012
10-MDP; FIS-025
17-alfa-ethinylestradiol; MAT-077
17alpha-Ethinylestradiol; MAT-032
1-Metoxiantraquinona; ORG-149
2,2'-bipyridine; INO-050
2,2'-bipyridine; INO-056
2,2'-Bipyridine; ANA-029
2,4-D; ANA-018
2,4-dichloroquinoline; ORG-023
25H-NBOH; BIO-006
25H-NBOMe; BIO-006
25I-NBOH; BIO-001
25I-NBOMe; BIO-001
2-cianoacrylate; ORG-177
2D materials; INO-002
2H-1,2,3-Triazole; ORG-067
2H-benzo[c]chromene; ORG-018
2-Iminothiazolidines; ORG-125
2-methoxy-3-cyanopyridine; MAT-085
2-Methoxythymol; QPN-096
2-picolilamina; INO-074
2-pyridinylhydrazones; MED-027
3,3'-alkylmethylenes; ORG-105
3-alkylpyridine Marine; MED-019
3D printing; AMB-062, MAT-140
3-hydroxykynurenine; ORG-072
4(5)-methylimidazole; FIS-017
4,4'-bis-carboxyfunctionalized; INO-050
4H-pyran; ORG-025
4-Hydroxy-coumarin; ORG-175
4-nitrobenzaldehyde; ORG-091

4-Quinolonas; ORG-119
4-substituted-quinolines; ORG-023
5-Thio-1,2,4-triazole; ORG-029
6-diamino-1,10-phenanthroline; INO-054
70% hydrogen peroxide; AMB-019
77Se NMR; ORG-131
8-Aminoquinolina; ORG-100

A

ab initio; FIS-003, TEO-007
ABAD; MED-038
Absorção de água; MAT-125
Absorção; MAT-105
absorption spectrum; INO-076
ác senecioloxil-ent-caurenóico; QPN-060
Acacia gums; CAT-002
Açafrão-da-Índia; ANA-032
Acetaminophen; ELE-027
Acetilcolinesterase; MED-003
Acetogenins; QPN-016
acetylacetone; ANA-034
Acetylbergenin; QPN-033
Acetylcholinesterase; MED-009, MED-036,
QPN-058
acetylsalicylic acid; INO-086
AChE; MED-047, QPN-047
Aciclonucleosídeo; ORG-058, ORG-090
Acid Black 210; QVE-006
Acid mine drainage; INO-075
Acidic médium; ELE-038
Ácido 2-mercaptocotínico; INO-037
Ácido ascórbico; ANA-039
Ácido cinâmico; ORG-100
Ácido fólico; COL-001
Ácido Sulfídrico; AMB-074
Acidochromic effect; ORG-135
Ácidos Clorogênicos; QPN-102
ácidos graxos; TEC-011
Ácidos naftênicos; ANA-119
Aço Carbono; ELE-020
acridonic alkaloids; QPN-045
ACT; EDU-019, EDU-050
Activated Biochar; ELE-049
Activated carbon; AMB-035, AMB-071,
ELE-043, QVE-006
Active methodology; EDU-003
Açúcar; ANA-121
Acyl cleavage; ORG-127
Acylation; ORG-179
Acylhydrazone; ORG-122
Additive Emissions; ANA-085
Adduct; ANA-075
Adenocalymma axillarum; QPN-072
Adição de padrão; ANA-118
ADME; MED-036
adsorção de gases; FIS-022
Adsorção; AMB-020, AMB-024, AMB-025,
AMB-026, AMB-031, AMB-047,
AMB-066, ANA-080, ANA-119, FIS-002,
FIS-003, FIS-027, INO-008, MAT-093
adsorção-dessorção; MAT-082
Adsorption Dye; MAT-073

Adsorption Isotherms; QVE-006
Adsorption Kinetic; AMB-028
Adsorption; AMB-016, AMB-032, AMB-035,
AMB-082, AMB-084, ANA-028,
ANA-067, COL-009, ELE-039,
FIS-032, MAT-018, MAT-048, MAT-062,
MAT-092, MAT-095, MAT-102,
MAT-104, QVE-006
Adsorvente; AMB-083, FIS-029
Adsorventes Básicos; MAT-122
adsorventes naturais; ANA-080
adulteração; BEA-009
Adulterantes; ANA-015
Adulterants; ANA-097
Adutos de Michael; ORG-115
advanced oxidation process; AMB-004,
MAT-099
Advanced Oxidative Processes; AMB-067,
ANA-061
aerogel de grafeno; ANA-027
Aerosol; AMB-045
Afinidade; INO-020
Aflatoxin B1; QPN-039
Aflatoxin M1; MED-009
agarose; ORG-009
agentes intercalantes; ORG-095
Agentes tiofílicos; ORG-016
Agregação de placas β -Amiloide; MED-003
Agricultural Waste; TEC-010
agrochemicals removal; AMB-054
Agrochemicals; INO-053, QPN-065
Agroquímico; ANA-074
Agrotoxic; INO-016
Agro-Waste; ORG-153
Água de chuva; AMB-012
água de reuso; ANA-091
Água do mar; FIS-002
água subterrânea; AMB-021
água; AMB-061, ANA-121
Águas residuárias; AMB-047
Air pollution monitoring; AMB-062
air pollution; AMB-033, AMB-045
Air Quality Models; AMB-042
air; ANA-018
AISI 430; ORG-086
Álcoois; ORG-116
Alcóxidos; INO-060
Aldeídos; ORG-116
Aldol condensation; INO-084, ORG-070
aldol reactions; MAT-127
aldolic condensation; ORG-173
Aldoximes; ORG-036
alfa-aryltetralones; ORG-012
Alfabetização Científica; EDU-064
Alface; ANA-074
Algae; BIO-003
Alginate; MAT-133
Alginatos odontológicos; ANA-083
Alimentos; ANA-015
Alkaloid Analogs; MED-019
alkaloid complex; INO-053
Alkaloids; QPN-022, QVE-016
Alkynes; CAT-040

allylaryl ethers; ORG-004
 Allylic bromides; ORG-125, ORG-127
 Alpha-diazo carbonyl; ORG-127
 alumina; MAT-070
 aluminum paper; ORG-173
 Aluminum; MAT-056
 Alzheimer disease; MED-038
 Alzheimer; MED-045
 Alzheimer's disease; ELE-052
 Alzheimer's disease; MED-036, ORG-057
 Amaranto; ELE-029
 Amazon Region; AMB-006
 Amazon; AMB-003, AMB-015
 Amazonia; QPN-106
 ambiental monitoring; ANA-018
 Amianto Crisotila; AMB-001
 amides; MED-025, ORG-002, ORG-049
 amina biogenica; ANA-113
 Aminoação redutiva; ORG-167
 Aminas biologicamente ativas; ANA-009
 AMINE; MAT-062
 Amino acid; MAT-036
 Amino acids; INO-028, ORG-113
 Aminoácidos; ORG-121
 Aminoglycosides; ANA-005
 ammonium; FIS-023
 Amodiaquine; MED-050
 Amônia; AMB-031
 Amorfó; BEA-008
 Amorphous film; MAT-094
 Amostrador-Passivo; AMB-074
 Amostragem em suspensão; ANA-083
 Amoxicillin; AMB-071
 Amperometric; ELE-051
 amphiphilic ions; AMB-054
 Amphotericin B; MAT-117
 Amylase; MED-037
 amyloid-like structures; MAT-127
 anabasine; QPN-091
 Anacardic acid; MED-017
 Anaerobic Digestion; TEC-005
 Analcime; AMB-030
 Análise direta de sólidos; ANA-020
 análise por componentes princi; ANA-055
 análise térmica; EDU-053
 Analogue of Prussian Blue; ELE-018
 Analytical chemistry; ANA-101, EDU-031
 Anaplastic thyroid; QPN-049
 Ancillary ligand; INO-022
 Android; EDU-021
 Anel triazólico; ORG-022
 Aniline; INO-022
 Annonaceae; QPN-027
 Anodization; MAT-056
 anthocyanins; ORG-054
 Anthostomella brabeji; QPN-018
 Anthracnose; QPN-052
 Anthraquinone; INO-094
 Anthrazoline derivatives; ORG-155
 Anti Scaling Surface; MAT-012
 antibacterial activity; BIO-009, MED-025,
 MED-044, QPN-087
 antibacterial; INO-097
 Antibiotic Resistance Genes; QPN-083
 Antibiotic; ORG-091
 Antibiotics; ANA-076
 Anticancer agents; ORG-122
 Anticancer drugs; TEC-001
 Anticancer; INO-012, INO-092, ORG-080
 Anticholinesterase activity; ORG-142
 anticholinesterase; QPN-064
 Antifungal activity; MED-034
 Antifungal properties; QPN-096
 antifungal; QPN-064
 Antifungals; ANA-014
 Anti-inflammation; ORG-094
 Anti-inflammatory activity; MED-035
 Anti-L. infantum activity; QPN-016
 antileishmania activity; ORG-138
 ANTILEISHMANIAL; QPN-073
 antileishmanial activity; QPN-027
 Antimalarials; ORG-066
 Antimelanoma; QPN-054
 Antimicrobial activities; QPN-023
 Antimicrobial activity; ORG-164, QPN-033
 Antimicrobial; QPN-059, QPN-073
 Antimicrobiano; BIO-008
 Antimicrobianos; ORG-048
 Antimony; EST-001
 antioxidant activity; BEA-005, BEA-014,
 ORG-065, ORG-141, QPN-007,
 QPN-020, QPN-055
 Antioxidant capacity; BEA-015
 antioxidant potential; QPN-009
 antioxidant; ORG-001
 antioxidante; MED-021, ORG-158
 Antioxidants; ELE-045, ORG-024, ORG-082
 Antiparasitic activity; QPN-080
 Antiparasitic; MED-048
 Antiplasmodial Activity; MED-019
 antiprotozoal activity; MED-018
 anti-Trypanosoma cruzi; MED-028,
 MED-052
 Antitrypanosomal; QPN-006
 antitumor activity; MED-041
 antitumor effect; ORG-032
 Antitumor; ORG-085
 Antitumorais; ORG-119
 antitumoral activity; QPN-004
 Antiviral; MED-024
 Antropoceno; AMB-065
 anxiolytic potential; BIO-004
 Aphis persica; QPN-090
 Aplidium accarense; QPN-025
 Aporphine Alkaloids; QPN-010, QPN-027
 App Inventor; EDU-021
 Appel reaction; ORG-036
 applied chemistry; MAT-087
 aprendizagem; EDU-013
 aptasensor; MAT-109
 Aquatic Environment; AMB-080
 Aqueous fraction; TEC-007
 Aqueous medium; ORG-127
 Aqueous phase; ANA-112
 aqueous synthesis; COL-008
 aqueous two-phase system; FIS-005
 Aqueous two-phase systems; FIS-016
 Aqueous Fraction; ANA-058
 Araucaria angustifolia; QPN-055
 arduino; ANA-096
 ARG; EDU-020
 Arginase; QPN-028
 Aristolochia warmingii; QPN-036
 Aristolochiaceae; QPN-036
 Armazenamento de Energia; ELE-030
 armazenamento de H2; FIS-022
 arrays of microelectrodes; ELE-032
 Arsênio; AMB-007, AMB-008
 Artemia salina; MED-011, QPN-034
 Artemisinin; QPN-093
 Artepillin C; MED-022
 Arthrospira platensis; QPN-100
 Artificial Neural Networks; MED-055
 Artigos Científicos; EDU-049
 Aryl ether; ORG-140
 aryl ketones; ORG-010
 Arylamides; ORG-075
 Arylation; ORG-074, ORG-123
 Arylations; ORG-147
 Aryldiazonium salts; ORG-074
 Aryloxylation; ORG-156
 Aspergillus niger; BIO-011
 Aspergillus; QPN-039
 Asteraceae; QPN-008, QPN-048, QPN-049,
 QPN-060, QPN-102
 asymmetric catalysis; ORG-152
 Asymmetric H-Bond Catalysis; ORG-097
 Asymmetric N-H Insertion; ORG-097
 Asymmetric S-H Insertion; ORG-174
 ATH-DKR; ORG-012, ORG-179
 Atividade anticâncer; ORG-022
 atividade antifúngica; ORG-062
 atividade antileishmania; ORG-168
 Atividade antimicrobiana; MAT-024,
 ORG-008, QPN-014, QPN-037
 atividade antipirônica; ORG-118
 Atividade antituberculose; INO-037
 Atividade Anti-Tumoral; ORG-096
 Atividade Biológica; ORG-033
 Atividade citotóxica; QPN-074
 Atividade Tripanocida; MED-005
 atividades biológicas; INO-099
 Atividades investigativas; EDU-058
 Atividades; QPN-088
 Atlantic Forest; QPN-041
 Atmospheric Pollution; AMB-063
 Atmosphere; AMB-081
 Atmospheric aerosol.; AMB-076
 Atomic absorption spectrometry; ANA-084
 Atomic Emission Spectrometry; ANA-085
 Atomic Fluorescence Spectrometry; ANA-033
 atorvastatin; ANA-092
 Attapulgit; ANA-061
 Au/TiO2; CAT-033
 AuNPs; ELE-006
 Au-Pd nanoparticles; CAT-006

Au-S; ELE-056
Autocatálise; ORG-116
Automated Digital Image Analysis; BEA-019
Automedicação; EDU-019
auxiliary ligand; INO-001
Avaliação mineral; BEA-018
Avaliação; EDU-061
azaBODIPY; ORG-143
Azadirachtin; QPN-090
Aza-Michael additon; QVE-016
Azavinyl carbenes; ORG-104
Azido intermediates; ORG-031
azlactone; ORG-040
Azobenzene Dyad; FOT-001
Azobenzene; MAT-106
azole; MED-040
Azul de metileno; INO-074

B

B16-F10 cell; QPN-054
B3LYP; TEO-005
Ba₂SiO₄:Eu²⁺; MAT-097
Baccharin; MED-022
Baccharis spheophylla; QPN-060
Bacillus amyloliquefaciens; ANA-057
Bacillus cereus; AMB-085
Back reaction; MAT-059
bacterial cellulose; MAT-092
Bacterial resistance; ANA-076
Bactericidal activity; MAT-056, QPN-082
Bactericidal assays; MED-043
Baeyer-Villiger; ORG-166
bagaço de cevada; ELE-001
Bagasse; AMB-059
Ball milling; CAT-028
bamboo-based Microreactors; ORG-077
Banana mesogen; MAT-085
Banana; AMB-016
Band Gap; ELE-041, MAT-142
Banisteriopsis malifolia; QPN-073
Base de Schiff; ORG-145, TEO-016
Bases de Schiff Tetrudentadas; INO-033
Bases de Schiff; CAT-014, ELE-017, INO-031
Basic Catalysis; INO-015
Baterias; ELE-030
battery; MAT-076
Bauhinia Forficata Link; QVE-012
bauxite; AMB-006
BC; AMB-045
BDD electrode; ELE-031
BEA zeolite; CAT-019
bean pod; ANA-070, TEC-008
Beer; BEA-019
Bent-Core Liquid Crystals; ORG-053
bentonita; FIS-029
Bentonite clay; MAT-055
Bent-shaped; ORG-070
benzene; AMB-033, MAT-040
benzil; ORG-071
Benzimidazóis; ORG-101
Benzimidazoles; ORG-159
benzimidazole; MED-028, MED-040, MED-052
Benzo(a)pyrene equivalent; AMB-041
benzo[b]selenofeno; ORG-095
Benzo[c]naphthridinediones; ORG-165
benzo[g]quinoxaline; ORG-071
benzoate derivatives; TEO-003
Benzodiazepines; ORG-031
Benzophenone; ORG-039
benzoquinona; ORG-118
Benzothiadiazol; INO-045
Benzothiadiazole; MAT-053, ORG-163
Benzothiazoles; INO-007
Benzotriazole; MAT-115
Benzoxadiazole; ORG-084
benzyl alcohol; ANA-012, CAT-006
Bergenin; QPN-033
Best 7; MAT-087
Beta blocker; ORG-156
Beta Cyclodextrin; MAT-069
beta-carboline; MED-047
beta-carboxamide thiophenes; ELE-003
beta-caryophyllene; BIO-004
beta-diketonate; MAT-144
beta-Diketones; INO-035
beta-enamino diketones; ORG-046
Betaine; QVE-003
betalains; FOT-008
beta-lapachona; ORG-052
beta-pinene; CAT-030
beta-secretase; QPN-058
Biarila; ORG-145
Biarilas; CAT-014
bibliometrics; QPN-009
Bibliometry; QVE-020
Bicromia; AMB-083
Bidens segetum; QPN-102
Bifunctional Catalysts; CAT-036
Big Data in chemistry; TEC-001
Bignoniaceae; QPN-057
bilayers; AMB-054
Bile acids; ORG-142
bimetallic nanoparticles; ELE-009, ELE-028
bimetallic; INO-029, MAT-091
binary mixture; ANA-103
Binding constants (K_b); ORG-178
Binding constants (K_b); INO-065
Binding energy; MED-054
bioactive compound; ORG-079
Bioactive glass; MAT-072
bioactive substances; ORG-133
bioactives compounds; ORG-060
Bioactivity; ORG-028, QPN-064
Bioadsorvente; AMB-026
Bioanalytical; ANA-105
Biocarvão; ANA-119
Biocatálise; CAT-005, ORG-017
biocatalysis; COL-007, ORG-002, ORG-034, ORG-094, QVE-014
Biocatalyst; CAT-002, CAT-024
Biochar; AMB-035, INO-034
biocombustíveis; AMB-053

Biocompatibility; MAT-133
bioconjugation; MAT-048
Biocromatografia; MED-051
biodegradation; ELE-011, ORG-091
Biodegradável; MAT-123
Biodiesel quality control; ANA-100
Biodiesel; ANA-038, ANA-066, CAT-007, ORG-001, ORG-061, QVE-007, TEC-002, TEC-006, TEC-010, TEC-011
Bioelectroreduction; ORG-034
Bioemalagem; MAT-024
Biogas; TEC-005
Biogenic Silica; MAT-001
Bioherbicida; ORG-171
Bioherbicidas; QPN-104
Bioinorganic Chemistry; INO-059, INO-070
Bioinorganic; INO-018
Biokerosene; ELE-045
Biological activity; QPN-024
Biological analysis; ANA-079
Biological samples; ANA-011, ANA-079
Biological treatment; AMB-036
Bioluminescence; QPN-064
Bioma Pampa; QPN-014
Biomarcadores geoquímicos; AMB-049
Biomarcadores; ANA-060, QPN-106
biomarker; MAT-034, ORG-110
Biomass Conversion; CAT-017
biomass; AMB-058, AMB-085, FIS-032, INO-034, TEC-007
Biomassa; AMB-026, MAT-122, ORG-076
Biomaterials; MAT-138, MAT-140
Bio-microfluidic device; ORG-077
Biomimetic catalysis; INO-082, INO-083
Biomimetic Reactions; INO-016, QPN-038
Biomimetic sensor; ELE-047
Biomonitoring; AMB-063
bio-oil; ANA-002, ANA-070, ANA-071, TEC-008
Bio-óleo; ANA-001, ANA-072
biopolymer; QVE-019
bioreduction; QPN-050
Bioremediation; AMB-085
Biorredução; ORG-017
Biosensor; ELE-022, ELE-051
Biosorbent; AMB-016, AMB-082
biosorption; AMB-051, AMB-069
Biossorvente; AMB-066
Biosurfactant; ANA-057
Biosurfactants; QPN-028
bipyridine; INO-038, INO-055
Bis(diphenylphosphino)amine; INO-092
Bis-azophenol; FOT-003
Bis-chalcones; MED-034
Bis-GMA free; MAT-113
BisGMA; FIS-021
Bisindolilmetanos; ORG-109
Bisphenol A; ANA-025
Bisphenol-A; AMB-067
Bistability; ELE-050
Bixa orellana; QPN-001
Black Pepper; BEA-002
Black phosphorus; MAT-076

Black tea; ANA-099
 Black Wattle gum; CAT-002
 Blendas co-contínuas; MAT-060
 Blendas Poliméricas; MAT-088
 Blendas; ANA-042
 Blends of poly(lactic acid); CAT-001
 blends; ANA-056, ANA-100
 Blue CVS Dye; TEO-006
 blue emitter; MAT-090
 BMP-7; MAT-139
 BODIPY; ELE-041, ORG-114
 Borohydride reduction; MAT-015
 boron-dipyrromethene; ORG-114
 Boronic Esters; CAT-016
 Borylation; CAT-016
 Botryosphaeran; MED-024
 Bougainvillea glabra flowers; QPN-020
 bps; ANA-064
 Br and I determination; ANA-024
 Branched Polymer; FOT-007
 Brazilian nut; ORG-091
 Breast cancer; ELE-021, INO-028,
 ORG-032
 Brij; COL-007
 Brix; ANA-036
 bromação oxidativa; INO-069
 Bromation; INO-045
 Bromelia antiacantha Bertol.; BEA-004
 Bromine; ANA-007
 bromoperoxidase; INO-069
 Brønsted acid; ORG-098
 brown algae; AMB-069
 brusone; QPN-013
 BSA; ORG-113
 Bucha vegetal magnética; ANA-078
 BuChE; MED-047
 Burkholderia thailandensis; QPN-083
 Butenolides; QPN-107
 Butyrylcholinesterase; MED-009

C

C. limonia; QPN-079
 C.sinensis; QPN-079
 Ca. Liberibacter asiaticus; QPN-097
 Ca₂/Mg₃Si₂O₅(OH)₄; CAT-027
 Caatinga; QPN-044, QPN-091
 cádmio; AMB-072, ANA-027, ANA-118
 Cadmium sulfide; FIS-013
 cadmium; AMB-084, BEA-001
 Cadmiun silicates; MAT-142
 Café; ANA-049
 Cafestol; ORG-063
 Caffeic Acid; ELE-049
 CALB; COL-007
 Calcium carbonate; FIS-006
 Calcogeno aminas; ORG-096
 Calcogeno-cianoidrinas; ORG-132
 Calea pinnatifida; QPN-049
 Calibração Multivariada; ANA-036
 Calibration Strategies; ANA-023
 Calixarenes; INO-015
 Calixarenos; INO-098

Calorimetry; COL-007
 Canavalia ensiformis; AMB-070
 Cancer nanosystem carrier; MED-039
 Cancer treatment; QPN-028
 Câncer; INO-041
 cancer; MAT-026, MAT-118, MED-015,
 MED-027, MED-053, ORG-005,
 ORG-042
 Câncer; ORG-090
 Cancer; ORG-120, QPN-001
 Candida albicans; ORG-164
 Candidíase; QPN-014
 Candidatus Liberibacter; QPN-086
 Caneta 3D; ANA-093
 Capacidade de Complexação; AMB-007
 Capillary electrophoresis; ANA-005,
 ANA-090
 Capsicum sp.; ORG-139
 Capsules; COL-004
 Captopril; MAT-071, MAT-093
 captura de CO₂; FIS-022
 Caracterização estrutural; QPN-015,
 QPN-066
 caracterização físico-química; ANA-055,
 FIS-033
 Caracterização; AMB-043, ANA-108,
 BIO-005
 Caramboxin; QPN-084
 carbamazepine; ANA-040
 carbamoyl radical; ORG-117, ORG-165
 Carbamoyl-phosphate; ORG-110
 Carbendazim; ELE-048
 Carbendazim; ELE-057
 Carbohidrazonamidas; MED-005
 Carbohydrate; ORG-113, TEO-010
 Carbon dioxide capture; ORG-035
 Carbon Dioxide; CAT-038, INO-007,
 INO-023, INO-057, TEO-014
 Carbon nanomaterials; MAT-078
 Carbon Nanotubes; CAT-009, ELE-010,
 ELE-047, MAT-026, MAT-032,
 MAT-047, MAT-051, MAT-058,
 MAT-065, MAT-067, MAT-079
 Carbon Nitride; MAT-119
 Carbon/iron composites; AMB-071
 Carbon; MAT-073
 carbonate; INO-042
 Carbonização Hidrotérmica; MAT-122
 Carboxamida; ORG-176
 Carboximetilquitosana; MED-011
 Carboxylates; INO-102
 Carboxylesterase; MED-007
 carboxylesterases; TEO-003
 Carboxylic acids; ORG-131
 Carboxymethyl Cellulose; MAT-133
 Carboxymethylation; ELE-051
 Carcinogenic compounds; AMB-041
 Cardiotonic steroids; ORG-042
 Cardiovascular diseases; INO-091
 Carne bovina; ANA-062, BEA-009
 Carotenoid; QPN-094
 Carotenoids; QPN-100
 Carreira; EDU-018

carvacrol; ORG-044
 Carvão Ativado; AMB-020
 Caryophyllene Oxide; MED-037
 Casca de Tangerina; MAT-024
 Cascade Cyclization; ORG-165
 Cascade reactions; QVE-016
 Casearia arborea; QPN-062
 Cassava starch; ANA-054
 Castanha-do-Brasil; ORG-091, ORG-094
 Catalisadores; INO-003
 Catálise enzimática; ORG-157
 Catálise heterogênea ácida; CAT-007
 Catálise Heterogênea; CAT-003, CAT-023
 catálise; CAT-020, INO-003, INO-014,
 INO-069, INO-078, MAT-130
 Catalysis; CAT-015, CAT-028, CAT-033,
 CAT-037, FIS-014, INO-040, MAT-021,
 MAT-091, MAT-110, MAT-111, MAT-141,
 MAT-145, ORG-069, ORG-180
 Catalyst; CAT-040, INO-058
 catalysts; MAT-057
 catalytic pyrolysis; TEC-008
 Catequina; QPN-046
 Cathodic stripping voltammetry; AMB-039
 CCRD; ANA-007
 CCU; CAT-033
 CDA; ORG-131
 CdTe; ANA-089
 Cedrol; ORG-172
 Cell culture; INO-044
 cell death; INO-096
 Cellulose beads; MAT-138
 Cellulose nanocrystal; MAT-072
 Cellulose Nanocrystals; MAT-133
 Cellulose nanowhiskers; MAT-011, MAT-049
 Cellulose Paper; MAT-108
 Celulose acetate; MAT-063
 Celulose Bacteriana; MAT-098
 Celulose; QVE-013
 Cenoura; ORG-017
 Central Composite design; ANA-114
 CeO₂; CAT-029
 Ceramics; MAT-132
 Cereus jamacaru; QPN-105
 Ceria nanorods; MAT-111
 Ceria; MAT-110
 cerium oxide; ELE-016
 Cerium; INO-080, MAT-013, MAT-096
 C-H activation / borylation; ORG-079
 C-H activation; ORG-018
 C-H functionalization; ORG-104, ORG-128
 C-H Oxidation; ORG-172
 Chá diet; ANA-094
 Chagas disease; MED-028, MED-040,
 MED-052, MED-055, MED-057,
 MED-058, ORG-159, QVE-017
 Chagas; ORG-052
 Chagas' disease; MED-014
 Chalcogenides; TEO-020
 Chalcona; ORG-048
 Chalcone; ORG-019, ORG-173, QPN-050
 Chalcones; MED-018, ORG-010, ORG-060,
 ORG-146

chalk-harrod mechanism; INO-001
 Characterization; AMB-015, AMB-030, AMB-050, AMB-056, AMB-057, INO-048, INO-101, MAT-004, MAT-035, QPN-059
 Charge Extraction; MAT-059
 Chemical characterization; ORG-032
 Chemical composition; QPN-023
 Chemical compounds; QPN-076
 Chemical ecology; QPN-048
 Chemical Education; EDU-006
 Chemical elicitation; QPN-018
 Chemical equilibrium; EDU-005
 Chemical modification; AMB-011
 Chemical Structure; QPN-054
 Chemical synthesis of graphene; MAT-084
 Chemical synthesis; MAT-040
 Chemiluminescence; ANA-030
 Chemometrics; QVE-012
 Chemistry Click; ORG-044
 Chemistry Education; EDU-054, EDU-067
 Chemistry Teachers; EDU-027
 CHEMISTRY TEACHING; EDU-007, EDU-066
 Chemistry; EDU-022, EDU-024, EDU-034, TEO-004
 Chemodosimeters; ORG-038
 chemometrics tools; ANA-105
 Chemometrics; ANA-045, ANA-047, QPN-056
 Chemoselectivity; ORG-125
 Chemosensor; INO-004
 Chemotypes; QPN-002
 chia seed oil; BEA-021
 Chicken tissues; ANA-021
 Chikungunya Virus; MED-001
 Chiral b-Ketosulfoxonium Ylide; ORG-174
 chiral center; ORG-031
 chitosan; AMB-084, COL-005, FIS-019, MAT-042, MAT-139
 chlorate; FIS-001
 Chlorination; AMB-027
 CHO-k1; MAT-034
 choline bitartrate; FIS-005
 choline chloride; FIS-005
 Cholinesterases; MED-045
 chromatography; ANA-012, ANA-067, QPN-055
 Chromenes; MED-015
 chromium; MAT-002
 Chromotropic acid; ANA-115
 Chumbo (II); ELE-001
 Chumbo; AMB-070, ANA-116, ELE-025, ELE-048
 Chuva Ácida; AMB-001
 Ciclodextrina; FIS-021
 Ciência; EDU-002, EDU-060, EDU-072
 Cinema; EDU-047
 Cinética de adsorção; FIS-030
 Cinética de intumescimento; MAT-081
 Cinética química; AMB-023
 cinética; FIS-025
 Cinética; FIS-026, ORG-116
 Cinnamic acid; ORG-170
 Ciprofloxacin; CAT-008
 Citric acid; MAT-114
 Citrus latifolia; QPN-077
 Citrus peels; AMB-060
 Citrus pests; QPN-065
 Citrus reticulata; MAT-024
 Citrus sinensis; QPN-086, QPN-097
 Citrus; QPN-082, QPN-085
 Cladophora nanocellulose; MAT-138
 CLAE; ORG-021
 CLAE-IES-MS; QPN-105
 Claisen rearrangement; ORG-004
 Classificação de Solos; ANA-043
 Classificação; ANA-042
 Clay; ANA-045
 Click chemistry; CAT-011, MED-002, MED-032, ORG-018, ORG-170
 Click reaction; ELE-038
 click; ORG-093
 "click" chemistry; ORG-005
 Click-chemistry; ORG-077
 Clinoptilolita; AMB-024, AMB-031
 Clonal mini-garden; BEA-001
 cloning; ORG-002
 Cloreto de cobalto; ANA-121
 Cloreto de colina; ELE-007
 clorídric acid; MAT-092
 clorocicloexano; CAT-023
 Clorofila a; ORG-171
 Clorpirifós; ANA-074
 Cluster trinuclear; INO-072
 cluster; ORG-003
 Co(II) nitrate; MAT-070
 Co(II); INO-032
 CO₂ adsorption; MAT-119
 CO₂ Conversion; CAT-033
 CO₂; CAT-036
 Coagulação; ELE-004
 Coal fly ashes; AMB-022
 Coated fertilizer; TEC-003
 Coaxial fibers; MAT-143
 cobalt (II) hydroxysalicylate; INO-062
 cobalt aluminate; MAT-070
 Cobalt complexes; INO-073
 cobalt ferrite; CAT-034, INO-067
 cobalt lamellar hydroxide; INO-062
 Cobalt Phthalocyanine; ELE-057
 Cobalt(II) Hydroxysalicylate; INO-049
 Cobalt(II) phthalocyanine; MAT-014
 Cobalto(II); INO-081
 Cobalto(III); INO-041
 Cobre (II); INO-025
 Cobre(II); INO-046, INO-074
 Cobre; AMB-024, ELE-025, ELE-048, ELE-055
 Cobre-índio; ELE-007
 Cocaine adulterant; FIS-016
 Cocaine; ANA-097
 Cocitation Analysis; QVE-020
 Cofactor binding; ORG-110
 Coffee; ANA-013, ORG-063
 co-immobilization of enzymes; QPN-058
 Coixespirolactamas; ORG-068
 cold filter plugging point; TEC-002
 cold vapor; ANA-111
 Cold-adapted AbAdh; CAT-025
 collard greens; QPN-090
 colloids suspensions; AMB-054
 Color histograms; ANA-054
 colorimetria; BEA-007
 colorimetric detection; FIS-009
 column set; ANA-002
 combretum mellifluum; ORG-168
 Commercial Organic Fertilizer; AMB-028
 Compatibility; ANA-014, ANA-120
 Competências; EDU-048
 Complex/DNA; INO-071
 Complex; COL-007
 Complexes; ANA-107, INO-102, QPN-065
 complexity; FIS-001
 Complexo de Cobre(II); INO-030
 complexo de inclusão; FIS-021
 Complexo de paládio(II); INO-031
 Complexo; ELE-048
 Complexos Binucleares; INO-033
 Complexos de cobre(II); INO-037, INO-068
 Complexos heterometálicos; INO-079
 Complexos metálicos; ELE-053
 Complexos; INO-020, INO-100
 comportamento reológico; ANA-056
 Composite hydrogel; INO-044
 Composite; ELE-043, MAT-021
 Composites; MAT-136
 Compósito Carbonáceo; CAT-020
 Compósitos; MAT-060
 composto de coordenação; INO-099
 compostos cumarínicos; ELE-055
 Compostos de Coordenação; INO-005
 Compostos fenólicos; QPN-012
 Compostos polinucleares; INO-077
 Compostos voláteis; BEA-016
 Compostos; QPN-088
 Comprehensive two-dimensional; ANA-004
 Computational chemistry; ORG-027, TEO-009
 computational studies; MED-041, TEO-003
 Computer Aided Drug Design; MED-016
 Comunidade; EDU-070
 Concealed ore deposits; AMB-055
 Conceptions; EDU-027
 Conceptual Change; EDU-006
 Conceptual Profile; EDU-006
 Condensação; ORG-100
 conducting polymers; ELE-019, MAT-124
 conductive polymer; ELE-039
 Conductive Polymers; MAT-134
 conductor polymer; MAT-051
 Conformational Analysis; INO-061, ORG-146, TEO-017
 Conhecimento prévio; EDU-057
 Conjugado Quinolono-triazólico; ORG-176
 conjugated addition; ORG-059
 Conservation; AMB-014

Constantes de formação; INO-014
 Construtivismo; EDU-039
 Contaminação ambiental; CAT-020
 Contaminação; AMB-049
 contaminante ambiental; INO-027
 Contaminated water remediation; ANA-061
 contamination; AMB-038
 Contextualização; EDU-057
 CONTEXTUALIZATION; EDU-024
 Contextualized approach; EDU-031
 Continuous flow conditions; ORG-148
 Continuous Flow; ORG-029, ORG-117,
 ORG-151, ORG-162
 Controle de Praga; QPN-104
 Controlled drug delivery; MAT-143
 Convection; ELE-050
 Coordination Chemistry; INO-026
 coordination complexes; INO-054
 Coordination compound; INO-009
 Coordination Compounds; INO-006
 Coordination Polymers; INO-063
 Copaiba; QPN-106
 Copolymer; QVE-011
 co-polymers with EDOT; ELE-003
 Copper (II) Complexes; INO-039
 Copper complex; INO-017, INO-053,
 INO-096
 Copper ferrite; MAT-071, MAT-095
 copper hydroxide nanowires; BIO-009
 copper microelectrodes; ELE-032
 Copper nanoparticles; ELE-018
 Copper oleate; MAT-029
 Copper oxide; MAT-029
 Copper(2+) complexes; INO-090
 Copper(II) complex; INO-085
 Copper(II); INO-036
 Copper; EDU-003, MAT-074
 co-precipitation; INO-049
 Corante ácido; FIS-027
 corante básico; FIS-029
 Corante sintético; ELE-029
 Corante; FIS-030
 Corantes Alimentícios; ANA-037
 Corantes Reativos; CAT-005
 Corantes; AMB-066
 Core-shell; ANA-015
 Corey-chaykovsky epoxidation; ORG-137
 Corrosão; ELE-020, MAT-041
 Corrosion inhibitor; ELE-038, ORG-001,
 TEO-009
 Corrosion Inhibitors; ORG-086
 Corrosion; COL-004, EDU-003
 Cosmetics; CAT-004
 Costic acid; QPN-080
 Cotidiano; EDU-056
 Coumarin; FOT-006, MAT-068, ORG-175
 coumarine; ANA-059
 coumarine-b-ketoester; INO-055
 Coumarin-hydrazone; INO-017
 Coumarins; MED-025, ORG-147
 coupling reaction; CAT-039
 Coupling reactions; ORG-049
 Coupling Reagents; ORG-075
 Covalent Organic Frameworks; MAT-035
 Covalent; MAT-079
 CP/PARAFAC; AMB-057
 Crambe seeds; ANA-071
 Cristais Líquidos; ORG-150
 Cristal de violeta; EDU-011
 Cristal líquido; INO-010
 Cristalinidade; MAT-098
 Cristalização; BEA-008
 Croconato; INO-081
 Cromatography; QVE-008
 Cromo; AMB-020, ANA-078, ANA-080
 cross-coupling; TEO-002
 Crosslink; MAT-105
 Crosslinking; QPN-003
 Cross-resistance; AMB-010
 Cross- β structure; MAT-039
 Crostalaria spectabilis; QPN-063
 Croton antisiphiliticus; QPN-009
 Crown ether; ORG-038
 crude oil; ANA-008, ANA-022
 crumpled graphene; MAT-074, MAT-126
 Cruzain; FIS-010, MED-057
 crystal growth; MAT-037
 crystal size; INO-042
 Crystal Violet, Photo-; CAT-022
 Crystalline Materials; MAT-035
 crystallite size; MAT-052
 Crystallography; EST-001, INO-017
 CSA; ORG-131
 CTAB; COL-003
 ctDNA; MED-015
 CTS; EDU-038
 Cu (II) Adsorption; MAT-031
 Cu(II) complexes; INO-055
 Cu(II); INO-032
 Cu²⁺ ions; MAT-049
 Cultivo Orgânico; ANA-049
 cultura indígena; EDU-029
 cultural heritage; MAT-087
 Cumarina; INO-041, MED-003
 Cumarinas; MED-006
 Cu-Nanotubes; CAT-011
 CuO nanoparticles; CAT-028
 cup horn; ANA-077
 curcumin; MAT-068
 Curcumina; ANA-032
 curva analítica; ELE-046
 Curve levels; QPN-056
 CVD process; MAT-078
 CVD; MAT-032
 CVG-ICP-MS; ANA-022
 Cyanobacteria; AMB-048
 Cyanohydrins; ORG-065, ORG-151
 Cyclic carbonate; INO-007
 Cyclic carbonates; INO-023
 Cyclic voltammetry; ELE-047, INO-054
 cyclization; ORG-073, ORG-161
 Cycloaddition reactions; INO-057
 Cyclodextrin; CAT-015, COL-007, MED-046
 Cyclopropanation; ORG-030
 cyclopropane; ORG-010, ORG-124
 Cyclopropylidenelactam; ORG-124
 Cysteine probe; INO-017
 Cysteine proteases; QPN-075
 Cytochrome P450; INO-082
 Cytochrome P450; INO-083
 Cytotoxic activity; QPN-049, QPN-087
 Cytotoxicity; INO-094, INO-096, MED-059,
 ORG-040, QPN-025

D

Dammarane-type triterpene sapo; QPN-098
 data fusion; ANA-041
 Database; MED-030
 dbCICA; MED-029
 Decarboxylation; ORG-136
 Decavanadato; INO-074
 Decolorgriseofulvin; QPN-069
 decomposition; AMB-078
 Decontamination; CAT-026
 Deep eutectic solvent; QPN-095
 Deep-red/NIR emitters; INO-050
 defects; MAT-066
 Defense Response; QPN-103
 Deficiência; EDU-017
 Degradação de corantes; INO-074
 degradação eletroquímica; ELE-005,
 ELE-029
 Degradação; FIS-026
 Degradation; AMB-067, FIS-017
 Denaturation; INO-071
 Density Functional Theory; TEO-015,
 TEO-020
 Density of states; TEO-020
 Density; EDU-006
 Deoxycholic acid; ORG-142
 Dephosphorylation reactions; CAT-031
 Depolymerization; MAT-015
 Deposição seca e úmida; AMB-052
 Deposition-Precipitation; MAT-111
 Dereplication procedures; QPN-016
 Dereplication; QPN-032, QPN-062
 Derivados de resveratrol; ORG-158
 Derivados lácteos; BEA-008
 derivados triazólicos; ORG-062
 derivatização; MED-021
 Derrames de petróleo; ANA-060, ANA-069
 Desafios na aprendizagem; EDU-033
 Descarboxilação de aminoácidos; ANA-009
 Descarte de Óleo; EDU-045
 Descoloração; FIS-026
 Desenvolvimento Sustentável; EDU-045
 Design of experiments; CAT-004
 designed nanomaterials; COL-007
 Desigualdade Social; EDU-016
 Desigualdade; EDU-018
 desphosphorylation reactions; FIS-015
 Dess-Martin Periodinane; ORG-030
 destruction; FIS-014
 desymmetrization; ORG-026
 Detecção colorimétrica; ANA-093
 detecção; BEA-007

Determinação direta; ANA-083
 determinação voltamétrica; ELE-001
 detoxificação; MAT-054
 Detoxification; CAT-002, ORG-087
 Development of new drugs; MED-043
 dexamethasone; ANA-068
 DFT calculations; TEO-002
 DFT; INO-001, INO-020, INO-061, INO-075,
 MAT-066, ORG-027, TEO-001,
 TEO-011, TEO-013, TEO-014,
 TEO-019
 DFT-DT; TEO-013
 DGT; AMB-048
 Diagnostic ratio; AMB-045
 Dialysis; QPN-081
 Diamante dopado com boro; ELE-029
 diamides; ORG-040
 diaminomaleonitrile; INO-021
 Diastereodivergence; ORG-152
 Diazo carbonyls; ORG-098
 diazo compounds; ORG-099
 diazo transfer reaction; ORG-099, ORG-127
 Diazoketone; ORG-134
 Dichalcogenides; TEO-004
 dichromate; EDU-065
 Dicroísmo circular; ORG-021
 Didactic models; EDU-027
 DIDACTIC SEQUENCE; EDU-007
 Didática de ensino humanizada; EDU-057
 Diels-Alder; ORG-102
 Diethyl ether; CAT-019
 Diferentes substratos; ELE-008
 Different Drying process; MAT-030
 Differential Scanning; ANA-120
 Difração de raios X; INO-077
 Digital image; BEA-019
 digital images; ANA-040
 Digitoxin; ORG-042
 Diglycerol; CAT-004
 digoxin; MAT-026, ORG-042
 Dihydroartemisinin; QPN-093
 dihydropyridiminoes; ORG-178
 dihydropyridines; ORG-014
 Diisocianato hexametileno; ORG-076
 Diluição de aerossol; ANA-086
 Dimethyl Ether; CAT-036
 Dimethyl sulfoxide; INO-022
 Dimroth rearrangement; ORG-067
 Dineolignans; QPN-029
 Diol; ORG-140
 Dion-Jacobson; MAT-128
 Dioxolene; INO-073
 dip-coating; MAT-112
 dipeptide; FOT-010
 diphenylalanine (FF); FOT-004
 Dipyrins; ORG-015
 Dipyrromethane; ORG-015
 Direct aminolysis; ORG-094
 Direct determination; ANA-033
 Direct Solid Sample Analysis; ANA-023
 Disinfection By-Products; AMB-027
 Dispersive micro-solid phase; ANA-065
 disruptor endócrino; INO-027
 Dissulfeto de carbono; CAT-010
 Distribution function; TEO-010
 Disulfides; ORG-153
 Diversified Methodologies; EDU-066
 Divulgação científica; EDU-038, EDU-040
 Divulgação da ciência; EDU-023, EDU-056
 DLLME; ANA-011
 DNA interaction; INO-090, INO-094
 DNA/HAS binding studies; MED-041
 DNA; ANA-096, BIO-006, INO-012,
 INO-045, INO-059, INO-092, ORG-130
 Do it yourself; EDU-025
 Docentes; EDU-018
 Docking; MED-009, MED-012, MED-037,
 MED-038, MED-044
 Dodecanol; ORG-169
 Doehlert design; ANA-114
 Doença de Alzheimer; MED-003
 Doença de Chagas; ELE-015, MED-005,
 MED-006
 doença do sono; TEO-008
 Doenças do Prion; ORG-118
 Donor-Acceptor Systems; ELE-003
 dopagem; MAT-045
 Doping; INO-064
 Doxorubicin Delivery; MAT-118
 DPPC; FIS-019
 DPPG; FIS-019
 DPPH; MED-011, MED-023, QPN-020,
 QPN-046
 dpz; FOT-006, INO-045
 DPX; AMB-046, ANA-028, ANA-068,
 ANA-080
 drift; ANA-018
 Drilling Fluid Waste; AMB-050
 Drosophila melanogaster; MED-035
 Drug delivery systems; MAT-117, MAT-118
 drug delivery; MAT-121, MED-059
 drug design; MED-053, ORG-082
 drug discovery; MED-030
 Drug Release; MAT-133
 drug; AMB-078, ANA-061, TEC-004
 Drugs; ANA-120, MED-060
 dry-hopping; BEA-010
 Drying Step; BEA-002
 DSSC; MAT-059, TEO-013
 Duguetia lanceolata; QPN-027
 Duguetia surinamensis; QPN-017
 D-xylose; ELE-024
 Dyciandiamide; MAT-119
 Dye; AMB-082, COL-009, FIS-012
 Dyes; AMB-037, ELE-011, FOT-008,
 MAT-096
 Dynamic kinetic resolution; ORG-051

E

(E)-2-methyl-3-phenylacrylalde; ORG-166
 E-caryophyllene; QPN-002
 ECL; ELE-012
 Eco-friendly; ORG-153
 Ecology; QPN-041
 Edible oil; ANA-084
 Editores de vídeo gratuitos; EDU-035
 EDTA extraction; AMB-022
 EDTA; MAT-089
 Educação em Química; EDU-051
 Educação indígena; EDU-052
 educação lúdica; EDU-068
 Educação Midiática; EDU-050
 Educação Pública; EDU-028, EDU-060,
 EDU-072
 Efeito Push-pull; TEO-016
 Eficiência Catalítica; AMB-009
 Efluente Industrial; AMB-020
 Efluente Real; ELE-004
 Eichhornia crassipes; QPN-035
 EIEB; ANA-081
 EIS; ELE-006
 Elastase; ORG-039
 electrical measurements; MAT-112
 Electroanalysis; ELE-027
 electroanalytical; ELE-044
 Electroactive polymer; ELE-039
 Electrocatalysis; MAT-094
 Electrocatalyst Non-linear dy; ELE-040
 Electrocatalytic activity; ELE-026
 Electrochemical Degradation; TEO-006
 Electrochemical detection; ELE-045
 Electrochemical immunosensor; ELE-021
 Electrochemical measurements; ELE-038
 electrochemical mechanism; ELE-031
 Electrochemical Polymerization; MAT-009
 electrochemical probe; ANA-092
 Electrochemical properties; INO-047
 Electrochemical Sensor; ELE-024, ELE-033
 Electrochemical sensor; ELE-054
 electrochemical sensors; MAT-126
 Electrochemical Texturing; MAT-012
 Electrochemical; ELE-051
 Electrochemistry behavior; ELE-002
 electrochemistry; ELE-011, INO-092,
 MAT-084, ORG-034
 Electrodeposition; MAT-094
 Electrolyte; MAT-059
 Electronic nose; BEA-017
 electronic transtion; FIS-018
 Electrophotocatalysis; MAT-075
 electropolymerization; ELE-003
 electrospinning; FIS-020, MAT-143
 Electrospray; ANA-075
 Elementary School; EDU-037
 elementos químicos; EDU-068
 Elements availability; AMB-022
 Eletrocatalisador; INO-030
 Eletrocatalise; ELE-013
 eletrochemical sensor; MAT-074
 Eletrodeposição; ELE-007, ELE-008
 Eletrodo de Grafite; ELE-053
 eletrodo de ouro; ELE-036
 eletrodos de grafite; ELE-055
 Eletrodos modificados; ELE-001
 Eletroforese Capilar; ANA-016
 Eletroforese em Gel; ANA-037

Eletroquímica; EDU-063, ELE-030, ELE-046, ORG-107, ORG-108
 Eletrossíntese; ORG-107, ORG-108
 Eliminação de Selenóxido; TEO-005
 Eliminação de Sulfóxido; TEO-005
 Embalagens ativas; MAT-024
 Embalagens; MAT-123
 Emerging contaminant; AMB-071
 Emerging contaminants; AMB-013, MAT-077
 Emerging environmental substance; ELE-027
 Emerging pollutant; MAT-055
 Emerging Pollutants; ANA-123
 emission spectrum; INO-076
 emissões veiculares; AMB-053
 emulsão; ANA-082
 Emulsion breaking; ANA-084
 Emulsões; COL-001
 Enalapril; MAT-071
 Enaminoésteres; ELE-020
 Enantiomeric discrimination; ORG-131
 Enantioselective oxidation; CAT-025
 Enantioselective Pd catalysis; ORG-154
 Enantioselective Sensing; ORG-113
 Enantioselectivity; ORG-123, ORG-162
 endocrine disrupter; ELE-009
 Endocrine disruptors; ANA-073, MAT-018
 Endohytic fungi; QVE-014
 endophytic fungi; QPN-045
 Endophytic fungi; QPN-018, QPN-024, QPN-062
 Endophytic fungus; QPN-039, QPN-051
 Endopleura uchi; QPN-033
 Enem; EDU-048, EDU-063
 Energia de superfície; MAT-088
 energy storage devices; MAT-050
 energy storage; ELE-019
 Energy transfer; MAT-090, MAT-107
 Energy; MAT-101, TEC-010
 enol éter; MED-021
 Enone; ORG-070
 enones; ORG-010, ORG-051
 enrichment; CAT-034
 ensino baseado em desafios; EDU-062
 Ensino da Química Verde; QVE-010
 Ensino de ciências; EDU-056, EDU-064
 Ensino de Química; EDU-001, EDU-004, EDU-008, EDU-012, EDU-023, EDU-025, EDU-028, EDU-035, EDU-038, EDU-043, EDU-044, EDU-046, EDU-047, EDU-048, EDU-050, EDU-052, EDU-053, EDU-056, QVE-005
 Ensino Médio; EDU-019, EDU-028, EDU-033, EDU-050
 Ensino por investigação; EDU-058
 ensino; EDU-013, EDU-060, EDU-070, EDU-072
 Environment; MAT-104
 Environmental chemistry; AMB-076
 Environmental decontamination; QPN-028
 Environmental impact.; AMB-022
 enzimas; MAT-054
 Enzymatic hydrolysis; MED-007
 enzymatic kinetic resolution; ORG-006
 Enzymatic Promiscuity; ORG-013
 Enzyme Immobilization; BIO-002, CAT-024, MED-042
 Eois; QPN-021
 Epicoccum nigrum; QPN-013
 Epigenetic modification; QPN-067
 Epigenetics; MED-058
 epi- α -cadinol; QPN-002
 Epoxide; ORG-124
 Epóxido; CAT-010
 EPS; MAT-129
 equilibrium parameters; FIS-031
 Eritrosina B; ANA-063
 Erlenmeyer Azlactone; TEO-001
 Erva de passarinho; QPN-019
 Erva mate; BEA-001
 Erythricium; QPN-082
 Esgoto; ELE-004
 ESIPT; FOT-003
 ESKAPE; ORG-008
 Espalhamento de luz dinâmico; COL-001
 Especiação Química; AMB-008
 espectrofluorimetria; AMB-064
 espectrofotometria; AMB-064, ANA-121
 Espectrometria de Massas; ANA-069, QPN-086
 Espectroscopia; MAT-135
 Essential Oil; MED-035, MED-048, QPN-023, QPN-052, QPN-096
 estabilização; MAT-086
 Estanano; ANA-087
 Estequiometria; EDU-021
 Estereosseletividade; ORG-121, ORG-157
 Estereotipo; EDU-059
 Esteres moiety; MED-007
 Esterificação; CAT-007
 esterification; CAT-021, ORG-003, ORG-026
 esteroides; ORG-168, QPN-012
 Esteróis; AMB-049
 Estrobilurinas; ANA-122
 Estrogenic activity; ANA-073
 Estrone; ELE-044
 Estrutura cristalina; MAT-135
 estudantes; EDU-036
 Ethanol dehydration; CAT-019
 Ethanol Production; CAT-033
 Ethanol; ANA-100, ANA-115
 ethanolic; QPN-073
 Etherification; CAT-004, ORG-169
 ethyl (hydroxyethyl) cellulose; FIS-020
 Ethylenediamine; INO-056
 Etilenoglicol; ELE-007
 ETV-ICP-MS; ANA-023
 Eucalipto; FIS-034, MAT-043
 Eugenia copacabanensis; QPN-005
 Európio; MAT-025
 Europium(III) complex; INO-088
 europium(III); INO-029
 Europium; INO-064, MAT-034
 Eutectic; ANA-104
 Eutrofização; AMB-077
 excited state geometry; FIS-018
 Experiências de Piaget; EDU-039
 experimentação investigativa; EDU-044
 Experimentação; EDU-041, EDU-043, EDU-044, EDU-060, EDU-063, EDU-072
 Experimental Activity; EDU-042
 experimental design; AMB-058, AMB-067, ANA-007, ANA-114
 Experimento; HIS002
 experimentos; EDU-013, EDU-033
 explosive thermal reduction; ELE-034
 Explosivos; ANA-098
 Exserohilum rostratum; QPN-051
 Extensão; EDU-023, EDU-060, EDU-072
 Extension project; EDU-034
 Extension; EDU-067
 Extração Celulose; AMB-017
 extração em fase sólida; ANA-027, ANA-080
 Extração por solvente; EDU-052
 Extração sequencial; AMB-008
 Extração; AMB-005, ANA-062, ANA-078, ANA-081, ANA-110, BIO-005
 extract; QPN-073
 Extraction solvent; QPN-007
 Extraction; AMB-037, ANA-013, ANA-067, ANA-112
 Extracts; QPN-068
 Extration; QPN-094
 extrato aquoso; MED-023
 Extrato; QPN-088
 Eye drops; ANA-109
 Eye Shadow; ANA-023

F

F AAS; ANA-081
 FAAS; ANA-027, ANA-110
 Fabaceae; QPN-012, QPN-044
 Factorial design; AMB-029, ANA-057, INO-042, QVE-001
 Fake News; EDU-050
 Fármacos; AMB-009
 Fatty acids; AMB-037
 Fatty amide; ORG-094
 Favolus brasiliensis; QPN-066
 Fe(II); BEA-015
 Fe(III); ANA-029, ANA-109
 Fe₃O₄ nanoparticles; CAT-012, MAT-031
 Feira; EDU-070
 Feminismo; EDU-018
 fenilhidrazina; ORG-101
 Fenóis; QPN-046
 Fenólicos; QPN-047
 fenoxietanol; ELE-005
 Fenton Heterogêneo; AMB-009, MAT-130
 Fenton; ORG-068
 Fenton's reaction; AMB-019
 fermentação em estado sólido; BIO-011
 Ferramentas digitais; EDU-035
 Ferrita de Cobre; MAT-093
 Ferrite Copper; MAT-104
 Ferrite; CAT-022

Ferro(II); ANA-039
 ferrocenyl-porphyrins; INO-066
 FF AAS; ANA-026
 Fibra de coco verde; QVE-013
 Fibras de Amianto; AMB-001
 fibras poliméricas; ELE-046
 Fibroin; FOT-011
 fibronectin; ELE-039
 Filme condutor; ELE-008
 Filmes finos; INO-010
 Filtro Solar; ANA-048
 Fingerprint; QVE-001
 FINKELSTEIN REACTION; QVE-007
 Fisciona; QPN-053
 Fitoextração; AMB-070
 Fitorremediação; AMB-070
 Fitoterápicos; ANA-110
 Flammable; MAT-044
 Flavonoid; BEA-006
 Flavonóides; FIS-024, QPN-011
 Flavonoides; QPN-046, QPN-047, QPN-072
 flavonoids; ORG-141, QPN-070, QPN-092
 flavylum salts; ORG-054
 Flipped Classroom; EDU-032
 Floresta Amazônica; QPN-066
 Florestas Inundáveis; AMB-068
 fluorescence; ORG-041
 flow analysis; ANA-090
 Flow batch analysis; BEA-003
 flow chemistry; ORG-077
 Flowers; QPN-068
 fluidized bed reactor; MAT-032
 Fluorescence microscopy; MED-059
 Fluorescence; AMB-057, ANA-089,
 FOT-003, FOT-007, FOT-009, INO-012,
 INO-070, ORG-073, ORG-089,
 ORG-161
 Fluorescência da clorofila a; QPN-104
 Fluorescência; ANA-032
 fluorescencia; ANA-113
 Fluorescência; ANA-122, EDU-009,
 INO-010, INO-072
 fluorescent compounds; ORG-060
 Fluorescent light; FIS-028
 Fluorescent probe; ORG-113
 Fluorescent silica; ORG-163
 Fluorescent silsesquioxane; ORG-163
 Fluoresceny hybrid-materials; ORG-163
 Fluorine; ORG-064, TEO-007
 Fluorogenic chemosensors; ORG-038
 fluorophores; ORG-114
 Fluoroquinolone; INO-011
 Fluoxetine; ORG-154
 Fly Ash; MAT-003
 folic acid; MAT-026
 Folin-Ciocalteu assay; BEA-019
 food analysis; BEA-020
 Food fraud; ANA-035
 Força Iônica; AMB-007
 forced degradation; ANA-090, ANA-103
 Forensic ballistic; ANA-102
 forensic ballistics; ANA-046
 forensic chemistry; ELE-031
 Forensic; ANA-047
 Formação continuada de profess; EDU-058
 Formação continuada; EDU-060
 Formação de professores; EDU-025
 formação docente; EDU-010
 Formaldeído atmosférico; AMB-064
 Formaldeído; CAT-043, MAT-105, MAT-125
 Formic acid; AMB-018
 formol; BEA-007
 Fosfonato; ORG-058, ORG-090
 Fósforo; FIS-034
 Fotoderivatização; ANA-122
 Foto-Fenton; AMB-019
 Foto-Fries; ORG-052
 Fotografia; HIS002
 Fotoluminescência; MAT-131, MAT-135
 Fotometria; ANA-038
 Foto-oxidação; ANA-060
 fotoquímica; AMB-053, EDU-009, ORG-068
 FPS; MED-023
 fractionation; ANA-099
 Fragment screening; MED-056
 fraude; BEA-007
 Free Radicals; ORG-024
 freshwater sponges (cauxi); MAT-057
 Friedel-Crafts Intramolecular; ORG-134
 Fructose; QVE-003
 Frutas tropicais brasileiras; ANA-072
 frutos; QPN-099
 FRX; ANA-048
 Ftalidas; QPN-037
 FTIR; MAT-087, MAT-098
 FTmap; MED-008
 Fucomannogalactan; QPN-054
 Fucosterol derivatives; QPN-087
 Fuel fraud; ANA-115
 Fuels; MAT-029
 funcionalização covalente; MAT-054
 Funções inorgânicas; EDU-012
 funções orgânicas.; EDU-029
 Funções orgânicas; EDU-061
 Functional Food; BEA-006
 Functionalization; CAT-009, MAT-031,
 MAT-079, ORG-007
 Functionalized dienes; ORG-057
 fungi; QPN-050
 Fungicidas; ANA-122
 Fungo ensofítico; QPN-037
 Fungos endofíticos; QPN-104
 Fusel oil; ELE-035

G

Gabinetes de Curiosidades; EDU-051
 gadolínio; INO-100
 gadolinium(III); INO-029
 Gadolinium; INO-009
 Game; EDU-030
 Games; EDU-020
 gamma-Lactams; ORG-124
 Ganciclovir; ANA-103
 Garcinia mangostana; MED-014
 GARDEN; EDU-024
 gas chromatography; ANA-008
 gas diffusion; BEA-020
 Gas sensor; BEA-017
 gas sensors; AMB-062
 GC/MS; QPN-089
 GC×GC-TOFMS; ANA-001, ANA-002,
 ANA-003, ANA-071, ANA-072
 GC-FID; QPN-096
 GC-MS/MS; AMB-002, AMB-075
 GC-MS; BEA-002, BEA-009, BEA-010,
 QPN-015, QPN-022, QPN-096,
 TEC-007, TEC-011
 Gel permeation chromatography; ANA-066
 Gelatina; EDU-009, MAT-105, MAT-123,
 MAT-125
 gene delivery; FIS-011
 Gene therapy; MAT-006
 General Chemistry; EDU-030
 Gênero; EDU-002, EDU-018
 Genipa americana; QPN-003
 Genipap; QPN-003
 Genipin; QPN-003
 Genotoxicity; ELE-011
 Gentamycin; ANA-005
 geoenvironmental; AMB-038
 Geogas; AMB-055
 Geometridae; QPN-021
 germacranolide; QPN-078
 GF AAS; ANA-021, ANA-116
 Gingerol; QPN-074
 Glass; HIS001
 Glicerol; MAT-125
 glicose; ELE-037
 Global warming; ORG-035
 Glomerella cingulata; QPN-037
 Glycerol valorization; ORG-169
 glycerol; CAT-021, FIS-013, INO-015,
 MAT-036, MAT-114, QVE-007, TEO-014
 Glyceryl monoalkyl ether; ORG-169
 Glycine max; QPN-030
 Glycolysis reaction; MAT-015
 Glycosidase inhibitors; MED-032
 GNPS; ANA-052, QPN-031, QPN-044,
 QPN-062, QPN-067
 Gold Catalysts; CAT-033
 Gold metalodrugs; INO-051
 Gold Modified Electrode; ELE-044
 Gold Nanoparticle Ink; MAT-108
 Gold Nanoparticles; CAT-013, CAT-018,
 ELE-010, ELE-014, ELE-021, ELE-033,
 ELE-035, ELE-045, MAT-006, MAT-067,
 MAT-111, ORG-003
 gold nanostructures; FOT-004
 Gold; CAT-015, CAT-029, MAT-064,
 MAT-091, MAT-110, MAT-134
 Golden Spike do Antropoceno; AMB-065
 Goma de cajueiro; ELE-008
 Goma-arábica; MAT-043
 Gout; ORG-029
 Graduandos do PIBID; EDU-015
 Grafeno; ELE-030
 Grafting; MAT-080
 Gram negative; ORG-164

Gram positive; ORG-164
Granulometria; AMB-024
Graphe oxide; MAT-058
Graphene oxide; ELE-018, ELE-045,
MAT-009, MAT-065, MAT-075, MAT-079
Graphene; ELE-026, INO-034, MAT-038,
MAT-040
Graphite sheet; ANA-098
Graphitization; MAT-047
Grau de Oxidação; MAT-098
Grease; TEC-009
Green analytical chemistry; QVE-001
Green chemistry; ANA-025, ANA-035,
ANA-045, ANA-100, CAT-002,
CAT-011, CAT-018, CAT-028, CAT-035,
CAT-039, FIS-009, MAT-015, ORG-002,
ORG-071, ORG-103, ORG-128,
ORG-173, QPN-065, QPN-081,
QPN-095, QVE-004, QVE-008,
QVE-011, QVE-012, QVE-015,
QVE-020
Green chromatography; QVE-001
Green propolis; QPN-007, QPN-076
Green Synthesis; BIO-003, MAT-061,
QVE-011
Green-emitting LEDs; MAT-097
GSH; AMB-014
GSR; ANA-046
Guanidine; TEO-014
Guanilação; MED-011, ORG-016
Guitarra elétrica; MAT-041
Guntelberg Equation; MED-012

H

H. indicum; QPN-061
H2 generation; ELE-023, ELE-050
Habilidades de pensamento; EDU-048
Hairy beggarticks; QPN-077
halogenação de alcanos; CAT-023
Halogenation; MED-019
Halogens determination; ANA-079
Halogens; BEA-013
halolactone derivatives; MED-026
Hantzsch Ester; FOT-002
Hantzsch; ORG-021
Harmaline; QPN-043
Harmine; QPN-043
HbF inducer; MED-049
HCA; ANA-046, ANA-102
HDL; INO-078
Headspace; AMB-034
health hazard; AMB-038
Heat treatment; BEA-011
HEAVY METAL SORPTION; MAT-089
Heavy metals; AMB-085
Heck- Matsuda reaction; ORG-162
Heck reaction; ORG-154, ORG-180
Heck reactions; TEO-019
Heck-Matsuda reaction; ORG-123
Heck-Matsuda; ORG-126
HeLa; MED-048
Heliantheae; QPN-048
Helical carbon nanotubes; MAT-077
Helical Twisting Power; ORG-055
Hemin; ELE-047
Hemocompatibility; MAT-138
Heparin; MAT-139
Hepatitis C; TEC-004
HER2 antigen; ELE-021
herbicide activity; ORG-054
Herbicide resistance cost; AMB-010
herbicide; ANA-018, FIS-009
Herbicides; INO-083
Herpes; MED-024
heterocycles; ORG-071, ORG-089,
ORG-098
Heterocyclic; ORG-028
Heterodera glycines; QPN-063
Heterogeneous catalysis; CAT-011,
CAT-027, INO-082, INO-084, INO-095,
MAT-116, ORG-077
heterogeneous catalyst; ORG-099
Heterogeneous photocatalysis; AMB-029
Hexane extract; QPN-024
Hexanic extract; QPN-051
Hg; ANA-022
HG-GFAAS; ANA-087
hibrid; MAT-051
Hidretos; ANA-087
Hidrofobicidade; MAT-129
Hidrogéis superabsorventes; MAT-082
hidrogéis; AMB-072, MAT-081
Hidrogel; FIS-034, MAT-043
Hidrólise; AMB-017
Hydrothermal Synthesis; INO-063
hidróxido de níquel; ELE-037
Hidróxidos Duplos Lamelares; AMB-009
Hidroxiilação; INO-014
hidroxilamina; AMB-061
high intensity ultrasound; MAT-017
High molecular weight paraffin; ANA-004
High quality graphene oxide; MAT-083
High School; EDU-020, EDU-034, EDU-055
High Surface Area; MAT-030
High temperature; ANA-004
Higher heating value; AMB-060
Hiperpolarizabilidade; TEO-013, TEO-016
Hipóxia; INO-041
histamina; ANA-113
Histidina; FIS-002
Histograma de Cores; ANA-043, ANA-044
História da Química; EDU-001, EDU-047
História dos Museus; EDU-051
History of Science; HIS001
HIV-1; ORG-037
HMF; QVE-003
Homogeneous catalysis; CAT-013, INO-007,
INO-016
Homogenous catalysis; INO-023
Homoisoflavanones; ORG-051
Honey; BEA-017
hop pelletization; BEA-010
Hoplias Intermedius; AMB-080
Hordeum vulgare); ELE-001
Hortaliças; ANA-116
Hortia oreadica; QPN-068

Hortia; QPN-068
hotspots; MED-008
HPLC/UV-Vis; INO-027
HPLC; ANA-074, ANA-114, ELE-045,
MED-042, QPN-092, QPN-107,
QVE-008
HPLC-DAD; AMB-061, QPN-043
HPLC-DAD-ESI-MS/MS; QPN-101
HPLC-MS; ANA-076, QPN-043
HPLC-PDA; MED-022
HPLC-RI; QPN-040
HPLC-UV; QPN-079
HS-SPME; BEA-010
HS-SPME-GC-MS; ANA-006
HTC; MAT-073
Huanglongbing (HLB); QPN-086
Huanglongbing; QPN-097
Huisgen Reaction; ORG-014
Human Cathepsins; MED-004
human tumor cells; QPN-001
Humic acids; AMB-057
Humic-like Substances; AMB-056
Humiria; QPN-059
hybrid compounds; ORG-014
Hybrid material; COL-009, INO-047,
MAT-014
Hybrid Silicas; INO-015
Hybrids; MED-050
hydrazone; MED-027
Hydrazones; INO-024
hydrocarbon classes; ANA-008
Hydrochar; AMB-059
hydrochloric acid; MAT-102
hydrochlorothiazide; ANA-090
Hydrochlorothiazide; ELE-054
hydrodistillation; QPN-005
hydrogel; AMB-084, INO-044
Hydrogels; MAT-114
hydrogen abstraction; TEO-007
Hydrogen Bond; FOT-003
Hydrogen evolution reaction; MAT-094
Hydrogen peroxide; ANA-019, INO-011,
MAT-074, MAT-126
Hydrogenation; CAT-013, CAT-032,
CAT-036, CAT-040, ORG-063
Hydrogen-bonding; INO-004
Hydrogenolysis; CAT-017
Hydrolase; INO-040
Hydrolases; ORG-013
Hydrolysis; INO-058, INO-075
Hydrolytic liability; MED-007
hydrolyzed collagen film; INO-062
hydrophilic interaction; ANA-012
Hydrophobicity; COL-002
hydrosilylation; INO-001
Hydrothermal Carbonization; AMB-056,
AMB-059
hydrothermal method; MAT-070
hydrothermal; AMB-006
hypertension; INO-091
hypervalent iodine; ORG-026
hyphenated technique; ANA-111
Hypsizygus marmoreus; QPN-054

hyptis suaveolens; ORG-171
HYTPHENYL; ELE-002

IAA; QPN-056
ibuprofeno; INO-086
IC; AMB-079
IC-MS; ANA-007, BEA-013
ICP OES; ANA-082
ICP-MS; AMB-022, AMB-079, ANA-017,
ANA-024, ANA-111, INO-096
ICP-OES; ANA-024
Idade Meghalayan; AMB-065
Identificação; ANA-044, QPN-088
IFES; EDU-017
illicit drug; BIO-006
Illicium; ORG-172
ImageJ; BEA-019
Imagem digital; ANA-039
Imagens Digitais; ANA-036, ANA-037
Imagens; EDU-059
Imaging Mass Spectrometry; QPN-097
Imidas Cíclicas; ORG-102
Imidazole; MAT-009, ORG-069
Imidazolidine synthesis; ORG-043
imines; ORG-060
Iminosugars; ORG-124
immobilization; INO-095
immobilized enzymes; MED-004
Immunosensor; ELE-014, ELE-051
Imobilização de enzimas; MAT-008
Imobilização; INO-078
Impacto ambiental; ANA-060, ANA-069
impedância eletroquímica; ELE-017
impedimetric sensor; ELE-006
Impregnation; CAT-027
Impressão 3D; EDU-009
IMPS/VS; MAT-059
In situ photoluminescence; INO-088
In(III) salen complexes; INO-057
In(III); INO-099
Inclusão Digital; EDU-004
Inclusão escolar; EDU-025, EDU-052
Inclusão; EDU-017
Inclusion; COL-007
Indicadores de Poluição; AMB-068
Índice de Qualidade da Água; AMB-077
indigotina; FIS-031
Índio; CAT-010
Indium(III) halide; INO-023
Indol; ORG-008, ORG-126, ORG-144
Indole; ORG-161
Indoles; MED-060
indolizina; ORG-079
Indolizinas; ORG-059, ORG-060
Indústria de alimentos; FIS-027
Infográfico; EDU-049
Information science; TEC-001
Infrared; QVE-002, TEO-006
Infravermelho; INO-031
Infusion; BEA-001
INHMQ; ELE-052

inhibition of glucosidases; QPN-089
Inhibitor; QVE-017
Inhibitors; MED-004, MED-042
Inibidor; MED-051
inibidores da fotossíntese; ORG-171
inibidores sulfonamidas; TEO-008
Initial teacher training; EDU-022
Injeção Múltipla; ANA-016
Inkjet Printing; MAT-108
Innovation; HIS001
Innovative education; EDU-067
inorganic antimony; AMB-048
Inorganic materials; INO-044
inorganic nanomaterials; MAT-048
Inorganic scaling; FIS-006
Inorganic synthesis; ANA-101
inovação pedagógica; EDU-062
insecticidal activity; QPN-090
Insertion Reaction; ORG-111
In-service Teacher Training; EDU-054
Instant soup; ANA-088
Instituição de Ensino Superior; EDU-016
Instrumentação analítica; ANA-095
Integrated Weed Management; AMB-010,
QPN-077
Interações hidrofílicas; ANA-015
interaction; BIO-006, COL-003
intercalant agents; INO-052
Intercalation; MAT-136, MED-015
interdisciplinar; EDU-062
Interdisciplinaridade; EDU-057
interface ar-água; AMB-053
Interfacial method; MAT-040
Interferentes endócrinos; ANA-015
interferentes; ELE-005
Intermediate precision; ANA-010
Internal standard; AMB-011
Intoxicação alimentar; ANA-009
Intramolecular Cyclization; ORG-098
iodeto; ANA-016
iodination; ORG-114
Iodine; ANA-007, FIS-001
Ion Chromatography; ANA-024
ion exchange resins; INO-075
ion Exchange; MAT-005, MAT-101
ionic complexes; ORG-180
ionic liquid; MAT-036, ORG-028, QPN-080
ionic liquids; ELE-019, ELE-034, ELE-042,
ORG-011, ORG-025
ionic; INO-004
Ionogel; BEA-017
íons metálicos; MAT-082
iridium-catalysed approach; ORG-045
Iridoids; ORG-137
Iron complex; CAT-037
Iron mining waste; AMB-071
iron ore tailings; MAT-032
Iron oxide; MAT-022, MAT-084
Iron speciation; AMB-039
Iron; AMB-039
IRRAS; ELE-023
Isatina; ORG-033

Isoamyl alcohol; AMB-037, ELE-035
isocoumarin; ORG-050
Isocyanide; ORG-129
Isoladores; MAT-129
Isoniazid; AMB-035
isorientin; QPN-038
Isoterma de adsorção; ANA-106, FIS-029
isotermas; AMB-072, INO-008
Isotherm; MAT-049
Isotherms; MAT-005
isoxazol-5(4H)-one; ORG-011
Isoxazol-5-ones; ORG-136
Isoxazole; ORG-053, ORG-064
isoxazoles; ORG-004, ORG-046
Isoxazoline; ORG-053
Isoxazolines; ORG-004
Itacoatiara-AM; AMB-068
Itaconic Anhydride; ORG-117
Ivermectin; MAT-095
IYPT2019; EDU-009

J

Jacobsen's catalyst; QPN-038
Jogo; EDU-026
Jogos didáticos; EDU-012
jogos; EDU-068
Jornal universitário; EDU-038
Jornal; EDU-040
juglona; ORG-081
Junglerice; QPN-077

K

Kahweol; ORG-063
Kaolin mining residues; AMB-030
kaolinite; INO-086
Kernel-Based PLS; MED-055
Ketene; ORG-134
Ketenedithioacetals; ORG-043
KI/Al₂O₃; QVE-007
Kinect; FIS-012
Kinetic Model; COL-005
Kinetic parameters; FIS-008
kinetic pH profile; FIS-014
kinetic profile; ORG-056
Kinetic Studies; BIO-002
kinetic study; CAT-032
Kinetic; CAT-013, MAT-011
kinetics; INO-087, MAT-005, MAT-080,
ORG-087, QVE-006
Kinetin; ORG-093
Knoevenagel reaction; ORG-056
Knowledge management; TEC-001
Korsmeyer – Peppas model; MAT-080
K-Othrine; MAT-095

L

label; ELE-012
Laboratory Instruction; EDU-032
Lactic acid; ELE-033
Lactoferrin bovine; FIS-007
Lactoferrin; FIS-012

Lactones; ORG-137
 Lactonization; QVE-009
 Lactose; BEA-008, FIS-011
 Lagenaria spp.; FIS-031
 Lágrima de Nossa Senhora; MAT-120
 Lamellar Structure; INO-006
 Langmuir film; INO-019
 Langmuir films; INO-088
 Langmuir monolayers; FIS-019
 Langmuir; INO-008
 Langmuir-Blodgett; INO-010, INO-072
 Lantanídeo; INO-093
 Lanthanide; INO-009, MAT-016
 Lanthanides; INO-024, INO-035, INO-102, MAT-107
 Lanthanum Complex; INO-058
 Lapachol; ORG-066
 Lasiodiplodia pseudotheobromae; QPN-025
 Lawsone; MED-057, ORG-020, ORG-105
 Layer-by-Layer; MAT-139
 Layered double hydroxide; INO-048
 Layered Double Hydroxides; CAT-016
 Layered Niobium Perovskite; MAT-128
 Layered solids; INO-084
 LCA; AMB-044
 L-Cisteína; AMB-023
 LC-MS/MS; AMB-075, QPN-032, QPN-044, QPN-048
 LC-MS; AMB-011, QPN-011, QPN-055, QPN-084
 LC-MS-MS; QPN-027
 LDH; INO-042, INO-064, MAT-089
 L-dopa; QPN-095
 Lead; AMB-073, ANA-092
 Lead-free; MAT-101
 Learning facilitator; EDU-066
 Lectinas; BIO-005
 Leguminous; BEA-011
 Leishmania (L) amazonensis; QPN-029
 Leishmania; MED-042
 Leishmaniasis; MAT-117, MED-016, MED-031, MED-056
 Leishmanicidal activity; QPN-040
 Leishmaniose; ORG-100, ORG-101
 leite; BEA-007
 Lemongrass; QPN-052
 Lesinurad; ORG-029
 leukemia assays; QPN-045
 leukemia; ORG-126
 Levofloxacin; ELE-027
 Lewis acid sites; CAT-019
 licenciatura em química; EDU-010, EDU-039
 Licenciatura; EDU-015
 Licuri coconut shell; AMB-034
 Licuri; AMB-035
 Lidocaine; FIS-016
 Life Cycle Assessment; AMB-044
 Ligação de Hidrogênio; INO-098
 ligand efficiency; MED-008
 Ligand Fishing; MED-004
 Ligand fishing; QPN-075
 Ligante axial; INO-014
 Ligante bpca; INO-068
 Ligante pirazinocarboxílico; INO-068
 Ligantes N,O-doadores; INO-025
 light intensity; QPN-100
 Light stability; MAT-019
 light storage materials; MAT-066
 Light-emitting diodes; MAT-097
 lignin yield; AMB-058
 Lignocellulose-Based reactor; ORG-077
 lignocellulosic material; AMB-051
 Limoneno; CAT-003
 Limonoids Glucosides; QPN-085
 Linseed oil; COL-004
 Lipase esterification; QVE-009
 Lipase; BIO-011, MED-037, ORG-006, ORG-132
 Lipopeptide; MED-059
 liposome; FOT-010
 Liquid Chromatography; BIO-002
 Liquid chromatography; ANA-073
 Liquid Crystal; MAT-053, MAT-085, MAT-106, ORG-070
 liquid crystals; ORG-004, ORG-055, ORG-064
 Liquid ionic; ORG-020
 Liquid/liquid interface; MAT-084
 Liquid-liquid interface; MAT-065
 Líquido iônico; ANA-016, ORG-130
 Líquidos Iônicos; ORG-109, ORG-115
 Lisinopril; MAT-071
 Lisonopril; MAT-093
 Li-Sulfur batteries; ELE-016
 Literature Review; QVE-020
 Lithium amides; ORG-133
 Lixo; ANA-108
 LLE-LTP; ANA-025
 Lobophora variegata; QPN-087
 local factory; QVE-019
 Locomotor activity; ORG-019
 Lomatozona artemisiifolia; QPN-008
 Long alkyl chains; INO-090
 Lophine-benzylamine; MED-045
 Loranthaceae; QPN-019
 Losartan; MAT-080
 Low Dimensionality; INO-006
 Low pressure closed system; ANA-088
 low temperature; MAT-070
 Low-cost sensitizer; MAT-019
 low-cost sensors; AMB-062
 Lower heating value; AMB-060
 LSPR; MAT-064
 Lubricant; TEC-009
 Ludicidade; EDU-012, EDU-046
 Lúdico; EDU-008, EDU-026, EDU-056, EDU-061
 luminescence spectroscopy; INO-029
 Luminescence; INO-009, INO-035, INO-064, INO-067, MAT-061
 Luminescência; MAT-025
 Luminescent complexes; INO-070
 Luminescent lamps; INO-089
 Luminescent materials; INO-051
 Luminescent Probes; INO-024
 Luminescente; FOT-005
 luminol; ELE-012
 Lycopersicon esculentum; AMB-073

M

Macrofungos; QPN-015, QPN-066
 macrolídeos; MED-021
 macronutrientes; BEA-004
 MAE; QPN-080
 maghemite; AMB-006
 Magnaporthe oryzae; QPN-013
 Magnesium-halogen exchange; ORG-080
 Magnetic composite; INO-082
 Magnetic Hyperthermia; MAT-118
 Magnetic ionic liquid; ANA-011
 magnetic nanoparticles; MAT-109, ORG-061, ORG-083
 Magnetic Particles; BIO-002
 Magnetic properties; INO-085, MAT-016
 Magnetic Vermiculite; ANA-123
 Magnetic zeolites; MAT-003
 Magnetism; INO-036, INO-067
 Magnetismo Molecular; INO-005, INO-077, INO-093
 magnetite nanoparticles; AMB-054
 Magnetite; MAT-141
 Magnetos de uma única molécula; INO-079
 Malaria; MAT-143, MED-033, MED-050, MED-060, ORG-066
 malathion; ELE-036
 Maleinization reaction; QVE-004
 MALLE; ANA-112
 Malus domestica; BEA-012
 Mandioca; HIS002
 Manganese Dioxide; ELE-043
 manganese ferrite; MAT-126
 Manganese oxide; INO-101, MAT-027, MAT-038
 Manganese removal; AMB-085
 Manganese(II); MAT-116
 manganese; ANA-099, INO-040
 Manipueira; FIS-033
 manjeriço; ANA-077
 Mannich Adduct; ORG-105
 Mannich reaction; ORG-027
 Mannich; ORG-157
 Marine Actinomycetes; QPN-031
 Marine-derived fungi; QPN-025, QPN-026
 Mass Identification; QPN-070, QPN-098
 Mass Spectrometry; AMB-027, ANA-010, BIO-010, ORG-032, QPN-042, QPN-063, QPN-084
 Mass spectroscopy; QPN-056
 Mass Transport; ELE-050
 Mastruz; MED-023
 Matéria orgânica; ANA-053
 Materiais alternativos; EDU-041
 Materiais biodegradáveis; QVE-013
 Mathematical Approach; ANA-085
 Mato Grosso do Sul; QVE-019
 Matrix effect; ELE-040
 MBR; AMB-013

MCM 41; MAT-062
MCM-22; MAT-001
Mecanismo de reação; AMB-023
Mecanismo; ORG-116
Mechanical properties; INO-044
Mechanism; ELE-023
Mechanochemical synthesis; ANA-104
Mechanochemistry; CAT-028, ORG-103
Medicinal Chemistry; ORG-049
Medicinal plants; QPN-081
Mefloquine; MED-050
Meio Ambiente; EDU-045, FIS-033
Meio aquoso; AMB-026
Meio básico; ELE-013
Melamina; AMB-043
Melamine; MAT-046, MAT-119
Melastomataceae; QPN-099
melatonin; ELE-010
Melia azedarach; QPN-075
Membranas; ORG-076
Membrane Model; INO-019
Membrane Potential; QPN-029
Menadione; ORG-175
mercurio; ELE-025
Mercury; AMB-081, ANA-023, ANA-033
Merrifield resin; ORG-099
Mesoporous silica; INO-084
Metabolic fingerprint; QPN-091
Metabolic fingerprinting; QVE-012
Metabolica profiling; QPN-022
Metabolites; ANA-052
metabólitos secundários; BIO-008, QPN-019
Metabolomic Analysis; QPN-103
Metabolomics; ANA-105, BIO-010, QPN-030, QPN-031, QPN-032, QPN-041, QPN-044
metacrilato; FIS-021
metais de transição; MAT-045
Metais pesados; ANA-118, INO-020
Metais Tóxicos; FIS-033
Metais; AMB-026, ANA-020, ANA-081, ANA-083
Metal complex; ORG-015
Metal complexes; INO-007, INO-052, INO-059, INO-091
metal organic frameworks; MAT-100
Metal Oxide; MAT-141
Metal Removal; MAT-005
Metalation; ORG-007, ORG-079, ORG-133
Metal-carbene reactions; ORG-104
Metal-Carbene; ORG-097
Metal-free; ORG-074
Metalic complex; INO-036
metallic contaminants; BEA-021
metallic ions; ANA-028
Metallic nanoparticles; MAT-064
Metallic Species; AMB-080
Metallo-antitumorals; INO-094
Metallo-drugs; INO-059
Metallo-intercalator; INO-045
Metalloporphyrin; INO-082
Metalloporphyrins; INO-016
metalloproteases; MED-031
Metalofármaco; INO-041
metalloporfirinas; INO-027
metal-organic framework; INO-095
Metal-organic Frameworks; QVE-015
Metal-oxo complexes; INO-018
Metals; AMB-014, AMB-063, AMB-079, ANA-021, EDU-065
metformin; ORG-061
Methanation; CAT-038
Methanol; ANA-115, CAT-036
Methylene Blue; ELE-022
method development; BEA-020
Method Validation; AMB-002
Method; AMB-011
methoxyl flavones; QPN-008
Methyl 3,3-bis-methylsulfanyl-; ORG-177
Methyl Esters; ANA-066
Methylene Blue; AMB-028, AMB-069, CAT-012, FIS-028, MAT-033, MAT-099
Methylparaben; ANA-031
Methyltransferases; BIO-007
método espectrofotométrico; ANA-091
Método hidrotérmico; MAT-008
Método limpo; ANA-095
metodologia de aprendizagem; EDU-062
Metodologias ativas; EDU-021, EDU-043
Mg-buserite; AMB-015
MIC; BEA-013, MAT-068
Micelles; CAT-031
Michael Addition; ORG-111, ORG-128
Miconia; QPN-099
Micro coluna de leito fixo; ANA-106
micro pollutant; AMB-078
Microalga; QPN-100
Microalgae; AMB-036, QPN-094
Microalgal consortia; ANA-076
Microbial Inactivation; INO-043
Microcontroller; ANA-096
Microcrystalline Cellulose; MAT-080
Microemulsion; ANA-014
microencapsulation; ORG-141
Microextração em fase sólida; ANA-020
Microextração; ANA-009
micro-extração; ANA-077
microextraction; BEA-020, BEA-021
Microfluídica; ANA-093
micronutrientes; BEA-004
Microondas; CAT-014
Microorganisms; ORG-164
Micropores; MAT-003
micropropagation; QPN-079
Microorganisms; QPN-059
Microscale THERMOPHORESIS; MED-010
Microscopia eletrônica; MAT-060
Microtubule; MED-054
microwave- hydrothermal method; MAT-007
Microwave irradiation; QVE-004
Microwave; CAT-035, INO-101, MAT-061
Microwave-assisted pressurized; ANA-022
Microwave-Assisted Solid Sampl; ANA-026
Microwave-Induced Combustion; ANA-024, ANA-026
Microwaves; AMB-067
Mid-Fourier transform infrared; ORG-139
Mídia Digital; EDU-040
Mikania glomerata; ANA-059
MIL-101(Cr); AMB-044, INO-095, QVE-015
MIL-53(Al); AMB-044, MAT-100
Mild steel; ELE-038
Milk; ANA-025
Mimetic models; INO-039
mimetização; MAT-054
Minerais; ANA-049, BEA-004
Mineral in foods and beverages; BEA-003
Minerals; BEA-011
minicurso; EDU-053
Minimum-distance; TEO-010
mining residues; AMB-006, MAT-078
Mining; AMB-055, CAT-022
MIP OES; ANA-021, ANA-088
MIP; ANA-094
Mirim; QPN-059
Misconceptions; EDU-006, EDU-054
mistura de óxidos metálicos; ELE-005
Mitsunobu Coupling; ORG-055
mixed matrix membranes; MAT-100
Mixed metal compounds; INO-013
Mixed Metal Nanoparticles; MAT-067
Mixed transition metal oxide; MAT-050
Mixture design; QPN-056
Mn (3MeOSalen)Cl₂; QPN-038
Mn mining residues; AMB-003, AMB-015
Modelagem Molecular; ELE-020
Modelo Biomimético; INO-003
Modified Carbon Paste Electrode; ELE-057
Modified Electrode; ELE-049, MAT-014
modified platform; ELE-010
Modulating action; MAT-071
MOF; AMB-044
MOFs; MAT-099
Molecular Docking; MED-001, MED-015, MED-026, MED-029, MED-031, MED-036, MED-054, MED-057
molecular dynamics; TEO-012
Molecular dynamic; MED-015
Molecular dynamics; MED-009, MED-026, MED-054, TEC-009
Molecular hybrid; ORG-066
molecular hybridization; MED-020
Molecular Logic; FOT-001
Molecular modeling; FIS-010, MED-045, MED-055, ORG-035, TEO-006
Molecular network; BIO-010, QPN-032, QPN-044, QPN-062
Molecular Networking; QPN-031, QPN-048, QPN-078
Molecular sieve; AMB-003
Molecular Tailored Design; ELE-003
Molecularly Imprinted Polymer; ELE-024, ELE-033, ELE-035
Molecularly imprinted polymer; ELE-054
molibdatos de cálcio; MAT-045
molybdenum disulfide; INO-002

Molybdenum sulfide; MAT-094
 molybdenum trioxide; INO-002
 Monoacylglycerol; QVE-014
 monocrotaline; QPN-063
 monolithic phase; ANA-068
 monômero; FIS-025
 Monomode microwave; ANA-026
 Montmorillonita; FIS-002
 Morfolina; ORG-048
 Morindaparvina A; ORG-149
 Moringa Oleifera; ELE-004
 Morita-Baylis-Hillman reaction; ORG-106
 Morita-Baylis-Hillman; ORG-059, ORG-085,
 ORG-088
 Morphology; MAT-137
 Morus nigra; BEA-018
 Motivação da Aprendizagem; EDU-047
 Motivação; EDU-049
 MOUDI; AMB-079
 MPAES; ANA-086
 MT; AMB-014
 Mucuna; QPN-095
 Mulheres na Ciência; EDU-001
 Mulheres; EDU-002, EDU-036
 Multi-class classifier; ANA-047
 Multicolor Emission; MAT-107
 Multicomponent reaction; ORG-020
 Multicomponent Reaction; ORG-025,
 ORG-047, ORG-162
 Multi-component reaction; ORG-129
 Multicomponent Reactions; ORG-086,
 ORG-089
 multi-component synthesis; ORG-138
 Multicomutação em análise quím; ANA-095
 Multicomutação em fluxo; ANA-095
 Multidimensional; MED-051
 multifunctional drugs; ORG-014
 multihierarchical electrode; MAT-020
 Multiple Resistance; AMB-010
 Multireference coupled-cluster; TEO-007
 Multivariate analysis; ORG-139, QPN-032,
 QPN-070
 multivariate optimization; CAT-006
 Multivariate optimization; ELE-054
 multi-walled carbon nanotube; ELE-052
 Multi-walled carbon nanotubes modified
 electrode; ELE-054
 multiwalled carbon nanotubes; MAT-124
 Mushroom; QPN-054
 MWW; MAT-001
 Mycobacterium tuberculosis; INO-037
 Mycosphaerella fijiensis; TEO-011
 Mycotoxins; QPN-039
 Mycrocytins; AMB-011
 Myrciaria tenella; QPN-005
 Myrtaceae; QPN-005

N

N, N-dimethyltryptamine; QPN-043
 N,N-ligands; ORG-154
 N,S-acetals; ORG-081
 N,S-acetals; ORG-177

Na,K-ATPase; ORG-042
 nAChRs $\alpha 4\beta 2$; MED-029
 nAChRs $\alpha 7$; MED-029
 Naftoimidazóis; ORG-052
 Naftoquinona; ORG-033
 naftoquinonas; ORG-081
 nanocables; MAT-037
 Nanocapsules; QPN-052
 Nanocatalysis; CAT-032, COL-007
 Nanocatalyst; MAT-009
 Nanocomposite hydrogels; MAT-011,
 MAT-049
 Nanocomposite; MAT-027, MAT-083
 nanocomposites; MAT-002, MAT-010,
 MAT-038, MAT-047, MAT-065,
 MAT-075, MAT-124
 Nanocompósito; MAT-025
 Nanocompósitos; MAT-082
 nanofiber; FIS-020
 nanofibers; MAT-124, MAT-143
 nanohydrid; MAT-048
 Nanohydrogels; MAT-121
 Nano-interface; TEO-015
 Nanomaterial; BIO-003, MAT-013, MAT-023
 Nanomaterials; INO-044, MAT-007,
 MAT-096
 nanoparticle; ELE-012, QPN-090
 Nanoparticles; CAT-015, CAT-024, CAT-029,
 MAT-016, MAT-033, MAT-034,
 MAT-052, MAT-091, MAT-134,
 MAT-141, QVE-011
 Nanopartículas de ouro; MAT-025, MAT-086
 nanopartículas de prata; MAT-023, QVE-005
 Nanoreactors; CAT-031
 Nanostructure effect; ELE-040
 Nanostructure; MED-059
 Nanostructured Materials; INO-006
 nanostructured iron; MAT-004
 Nanotechnology; MAT-006, QVE-011
 Nanothermometry; MAT-103
 Nanotoxicity; MAT-018
 Nanotubes; CAT-008, MAT-021
 nanotubos de carbono; ELE-046, MAT-060,
 MAT-088
 Nanotubos de nióbio; MAT-008
 Nanotubos de titanato; ORG-157
 Nanowires; INO-006
 naphthoquinone; ORG-005, ORG-175
 Naproxen; MAT-042
 Natural compounds; ELE-002
 Natural deep eutectic solvents; QVE-003
 natural pigments production; QPN-100
 Natural Products Synthesis; ORG-147
 natural products; MED-014, MED-020,
 MED-030
 NaX; CAT-023
 NaY; CAT-023
 NBO; ORG-146, TEO-017
 N-doped carbon; CAT-040
 Near-infrared Spectroscopy; ANA-051
 Nectandra barbellata; QPN-080
 Nectandra leucantha; QPN-006
 neglected diseases; MED-016, ORG-175

Neglected Tropical Diseases; MED-002
 Neodymium; ANA-085
 Neolignans; FIS-010, QPN-006
 Neonothopanus gardneri; QPN-064
 New Materials; MAT-030
 New Nucleophilic partner; ORG-106
 NEXAFS; MAT-019
 N-grafeno; FIS-022
 N-heteroarenes; ORG-074
 N-Heterocycle; ORG-124
 N-heterocyclic compounds; ORG-133
 Nickel Hydroxide; CAT-009
 nickel(II); INO-029
 Nickel; CAT-038, CAT-040
 Nifedipine; MAT-014
 Niobium Oxide; MAT-132
 Niobium pentachloride; ORG-086,
 ORG-089, ORG-155
 Niobium(V) oxide; CAT-026
 Niobium(V); MAT-116
 Niobium; CAT-019, MAT-013, MAT-055
 Niquel; AMB-025, MAT-041
 NIR fluorophores; ELE-003
 NIR light absorbance; MAT-117
 nitrate; ELE-032
 nitrato; AMB-061
 Nitreto de carbono grafitico; MAT-130
 nitric acid; FIS-023
 Nitric oxide; INO-028
 nitrile hydratase; ORG-002
 nitriles; ORG-002, ORG-036
 Nitro radical aniônico; ELE-015
 Nitro reduction; ORG-125
 Nitroalcohol; QVE-018
 Nitroaldol; ORG-013, QVE-018
 Nitro-anion radical; ELE-042
 Nitroarenes reduction; CAT-028
 nitroaromatic compounds; ELE-028
 Nitrochromene; ORG-047
 Nitrocompound; QVE-018
 Nitrofurral; ELE-015
 Nitrofurazone; ELE-042, ELE-047
 Nitrogen and phosphorus remove; AMB-036
 nitrogen fertilizer; FIS-023
 Nitrogen ligand; INO-085
 Nitrogen; TEC-003
 Nitrogênio reativo; AMB-052
 Nitroheterocíclico; ELE-015
 nitroimidazole; MED-028, MED-052
 Nitroketones; QVE-018
 Nitrophenol; CAT-013
 Nitro-radical; ELE-047
 nitrosyl complexes; INO-091
 Nitrosyl ruthenium complexes; INO-087
 nitrosyl; INO-097
 nitrotriazole; MED-040
 nitrous acid; FIS-001
 Nitroxides; ORG-024
 NLO; INO-066
 N-methylisatin; FOT-009
 NMR analysis; ORG-031
 NMR Chemical Shifts; TEO-006

NMR; ORG-056
NO; INO-087
Noble Metal; MAT-141
NO-donor; MED-049
non-covalent interactions; TEO-019
Non-covalent; MAT-079
non-ionic surfactants; FIS-005
non-linear phenomena; FIS-001
non-mercury electrode; ELE-009
Non-symmetrical imines; ORG-053
Non-Symmetrical; ORG-105
non-thermal plasma; FIS-023
norbornene; INO-056
nortropane alkaloids; QPN-089
Nor- β -lapachone; MED-046
notrous acid; FIS-023
Novos Materiais; MAT-113
Novos Monômeros; MAT-113
n-Paraffin quantification; ANA-004
NPK; FIS-034
NSAID; ANA-107
NSAIDs; ORG-049
Nsutite; INO-101
Nucleation; FIS-006
Nucleic acids; INO-052, INO-065, ORG-178
nucleophilic fluorination; TEO-002
nucleophilic organocatalysis; FIS-015
Nucleoside hydrolase; MED-042
Nucleosides; ORG-112
Nutrientes; BEA-018
Nutrients; BEA-001

O

Ocotea puberula; QPN-010
Octocrylene; INO-009
off-line dual-enzymatic assay; QPN-058
oficina temática; EDU-029
Oficinas Pedagógicas; EDU-064
Oficinas; EDU-014
Oil Produced Water; ANA-123
OLED devices; MAT-115
OLEDs Highly Fluorescent; ORG-084
olefin metathesis; CAT-030
Olefins; ORG-030
oleic acid; CAT-021, MAT-029
Óleo bruto; ANA-060, ANA-069
óleo combustível; ANA-082
óleo essencial; MED-023, QPN-014
óleo lubrificante; ANA-081
Óleos Vegetais; ANA-044, TEC-011
Omega-3 supplements; ANA-051
one-pot isonitrile; ORG-129
one-pot procedure; ORG-059
one-pot synthesis; MAT-037, ORG-155
One-pot; ORG-127
on-site analysis; ELE-031
Open flask; ORG-154
o-Phenylenediamine; ELE-033
O-phthalaldehyde (OPA); ANA-005
Óptica não linear; TEO-016
Óptica Não-Linear; ORG-145
Optical Devices; MAT-067

Optical nanosensor; ANA-097
Optical Probes; INO-035
optical sensors; AMB-062
Optical Waveguide; ELE-022
Optimization; AMB-085, CAT-004
oral administration; ANA-103
Oral anti-hyperglycemic drugs; MED-032
Orange; ELE-057
Orbitrap MS; ANA-071, ANA-072
Orbitrap-MS.; ANA-001
Orchidaceae; QPN-032
Organic carbon; ANA-117
Organic Chemistry Laboratory; EDU-032
Organic compounds; ANA-011
Organic Materials; ORG-078
Organic matter; ANA-045, EDU-069
Organic solar cells; MAT-019
Organic substrates oxidation; CAT-037
organic synthesis; ORG-001, ORG-034,
ORG-070, ORG-075, ORG-159,
ORG-160, TEC-004
organoboron; ORG-041
Organocatálise; ORG-121
organocatalyst.; ORG-011
Organocatalysts; INO-023
organofosforados; MAT-054
Organometallic complexes; MAT-077
organometallics; INO-001
organophosphate; FIS-009, FIS-014,
FIS-017, ORG-069
Organophosphates degradation; MAT-009
Organophosphorus; ORG-087, ORG-138
Organoselenides; ORG-065
Organosilanes; MAT-058
Organosulfur; ORG-153
Organozinc compounds; ORG-007
orientin; QPN-038
Origem da Vida; FIS-002
Orthometalated; INO-026
Orto-fenantrolina; ANA-039
oryzalin; ELE-009
oscillating reactions; FIS-001
Oscillations; ELE-023
Oscillatory Behavior; ELE-050
Ossencial Oil; BEA-002
Ossos; ANA-087
osteosarcoma tumor; ORG-032
Otimização de método; ANA-116
Otimização Experimental; ANA-086
oxamate; INO-032, INO-036
Oxamato; INO-046
Oxazinanones; ORG-098
Oxidação de etanol; ELE-013
Oxidação; EDU-033, FIS-026, INO-027,
INO-078, ORG-116
oxidation; CAT-034, INO-011, INO-018,
MAT-116, ORG-166
oxidative stability; ORG-001, TEC-002
Oxidative stress; ORG-082
Oxide cluster; TEO-015
Óxido de ferro sulfatado; CAT-007
Óxido de grafeno; ANA-020, MAT-054
Óxido de grafite; AMB-047

oxidocompostos; INO-069
óxidos; FIS-003
Oxidovanádio(IV); INO-060
Oxygen reduction reaction; ELE-026
Oxisol; AMB-028
Oxohomoaporphine alkaloids; QPN-017
Oxone; ANA-061, ORG-166
Oxone®; ANA-030
Ozone Precursors; AMB-040

P

P. falciparum; MED-050
P. aeruginosa; MED-017
Pachira aquatica AUJL; QPN-034
Paepalanthus planifolius; QPN-018
PAHs in soils; AMB-041
Palha de café; ANA-003
palladium catalysis; TEO-002
Palladium; CAT-015, CAT-039, ORG-012,
TEO-019
PANC; BEA-004
Pantanal; AMB-008
Panthenol; MAT-140
Papel; ANA-093
paper spray; ANA-064
Paper-based SERS Substrate; MAT-108
Pappilliferous thyroid; QPN-049
parabenos; ELE-005
Paracetamol; ELE-027
Paraffin deposition; ANA-004
Parâmetros termodinâmicos; ANA-106,
FIS-029
Paraoxon; AMB-023
Parkinson's disease; QPN-095
Paromomicin; ANA-005
Partial Least Squares; ANA-054
particle size; MAT-052
Particulate Matter; AMB-063
Partition behavior; FIS-016
Paspalum maritimum; QPN-039
Patent; TEC-004
Pattern recognition; ANA-047
Pb²⁺ ions; MAT-011
PBAT; MAT-120
PCA; ANA-046, ANA-048, ANA-049,
ANA-052, ANA-102, QPN-070,
QPN-092
PCL; MAT-139
PCR; ANA-096
PCZ; MAT-030
PDAH; INO-041
PDBind; MED-008
PDT; INO-043
Pectina; QVE-005
PEDOT; ELE-006, MAT-134
PEDOT-co-PDLLA; ELE-039
Peels; AMB-016
película prateada do café; ANA-080
Penicillium citrinum; QPN-026
Penicillium purpurogenum; BIO-008
Pentacyclic triterpene; QPN-040
Pentose Liquor; TEC-005

Pentose phosphate; ORG-110
 Peptide Chemistry; CAT-024
 Peptide copolymers; MAT-039
 Peptide synthesis; QVE-009
 perfil composicional; ANA-055
 Perfluorooctanesulfonic acid; AMB-029
 Perfluoropolyether; TEC-009
 Periodate oxidation; MAT-138
 PERIODIC TABLE; EDU-007
 permanganate; EDU-065
 Permanganometric Method; ANA-117
 Perovskite; MAT-101
 Peroxidases; CAT-005, ELE-011
 Peroxides; TEO-017
 Peróxido de hidrogênio e ureia; ORG-144
 Peróxido de hidrogênio; FIS-026
 Persian lime; QPN-085
 persistent luminescence; MAT-066,
 MAT-142
 persistent luminescent; MAT-144
 Personal care products; ANA-031
 Perylene Salt; INO-047
 pescado; ANA-113
 Pesticida carbamato; ANA-062
 Pesticida; AMB-005, ELE-046
 Pesticidas; AMB-023
 pesticide; FIS-017, ORG-087
 pesticides drift; AMB-075
 Pesticides; AMB-002, AMB-027, CAT-002
 Pet Food; BEA-013
 petróleo pesado; ANA-055
 Petróleo; ANA-050, ANA-056, ANA-119
 Petroleum; ANA-010
 pH influence; ELE-056
 pH; AMB-012, ANA-053
 pharmaceutical formulation; MAT-017
 pharmaceutical formulation; ANA-092
 Pharmaceutical Industry; TEC-004
 Pharmaceutical; AMB-032
 Pharmaceuticals; ANA-067, FOT-002
 PHB; TEC-003
 Phenalenone-Type Compounds; TEO-011
 Phenethylamines; BIO-001
 Phenethylisoquinoline alkaloid; QPN-017
 Phenol; ELE-024
 phenolic compounds; ORG-141, QPN-007,
 QPN-020, QPN-055
 Phenolic resin; MAT-047
 phenols; ANA-070, ANA-112, CAT-017,
 ORG-179, TEC-008
 Phenonip; ELE-005
 phenothiazine; FIS-018
 Phenylacetic acids.; ORG-179
 phenylenediamine; BEA-005, BEA-014
 Phenylenediamines; ANA-109
 Phenylphenalenes; QPN-035
 Phenylphenalenes; QPN-035
 PHmetro vocalizado; EDU-025
 Pholiota nameko; QPN-015
 Phosphate Ester Bonds; INO-058
 Phosphate esters; CAT-031
 Phosphatidylinositol-3-kinase; MED-053
 Phospholipids; FIS-019
 Phosphor; MAT-128
 Phosphoramidates; TEO-009
 phosphors; MAT-092
 photocatalist; MAT-052
 Photocatalysis; AMB-071, CAT-008,
 CAT-029, MAT-055, MAT-075,
 MAT-096, MAT-099, MAT-145,
 ORG-074, ORG-147
 Photocatalysts; CAT-026
 photocatalytic degradation; INO-086
 Photocatalytic Mechanism; CAT-029
 Photochemical reaction; ORG-161
 Photochemistry; FOT-002
 Photocrosslinking; MAT-140
 photodegradation; MAT-010
 photodynamic therapy; FOT-011
 Photodynamic Therapy (PDT); FOT-004
 Photodynamic Therapy; FOT-007, FOT-010,
 MAT-033, MAT-069
 photoelectrocatalysts; MAT-020
 Photoelectrochemical cell; FIS-013
 Photo-electrooxidation; FIS-013
 Photo-Fenton; CAT-022
 Photoisomerization; MAT-106
 Photoluminescence; INO-035, INO-102
 PhotoMetrix-PRO; ANA-036
 Photooxidation; FOT-002
 Photophysical Studies; INO-024
 photophysics; INO-066, INO-076
 Photoredox Catalysis; TEO-001
 photosensitizer; FOT-010
 Photosensitizers; INO-043
 Photoswitch; FOT-001, FOT-003
 Photovoltaics; TEO-020
 Phthalic Derivatives; QPN-082
 Phthalocyanines; INO-043
 Phycobiliproteins; QPN-100
 Phyllanthaceae; QPN-011
 Phyllanthus sp; QPN-011
 physical-chemical confinement; ELE-016
 physicochemical parameters; FIS-032
 Phytates; BEA-011
 Phytohormone; QPN-056
 Phytol; QPN-061
 Phytomones serpens; MED-018
 phzD; MED-017
 PhzS; MED-010
 PI3K inhibitors; MED-053
 Pibid; EDU-022, EDU-024, EDU-037
 Picloram; ELE-053
 PID; ANA-096
 Pilhas a Combustível; INO-030
 Pillar[n]arenes; MAT-118
 Pimenta do reino; QPN-071
 Pineapple; AMB-082
 Pinhão seeds; QPN-055
 Pinos; FIS-034, MAT-043
 Piper crassinervium; QPN-004
 Piper malacophyllum; QPN-107
 Piper nigrum; MED-020
 Piper; QPN-021
 Piperaceae; QPN-107
 Piperamidas; QPN-071
 Piperidona; ORG-022
 Pirólise branda; ANA-072
 Pirólise; ANA-003
 PISA; EDU-055
 pKa; FIS-024
 PLA; MAT-120
 planejamento composto central; ANA-082
 planejamento experimental; ANA-077
 Planejamento fatorial; AMB-005, ANA-039,
 ANA-094
 Plant latex; QPN-022
 plant pigments; FOT-008
 Plant Science; QPN-030
 Planta Daninha; QPN-104
 Plantas do Nordeste; QPN-047
 Plantas; QPN-088
 Plant-metal interaction; AMB-073
 Plant-microorganism; ORG-091
 Plant-pathogen interaction; ANA-052
 Plasma electrolytic oxidation; MAT-056
 Plasma process; MAT-063
 Plasma technology; AMB-036
 Plasmodium; MED-060
 Plasmon Absorption; MAT-067
 Plasmonic Catalysis; CAT-029
 plasmonic nanoparticles; COL-007
 Plasmonic; MAT-091
 Plastificante; MAT-125
 Platina; ELE-007
 Platinum(II); INO-012
 platinum; INO-001
 PLS; ANA-036
 PLS-DA; ANA-050, QPN-070
 Plurality; EDU-006
 PM2.5; AMB-045
 PM7; MED-012
 PNP; ORG-112
 Polar compounds; ANA-010
 polarização potenciodinâmica; ELE-017
 poli(ethylene oxide); COL-003
 poli(propylene oxide); COL-003
 Poliacetilenos; QPN-102
 Polianilina; MAT-060, MAT-088
 Policaprolactona-triol; ORG-076
 Polímero de Coordenação; INO-025
 polímero.; FIS-025
 polímero; FIS-021, MAT-105
 Polímeros de coordenação; INO-079,
 INO-081
 Polímeros; MAT-129
 Polipirrol; ELE-008, ELE-037, MAT-025
 Polissacarídeo; QPN-015
 Polissacarídeos; QPN-066
 Políticas Públicas; EDU-016
 Pollutant; AMB-032
 Polpa da Beterraba; QVE-005
 Poluente emergente; INO-003
 poluentes emergentes; ANA-091
 Poluição ambiental; EDU-011
 Poluição Aquática; AMB-068
 poly(alcohol vinyl); MAT-017

Polyaniline; MAT-022, MAT-038, MAT-076, MAT-124
 Polycaprolactone; MAT-136
 Polycyclic aromatic compound; ANA-065
 Polyelectrolytes; MAT-139
 Polyethylene glycol (PEG); MAT-039
 Polyfunctionalized Compounds; ORG-065
 Polyketides; QPN-051
 Polymer membranes; MAT-063
 polymer; CAT-039, ORG-069
 Polymeric carbon nitrides; MAT-046
 Polymorphism; MAT-132
 Polynuclear complex; INO-036
 Polyol Synthesis; CAT-009
 Polyphenol content; ANA-030
 Polyphenols; BEA-011
 polypyridyl compound; INO-076
 Polypyrrole; COL-004, MAT-037
 polysaccharide modification; ORG-009
 polystyrene; MAT-010
 Polyurethane; MAT-044
 Polyvinylpyrrolidone (PVP); INO-080
 pomalidomide derivatives; MED-049
 Pontederiaceae; QPN-035
 Ponto Nuvem; AMB-005
 Popularização da Química; EDU-051
 Porcelana; MAT-129
 Porcelia macrocarpa; QPN-016
 Porfirina; INO-078, TEO-013
 Porfirinas de manganês; CAT-010, INO-014
 Porous Materials; MAT-073
 Porphyrin Photosensitizer; FOT-007
 porphyrin; FOT-010, FOT-011, INO-095
 porphyrins; FOT-004, INO-061, INO-066, INO-083, INO-084, ORG-147, ORG-148
 Portable sensors; AMB-076
 pós-colheita; BEA-012
 Pós-Graduação; EDU-002
 Potability; EDU-003
 Potássio; AMB-018
 Potassium Dichromate; ANA-117
 potassium glyceroxyde; TEC-006
 Potassium hidrogeno phthalate; EDU-069
 Potassium peroxymonosulfate; ANA-030
 potato peel; ANA-057
 Potenciometria; ANA-118
 potentially toxic metal; AMB-051
 potentiometric titration; MAT-087
 Povarov reaction; ORG-027
 Praseodymium; ANA-085
 Prática docente; EDU-015
 Praxis; EDU-022
 Praziquantel analogues; MED-002
 Precipitação; AMB-018
 Precipitation; ANA-107
 Preconcentration; ANA-067
 Preferential oxidation of CO; MAT-110
 Preferential solvation; TEO-010
 prenylated hydroquinones; QPN-004
 Preparo de amostra; ANA-020, ANA-091
 Pre-salt oil; ANA-004
 pretreatment; TEC-008
 Prevention; COL-004
 Principal Component Analysis; ANA-051, BEA-010
 Proc. de Ensino-Aprendizagem; EDU-028
 Process Water; AMB-056
 Pro-drugs; MED-007, TEO-003
 Produção de videoaulas; EDU-035
 Prodrugs; ORG-049
 produto natural; INO-099, ORG-068
 Produtos Naturais; MED-037
 Profile; AMB-073
 Project Based Learning; EDU-032
 Properties; MAT-137
 Propoxur; ANA-062
 prospecção mineral; AMB-021
 Prostate cancer; ELE-014
 Protease Inhibitors; ORG-075
 Protease; CAT-024, MED-006
 Protein 3D Structure; BIO-007
 Protein modelling; MED-058
 Protein Purification; BIO-007
 Protein; FIS-008, MAT-048
 proteínas; BIO-005
 Proteins; COL-005
 Proteomics; ORG-110
 Protoporphyrin IX; MAT-069
 Prussian Blue complex; INO-047
 Psicologia da Educação; EDU-039
 Psidium myrtiloides O. Berg; MED-035, MED-048, QPN-023
 Psidium salutare; QPN-014
 PTR1; MED-056
 Pt-S; ELE-056
 Public health; TEC-001
 pulmonarin A; ORG-026
 Pulso diferencial; ELE-048
 Purina Nucleosídeo Fosforilase; MED-051
 Purine; BIO-002
 Push-Pull system; ORG-135
 PV-PCC; QVE-018
 pyocianin; MED-017
 Pyocyanin biosynthesis pathway; MED-010
 Pyrazol; INO-036
 Pyrazole; INO-012
 Pyrazoles; ORG-159, ORG-160
 pyrazolines; INO-051
 pyridine; MED-027
 Pyridine-2,6-bis(β -diketonato); INO-013
 Pyridines; ORG-136
 Pyrol; ANA-058
 Pyrolytic liquid; AMB-034
 pyrolysis catalyst; ANA-070
 pyrolysis; ANA-112, INO-034, TEC-007
 Pyromellitic Diimides (PMDI); ORG-078
 Pyrrole; ORG-047

Q

QCM-D; ELE-039
 qNMR; ANA-059
 QSAR; MED-055
 Qualidade alimentar; ANA-009

qualidade de fruto; BEA-012
 Quality control; ANA-051, ANA-115, BEA-006
 Quantification; ANA-054, ANA-097, QPN-063
 Quantum dot; ANA-089, COL-008
 Quantum dots; ANA-032, FIS-028, MAT-075
 quantum yield; COL-008, FOT-009
 Quantum; TEO-004
 Quercetin; BEA-006, INO-099
 Quercetina; QPN-046, QPN-053
 Química analítica; ANA-009
 Química click; ORG-022
 Química Computacional; TEO-018
 Química de benzino; ORG-149
 química em sala de aula; EDU-053
 Química Medicinal; MED-013
 Química Orgânica; EDU-019, EDU-026, ORG-108
 Química Prebiótica; FIS-002
 Química Supramolecular; INO-025
 Química verde; ANA-062, CAT-023, ELE-017, ORG-109, ORG-115, QVE-010
 química; EDU-013, EDU-014, EDU-028, EDU-040, EDU-059, EDU-070
 Quimiluminescência; ANA-095
 Quimiometria; ANA-042, ANA-043, ANA-044, ANA-050, QPN-086
 Quimioteca; MED-013
 Quinazoline; ORG-066, ORG-128
 Quinazolinona; FOT-005
 Quinoline Derivatives; ORG-086
 Quinoline; MED-033, MED-050, ORG-037, ORG-135
 Quinolona; ORG-058, ORG-090, ORG-118, ORG-176
 Quinolone; ORG-120, ORG-122
 Quinolones; ORG-112, TEO-009
 Quinolonocarboxamidas; ORG-119
 Quinone Methide; ORG-105
 Quinoxalina; ORG-150
 Quinoxaline; MAT-106, ORG-007, ORG-071
 Quitosana modificada; MAT-081
 quitosana; AMB-072, MAT-122, MED-011

R

radial distribution function; TEO-012
 Radiation; AMB-067
 Radicais hidroxila; ELE-029
 radical cation; FIS-018
 Radical photoredox reactions; ORG-148
 Radiofármacos; TEO-018
 Raman; MAT-036
 Raputindole A; ORG-045
 Rare earth elements; MAT-028, MAT-092, MAT-102
 Rare earth metals; ANA-101
 Rare Earth; INO-089
 Rare Earths; MAT-090, MAT-142
 rare-earth ions; INO-029
 rare-earth; INO-067
 Rb-OMS-2; AMB-003

Reação Aldólica; ORG-121
Reação Colorimétrica; AMB-074
Reação multicomponente; ORG-021
Reaction mechanism; ORG-027, ORG-087, TEO-019
ReadPlate; BEA-019
Reaproveitamento de Resíduos; QVE-013
Reaproveitamento; AMB-026
Reativo azul 160; FIS-026
Recovery; AMB-050, MAT-092, MAT-102
Recovey; INO-089
Recreational drugs; BIO-001
Recurso audiovisual; EDU-046
recycle; QVE-002
recycling; MAT-102
Red Luminescence; MAT-128
Rede Metalorgânica; INO-093
Redes Metalorgânicas; INO-005
Redes Sociais; EDU-023
Redox; EDU-033, EDU-069
redução; AMB-061, EDU-033
reduced graphene oxide; BIO-009, ELE-024, ELE-033, ELE-034, ELE-035, MAT-022, MAT-117
Reducing agent; MAT-114
Reducing capacity; ANA-109
reduction by borohydride; MAT-004
Reduction Mechanism; ELE-042
reduction of nitroaromatic; CAT-032
Reduction; TEO-004
Reductions; CAT-018
Reflection spectroscopy; ANA-045
Refractory substances; ANA-019
regioselective metalation; ORG-072
regioselective synthesis; ORG-023, ORG-046
Regioselective; ORG-140, ORG-156
reject; INO-034
relações de gênero; EDU-036
release mechanism; MAT-121
Release profile; TEC-003
Removal; AMB-032, ANA-076
Renewable Chemicals; CAT-017
Repeatability; ANA-010
Reposicionamento; MED-013
Representação; EDU-059
Representational competence; EDU-005
Residência Pedagógica; EDU-026
Residual carbon content; ANA-019
Resíduos; ANA-098, EDU-065
Resíduo agroindustrial; QPN-071
Resíduo biodiesel; CAT-020
Resíduo da clarificação; FIS-029
Resíduo de vácuo; ANA-001
Resíduo industrial; AMB-083
Resíduo; FIS-027
Resíduos da indústria cafeeira; ANA-003
Resíduos de laboratório; EDU-011
Resíduos industriais; FIS-030
Resíduos Lignocelulósicos; AMB-017
Resin; ANA-013
Resina; AMB-043
Resinas Odontológicas; MAT-113

Resinas; ANA-069
Resolução Cinética Enzimática; ORG-132
resonance Raman; FIS-018
response surface methodology; AMB-051
response surface; AMB-058
Ressocialização; EDU-014
Ressonância Magnética Nuclear; TEO-018
resveratrol; ORG-095
Reuso de água; AMB-083
reuso; MAT-082
Reverse micelles; AMB-037
Reverse transcriptase; ORG-037
Revisão de conteúdos; EDU-026
RFO; QVE-002
Rhabdocaulon lavanduloides; QPN-096
Rhodium; MAT-091
Ribeirão Preto; AMB-012
Rice husks; AMB-060
rice; QPN-013
Rice-Husk Ash; MAT-001
ridoides; QPN-072
Rio Capibaribe; AMB-049
Rio Macacu; AMB-077
Ripe rot on grapes; QPN-052
RMN; INO-031, QPN-015, QPN-105
ROMP; INO-022
ROS production inhibition; QPN-064
ROS; ORG-143
Rota de síntese; ANA-042
Routine analysis; ANA-079
Ru complex; INO-019
Ru(II) complex; FOT-006
Ru(II) poly-pyridil complexes; INO-050
Rubelose; QPN-082
Rumen; BIO-010
Rutaceae; QPN-069
Rutênio Polipiridínico; FOT-005
Rutênio; INO-072
Ruthenium (II)-diamine complex; ORG-051
ruthenium catalysts; CAT-030
Ruthenium complexes; CAT-013
ruthenium oxide; MAT-050
Ruthenium(II); INO-056, INO-076
Ruthenium; INO-022, INO-026, INO-028, INO-038, INO-092, INO-097, ORG-012, ORG-136
Ruthenium-catalyzed; ORG-179
rutin; QPN-092
RWGS; CAT-038

S

Sabão Artesanal; EDU-045
Saberes Indígenas; EDU-052
Saccharide; TEO-010
sais de cloreto; BIO-011
Salen complexes; QPN-038
salicylate; INO-049
Salt of chitosan; MAT-042
Salvador; AMB-081
sample preparation; AMB-075, ANA-017, ANA-022, ANA-079, ANA-084, ANA-088, BEA-021

Saponinas; QPN-105
Saracura-mirá; QPN-098
Saururaceae; QPN-029
Saururus cernuus; QPN-029
SAXS; MAT-035
sazonalidade; AMB-021
SBA-15; MAT-110
s-Block Metalorganic Framework; INO-063
Scaffolds; MAT-072
SCC-DFTB2; TEO-012
Scenedosporium apiospermum; QPN-050
Schiff bases; INO-021
Schistosoma mansoni BH strain; QPN-093
Schistosoma mansoni; QPN-060
Schistosomiasis drug discovery; MED-002
schistosomicidal activity; QPN-026
Science teaching; EDU-055
scientific career; EDU-055
scientific education; EDU-055
Scientific Glassblowing; HIS001
Scientific Literacy; EDU-037
Screening; BIO-002, MED-042
Screen-printed electrodes; AMB-076
Sea-almond fruit; AMB-034
Seasonality; QPN-061
Seawater; AMB-039, ANA-017
Seaweed; AMB-048
Secagem; BEA-008
sec-alcohols; ORG-006
Secondary metabolites elicitor; QPN-083
Second-Sphere Coordination; INO-039
Sedimento; AMB-008
Sedimentos; AMB-049
Seeds; QPN-085
segurança alimentar; BEA-009
Selaginella convoluta; QPN-091
selective collection; QVE-002
Selective Isomerization; FOT-001
Selectivity; ORG-169
Selênio; ORG-158
Selênio-funcionalização; ORG-144
Selenium; ORG-082, ORG-143, ORG-161
Selenocarbohydrate; ORG-131
Selenocyanates; ORG-082
selenoether; ORG-083
selenophene; ORG-073
Selenoquinoline; MED-044
Selenoquinolines; MED-043
Self-assembled films; MAT-022
Self-assembled Monolayers; ELE-044
self-assembled peptides; MAT-127
self-diffusion coefficient; TEO-012
SEM; CAT-015
Semiconductors; CAT-026, COL-008, MAT-046
semiochemicals; ORG-092
semi-quantification; ANA-008
semisynthesis; FOT-008
Senna trachypus; QPN-053
Sensing applications; MAT-064
Sensitive-hydrogels; MAT-121
Sensitivity; ANA-075

sensor; ELE-037, INO-004
 Sensores iônicos; INO-098
 Separação de misturas; EDU-041
 Serine protease; ORG-039
 SERS; MAT-108, MAT-109
 seselin; QPN-079
 sesquiterpene lactone; QPN-078
 Sesquiterpene lactones; QPN-049
 Sesquiterpenes; QPN-002, QPN-076
 sewage treatment plant; AMB-004
 Sexismo; EDU-018
 SFG spectroscopy; FIS-019
 Sheep Manure humus; AMB-028
 Shelf life; ANA-029
 shigaite; INO-048
 Shp2; MED-012
 shuttle effect; ELE-016
 SIC; ANA-015
 sickle cell anemia; MED-049
 sílica coating; MAT-144
 Silica nanoparticles; COL-002, MAT-102
 Silica; MAT-033, MAT-057
 Sílica; ORG-076
 Silicon tether; ORG-066
 Silsesquioxane; COL-009, ELE-010, MAT-014
 silver complex; INO-053
 Silver nanoparticles; INO-088, MAT-067, MAT-109, ORG-003
 silver nanowires; MAT-037
 Silver; MAT-056
 Simmons-Smith reaction; ORG-055
 Simulation; EDU-005
 Single reaction chamber; ANA-019
 Singlet Oxygen; MAT-033
 síntese hidrotérmica; MAT-045
 síntese orgânica; ORG-062, ORG-068, ORG-107, QPN-074
 Síntese química; ORG-096
 Síntese Verde; QVE-005
 Síntese; CAT-010, HIS002, INO-046, ORG-101, ORG-132, ORG-167
 Siparunaceae; QPN-070
 Sirtuin 2; MED-058, QVE-017
 Sistema de análises em fluxo; ANA-062
 Sistemas terciários; MAT-088
 Situações-problema; EDU-048
 Sleeping sickness; MED-058
 SLIPS; MAT-012
 slow pyrolysis; ANA-002, ANA-071
 Smartphone; ANA-038, ANA-040
 SMM; INO-077
 SN2 reactions; ORG-031
 S-Nitrosothiols; ORG-049, ORG-075
 SO2 oxidation; ELE-023, ELE-050
 sodium chloride; ANA-103
 sodium periodate; ANA-034
 Sofosbuvir; TEC-004
 Soil analysis; ANA-045
 Soil pollution; AMB-041
 Soil; AMB-002
 Solanaceae; QPN-042
 Solanum paniculatum L.; QPN-042
 Solanum; QPN-089
 Solar cell; MAT-051, ORG-078
 Solar cells; MAT-101
 solar foto-Fenton process; CAT-012
 Sol-gel; MAT-131
 Solid biofuel; AMB-060
 Solid phase synthesis; MAT-039
 sólidos adsorventes; FIS-022
 Solid-phase peptide synthesis; QVE-009
 Solid-state dealumination; CAT-019
 Solid-state lighting; MAT-097
 Solo; ANA-053, ANA-108
 Solos Antrópicos; AMB-065
 Solute-solvent interactions; FIS-004
 Solvatochromic dyes; FIS-004
 Solvatochromic reversal; FIS-004
 Solvatochromism; FIS-004
 Solvent Effect; FOT-009
 Solvente Eutético; ORG-167
 Solvente não aquosos; ELE-007
 solvente orgânico; BIO-011
 Solvente; INO-020
 Solventes orgânicos; MAT-129
 SOLVENTLESS REACTION; QVE-007
 Sono-Fenton; AMB-019
 Soyasaponins; QPN-101
 Soybean Leaves; QPN-103
 soybean; ANA-034
 Sparkle Model; INO-009
 SPE; ANA-094
 Specialist insect; QPN-048
 specialty coffees; ANA-006
 speciation; AMB-048
 Spectral Interferences; ANA-085
 Spectroelectrochemistry.; INO-054
 Spectroelectrochemistry; ELE-022
 spectrometry; ANA-064
 spectrophometry; ANA-034
 Spectrophotometry; ANA-029, ANA-109, BEA-005, BEA-014, BEA-015
 Spectroscopic studies; BIO-001
 spectroscopic techniques; BIO-006
 spectroscopic; ANA-041
 Spectroscopy; ANA-107, EST-001, INO-026
 spiro systems; TEO-019
 Spiroquinolones; ORG-125
 spirosuccinimides; ORG-117
 SPME; BEA-009, BEA-016
 Spodoptera cosmíoides; QPN-103
 Sporotrichosis; ANA-014
 Sports Medicine; EDU-037
 Spot test; ANA-038
 Spot tests; ANA-035
 Spray-dryer; BEA-008
 Square wave voltammetry; ELE-042
 square-wave voltammetry; ELE-032
 SrCO3; CAT-006
 SRPIN 340; ORG-040
 stability; ANA-006, ANA-029, COL-002
 stabilizers; CAT-032
 Stachybotrys levisporous; QPN-067
 Staphylococcus aureus; BIO-003, MED-043
 Staphylococcus aureus; MAT-120
 Star fruit; QPN-084
 Stationary phase; ANA-012
 Stemphyllium lycopersici; QVE-014
 Stereoelectronic interactions; TEO-017
 Stereosynthesis; CAT-035
 Sterigmatocystin; QPN-039
 Steroidal alkaloids; QPN-042
 Sterols; AMB-046
 Stimuli-responsive materials; COL-004
 Stoichiometry; EDU-030
 Strategy; MAT-137
 strontium hydroxide; CAT-034
 Structural characterization; INO-085
 Structural modifications; ORG-057
 Structure sharing; EDU-067
 structure-activity relationshi; MED-016
 Structure-Based Drug Design; MED-001
 Substância hùmica; AMB-007
 Succinimidas; ORG-102
 Sucos naturais; ANA-039
 Sucrose; QVE-003
 sugar functionalization; FIS-011
 sugar yield; AMB-058
 Sugarcane Bagasse; ELE-024
 Sugarcane Biorefinery; TEC-005
 Sulfated polysacchharides; MED-024
 Sulfato de ferro (II); HIS002
 Sulfeto de di(4-piridila); INO-081
 Sulfide; CAT-026, MAT-021
 sulfite; BEA-020
 Sulfomandiocato; HIS002
 Sulfonyl; ORG-140, ORG-156
 Sulfoxonium Ylides; ORG-097, ORG-104
 Sulfur Dioxide; ELE-040
 sulfur ylide; ORG-010
 Sulfur Ylides; ORG-111, ORG-137
 Sulfur; BEA-013
 Sulfur-containing drugs; ANA-029
 sunflower; ANA-034
 Sunlight photocatalytic degrad; FIS-028
 Sunscreens; INO-080
 superbasic media; ORG-073
 supercapacitor; ELE-034, ELE-043, MAT-084
 supercapacitors; ELE-019, MAT-022
 Supercritical fluid extraction; QPN-085
 Superparamagnetism; MAT-033
 supply dam; ELE-044
 supported catalyst; CAT-034
 Supported heteropolyacid; CAT-001
 Supramolecular aggregates; CAT-031
 supramolecular catalysis; MAT-127
 Supramolecular Chemistry; MAT-069
 Supramolecular; FOT-002, ORG-038
 Surface bond; ELE-056
 surface ligant; COL-008
 Surface modification; COL-002, MAT-058, MAT-108
 Surface plasmon resonance.; FIS-012
 Surface plasmon resonance; FIS-007
 Surface plasmon ressonance; FIS-008

surface plasmons; FOT-004
Surface properties; MAT-138
Surface screening; MED-009
surface water; AMB-004
Surfactant; COL-007, FIS-008, ORG-069
Surfactantes aniônicos; AMB-047
Surfactin; QPN-028
surveys; EDU-055
Sustainability; AMB-044, EDU-065
Sustentabilidade Ambiental; QVE-010
Sustentabilidade; MAT-122
Suzuki; CAT-014, ORG-145
Suzuki-Miyaura cross coupling; ORG-079
Swab; ANA-098
SWASV; ELE-025
sweet polyplexes; FIS-011
Swinglea glutinosa; QPN-045
Synchrotron Radiation; MAT-066
synergistic; QPN-001
synovial fluid; ANA-068
synthesis of hybrids; ORG-050
Synthesis; AMB-003, AMB-006, AMB-015,
AMB-030, INO-026, INO-048, INO-101,
MAT-004, MAT-137, MED-018,
MED-047, MED-053, ORG-037,
ORG-064, ORG-156, QVE-017
syrup; ANA-059

T

Tabela Periódica; EDU-008, EDU-009
Tabernaemontana catharinensis; QPN-022
Talc; ANA-120
Tannery sludge; AMB-019
Tautomerization; FOT-003
TBT; ANA-087
TCCA; ORG-009
TDDFT; FIS-018
TD-DFT; ORG-135
Teaching of Chemistry; EDU-042
Teaching; EDU-030
Teas; ANA-030, BEA-005, BEA-014,
BEA-015
Tecnócio; TEO-018
Técnicas de Caracterização; AMB-001
Tecnologias no Ensino; EDU-004
Telhas de Fibrocimento; AMB-001
Tellurium; ORG-143
Temephos; MAT-104
Temperature of melting; INO-071
TEMPO oxidation; ORG-009
Teor de proteína; ANA-063
teores minerais; BEA-012
terbium; MAT-034
Terbium-Europium; INO-035
Termogravimetria; INO-031
Termogravimetria; ANA-101
temperature control; ANA-096
Terpene; ORG-172
terpenes; CAT-030
Terpyridines; INO-038
Terra Preta de Índio; AMB-065
Terras raras; ELE-013, MAT-131, MAT-135

Teste F; ANA-118
Teste t; ANA-118
Tetrahydro-1,8-naphthyridines; ORG-085
Tetrahydrofuran Lignans; QPN-036
Tetrahydrothiophene; ORG-111
tetrahydro- β -carboline; ORG-138
tetrazóis; INO-100
Tetrazol; ORG-008
Tetrazoles; ORG-160
thallium; AMB-038
Theileriosis; ORG-110
Theoretical Calculations; ORG-146
Theoretical Chemistry; INO-061
Thermal Analysis; ANA-101, ANA-103,
ANA-104, ANA-107, MAT-068, TEC-009
Thermal decomposition; MAT-029
Thermo Shift Assays; MED-010, MED-017,
MED-056
Thermochemical Route; MAT-018
Thermodynamic properties; CAT-001
Thermodynamic; FIS-007
Thermogravimetric Analysis; ANA-120
Thermogravimetry; TEC-009
Thermosensitive liposomes; MED-039
Thermotropic phase transition; MED-039
Thimerosal; ANA-033, ANA-089
Thin film; MAT-040, MAT-076, MAT-084
thin films; INO-002, MAT-002, MAT-065
thioglycolic acid; ORG-003
Thiol adsorption; ELE-056
Thiol oxidation; ELE-056, ORG-083
Thiosemicarbazide; ORG-164
thiosemicarbazone complexes; MED-041
Thiosemicarbazones; MED-001
Thiourea; MAT-046, MED-025
Three-dimensional graphene; MAT-018
Three-level Factorial design; ANA-114
thymol; ORG-044
tin catalysts; CAT-021
tintas indígenas; EDU-029
TiO₂; MAT-099, MAT-131
Tiocarbonato cíclico; CAT-010
Tiourea; AMB-043
Tioureas; ORG-016
Titanates; CAT-008
Titânio; ANA-048
titanium dioxide; AMB-004, MAT-002
Titanium oxide; MAT-145
Titanium Phosphate; MAT-136
Titanium; MAT-013
Titrimetric analysis; EDU-069
TLC-MS; ANA-013, QPN-106
toluene; AMB-033
Tomato; AMB-073
tomatoes; ORG-092
Total Acid Groups; MAT-030
total Hg; ANA-111
total synthesis; ORG-045, ORG-072,
ORG-172
toxicidade; MED-021
Toxicity Tests; AMB-027
toxicity; AMB-004, QPN-034

TPTZ; ANA-109
Trace Elements; ANA-017
Transaminases; QVE-009, QVE-016
Transdermal device; MAT-143
transesterificação; TEC-011
Transesterification; ANA-100, CAT-027,
QVE-014, TEC-006, TEC-010
Transfer hydrogenation; CAT-018, ORG-051
transition state studies; TEO-003
Transition-metal cluster; TEO-015
Trans- β -Caryophyllene; MED-037, MED-048
trasesterificação; ORG-061
tratamento de água; FIS-027
Tratamento de efluentes; EDU-011
Tratamento; AMB-018, AMB-047
Treatment; AMB-050
Triazina; ORG-150
Triazol; MED-003, ORG-176
Triazole; MED-002, MED-032, ORG-005,
ORG-120, ORG-170
Triazolopyrimidine; MED-033
Tribromoisoctanuric acid/PPh₃; ORG-036
Trichoderma sp; QPN-025
Trichophyton rubrum; MED-034
Triclosan; ANA-031, MAT-055
Triflic Acid; ORG-179
trifluoromethyl group; ORG-046
Triglycerol; CAT-004
trimethylsulfonium; ORG-010
Trinuclear complexes; INO-038
tripanossoma brucei; TEO-008
tripsina; MAT-023, MAT-086
Tris(hidroxiometil)aminometano; INO-074
Triterpene saponins; QPN-101
triterpenoides; ORG-168
triterpenos; QPN-099
Tropical sprangletop; QPN-077
troponin I; MAT-109
Tropospheric Ozone; AMB-042
trypanocidal activity; ORG-072
Trypanocidal Agents; MED-055
trypanomicida; ORG-044
Trypanosoma cruzi; MED-006, MED-014,
MED-020, MED-022, MED-040,
MED-046, QPN-006, QPN-010,
QVE-017
Trypanosoma cruzi; ORG-081
Tuberculose; MED-051
Tubulin; MED-054
Tubulina; ORG-021
Tumor biomarker; ELE-014
Tunelamento Quântico; TEO-005
Tungsten oxide; MAT-027, MAT-050
Tungsten; TEO-004
Turfa; INO-008
tween20; FIS-005
tween80; FIS-005
Two electron donors; MAT-019
two-dimensional cobalt oxide; MAT-083
Two-dimensional; TEO-004
Type 2 diabetes; MED-032
Tyrosine Kinase receptor; ORG-080

U

U-3CR; CAT-035
UALLE; ANA-058
Ultrafast charge transfer; MAT-019
Ultra-small nanoparticles; MAT-015
Ultrasound method; ELE-026
ultrasound; TEC-008
Ultrasound-assisted extraction; MAT-028
Ultrasound; AMB-046
Ultrastructural changes; QPN-029
Ultra-trace concentration; ANA-079
Ultrasound determination; ANA-007
Ultraviolet Radiation; INO-080
universidade; EDU-036
university; EDU-065
Unripe fruit; QPN-084
Unsaturated Polyesters; MAT-140
upconversion; MAT-016, MAT-061,
MAT-090, MAT-103, MAT-112
Upconverting Nanoparticles; MAT-107
Uranium; INO-075
urban atmosphere; AMB-033
Urban Emissions; AMB-040
Urea granules; TEC-003
Urease; QPN-057
Ureasil; AMB-032
UV Protection; INO-080
UV radiation; AMB-019
Uvaia; BEA-016
UV-blocker; MAT-010
UV-Vis absorption; ORG-041
UV-vis spectroscopy; ANA-031
UV-Vis; AMB-016, FOT-009

V

Vaccine; ANA-089
Vaccines; ANA-033
Vacinas comerciais; ANA-063
Vale do São Patrício; AMB-021
Valence tautomerism; INO-073
Validation; ANA-014
Vanádio(IV); INO-060, INO-069
Vanadium complexes; INO-021
vanadium; ORG-006
Vancomycin; QVE-008
Variabilidade química; QPN-053

Vegetable oil; QVE-004
Verapamil; MAT-093
Verubulin analogs; ORG-080
Vinasse; AMB-059, TEC-005
Vinhos Tintos; FIS-024
Vinhoto; AMB-018
Vinyl-1,2,4-oxadiazoles; ORG-106
Vinylidene substitution; ORG-043, ORG-177
Virola surinamensis; QPN-037
Virtual screening; MED-038
Virtual screening; MED-047
Vochysiaceae; QPN-040
Volatile Organic Compounds; AMB-040,
AMB-042, ANA-006, QPN-013,
QPN-021
volatile; QPN-005
Volatiles; QPN-061
volatilization; ANA-018
Voltametrica cíclica; ELE-015, ELE-036,
ELE-053
Voltametrica de redissolução; ELE-048
voltametrica; ELE-055
Voltammetric Determination; ELE-049
voltammetry; ANA-092, ELE-028, ELE-041,
ELE-044
Volumetric techniques; EDU-031

W

Waste printed circuit boards; MAT-028
Waste; CAT-022, COL-009, MAT-044
Wastewater remediation; MAT-011, MAT-049
Wastewater; AMB-037
water in salt; ELE-019
Water pollution; AMB-014
Water Reuse; AMB-013
Water samples; ANA-065
water soluble ions; AMB-079
water splitting; MAT-020
Water stress; QPN-030
water treatment; AMB-078, INO-011
Water; QVE-018, TEO-012
Water-soluble; ORG-122
WDXRF; ANA-046, ANA-102
WEB; ORG-153
Webcam detector; BEA-003
Weblog; EDU-040
Wettability; COL-002

WGS Reaction; MAT-111
Wheat flour; ANA-054
whitefly; ORG-092
Whole-cell catalysis; CAT-025
wine classification; ANA-041
wine; BEA-020, QVE-001
Wolff rearrangement; ORG-134
wolframite; MAT-007

X

Xantenos; ORG-130
Xanthate; EST-001
xanthenes; ORG-014
Xanthommatin; ORG-072
xanthyletin; QPN-079
XEOL; MAT-066
X-ray structures; INO-013
Xylariaceae; QPN-069

Y

Yamgambi km 5; TEO-011
Youth and Adults; EDU-042
Yttrium complexes; INO-013
Yttrium tantalate; MAT-090
Yttrium Tantalates; MAT-103

Z

Zebrafish; BIO-004, ORG-019
Zeólita ZSM-5; CAT-003
Zeólita; AMB-025
zeolita; FIS-003
Zeolite composites; MAT-003
Zeolite; AMB-030, MAT-001
Zeyheria montana; QPN-057
Zika vírus; ANA-105, ORG-058
zinc oxide nanoparticles; MAT-010
Zinc oxide; FIS-028, MAT-075
Zinc(2+) metal complexes; INO-065
Zinc(2+); INO-059
Zinc(II) complex; INO-023
Zinco(II); INO-008
Zinco; AMB-024
Zirconia; MAT-132, TEO-015
Zn(II) complexes; INO-055
ZnO nanorods; MAT-020
Zornia brasiliensis; QPN-101

Área: ANA

Nº de Inscrição: 00002

Geographical traceability of South Brazilian red wines through fused spectroscopic data

Mateus P. Schneider(PG)^a, Fernanda C. Bock (PG)^a, Celito C. Guerra (PQ)^b, Leticia L. Silva (PQ)^b, Marco F. Ferrão (PQ)^a, Adriano A Gomes (PQ)^a

araujo.gomes@ufrgs.br; mateuspschneider@gmail.com

^a Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Instituto de Química, Porto Alegre, RS, Brasil, 90650-001

^b Empresa Brasileira de Pesquisa Agropecuária, Centro Nacional de Pesquisa de Uva e Vinho, LACEM, Bento Gonçalves, RS, Brasil, 95700-000

keywords: wine classification, data fusion, spectroscopic

Highlights

South Brazilian red wines. Geographical traceability. Data fusion.

Abstract

The state of Rio Grande do Sul is the largest national wine producer, being the regions of Serra Gaúcha and Campanha the most outstanding. These two zones are different in climate, altitude, soil and pluviometric indices, thus generating different wines in aroma, flavor and quality. The traceability of wines with indication of their geographical origin identity is an important aspect for producers and consumers. Geographical traceability is not a trivial task, and an useful approach is to use signals recorded in different sources in order to achieve best results. In this work is reported classification of red wines produced in the state of Rio Grande do Sul by means of fused spectroscopic (UV-Vis and ATR-FTIR) data. Thirty-five samples (provided by EMBRAPA Grape and Wine) from different varieties of grapes (Ancellotta, Cabernet Franc, Carbenet Sauvignon, Marselan, Merlot, Pinot Noir and Terodelgo) were taken into account. All calculation was carried out in MatLab[®] environmental. Initially, recorded data were inspected through of principal components analysis (PCA), in order to evaluate the discriminating power of UV-Vis and IR spectra, both individually and fused at low level. This first step showed tendency of separation between the samples based on the region of the grapes. PLS-DA models were constructed for UV (16 VL) and IR (2 VL) data, then reaching correct classification rates of 37% and 75% respectively for a test set (8 samples) chosen from the pool of samples by Kernnard-Stone approach. Data was fused at low (join of the data matrices), medium (selection of the most informative variables by genetic algorithm-GA) and high levels. In the last case, selected variable by GA were used as input in the construction of potential functions for each class, these responses were combined to construct a quadratic decision boundary – see **Fig. 1**)

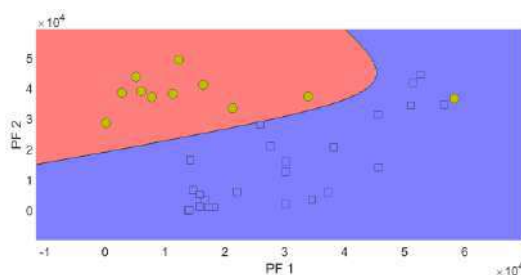


Figure 1: Quadratic decision boundary based on the potential function values of class 1 (Serra Gaúcha-squares) versus class 2 (Campanha –balls).

For fused data at low and medium levels the correct classification rate was 81% and 85%, respectively. In high-level fusion, all samples, of the independent test set, were classified correctly. Only one sample, of the training set, was allocated in the wrong class. The findings suggest that the fusion of the spectroscopic data show synergism, achieving better results when compared to the individual data. The fusion at a high level proved to be the most appropriate.

Acknowledgments

EMBRAPA Grape and Wine. CAPES and CNPq.

Synthesis of a Schiff Base Compound with Potential Antioxidant and Anticorrosion Activity in Biodiesel

Lucas F. Martins (PG)¹, Vivian C. da Silveira (PQ)², Glória M. F. V. Aquije (PQ)³, Wanderson Romão (PQ)³, Reginaldo B. dos Santos (PQ)¹, Álvaro C. Neto (PQ)¹ and Valdemar Lacerda Jr (PQ)^{1*}

vljuniorqui@gmail.com

¹Departamento de Química, UFES; ²Departamento de Ciências Naturais, UFES; ³Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia do Espírito Santo;

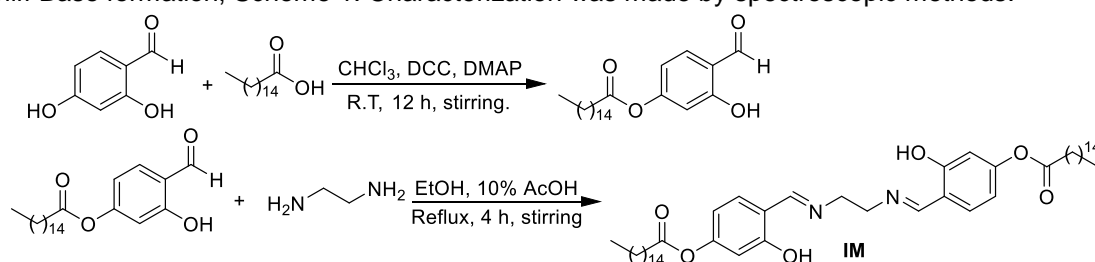
Keywords: *biodiesel, organic synthesis, oxidative stability, antioxidant, corrosion inhibitor.*

Highlights

Synthesis of a new molecule to improve oxidation stability and reduce metal corrosion in biodiesel media

Abstract

Biodiesel is a renewable fuel that has seen increased consumption over the years. Nevertheless, biodiesel (from any feedstock) has lower oxidative stabilization and promotes corrosion in combustion systems and storage tanks. To reduce biodiesel oxidation and metal surface corrosion, antioxidants and corrosion inhibitor compounds are used. In this work, we synthesized a hybrid molecule **IM** and applied it concurrently as an antioxidant and a corrosion inhibitor. The molecule was synthesized through two steps: Steglich esterification and Schiff Base formation, Scheme 1. Characterization was made by spectroscopic methods.



Scheme 1

Commercial biodiesel (60% soy, 40% fat) was mixed in different tubes with **IM** and commercial compounds commonly applied in biodiesel. Corrosion was studied on AISI 1020 carbon steel coupons with their surfaces treated with silicon carbide paper (180–1200 grit). Coupons were immersed for 15, 30 and 60 days at room temperature closed to air and in the dark. Optical microscopy, MEV and AFM steel surface microphotos revealed that **IM** acted better as an inhibitor to corrosion than commercial compounds. After 60 days, the coupons in contact with **IM** showed less pit corrosion and a more regular surface, as shown in Figure 1. Oxidative stability was measured using the PetroOXY method, and the **IM** compound increased biodiesel stability. Initial induction period of biodiesel was 22.7 minutes. After the addition of **IM** and 60 days, the induction period was 24.9 minutes.

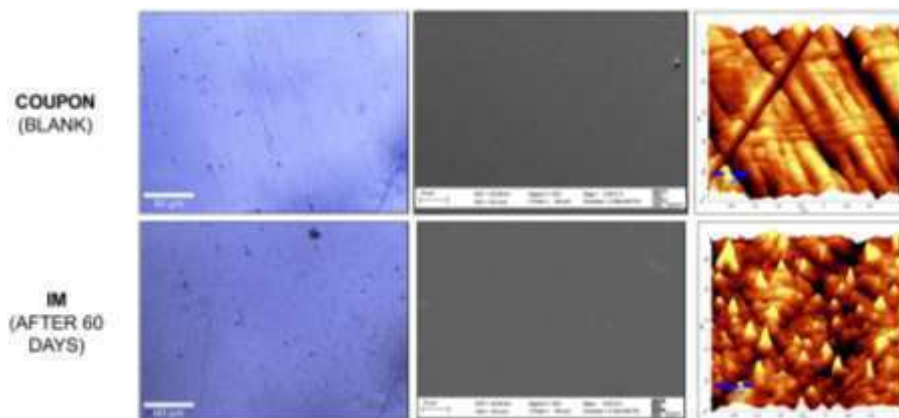


Figure 1

Acknowledgements: CNPq, CAPES and FAPES

Enzymatic hydration of aliphatic and aromatic nitriles

Maraylla I. Moraes (PG),¹ Cesar Iglesias (PG),² Sonia G. Rodriguez (PQ),² Cintia D. F. Milagre (PQ)^{1*}
 cintia.milagre@unesp.br

¹Institute of Chemistry, UNESP, Araraquara Brazil; ²Facultad de Química, UDELAR, Montevideo, Uruguay

Palavras Chave: Biocatalysis, Cloning, Nitrile hydratase, Nitriles, Amides

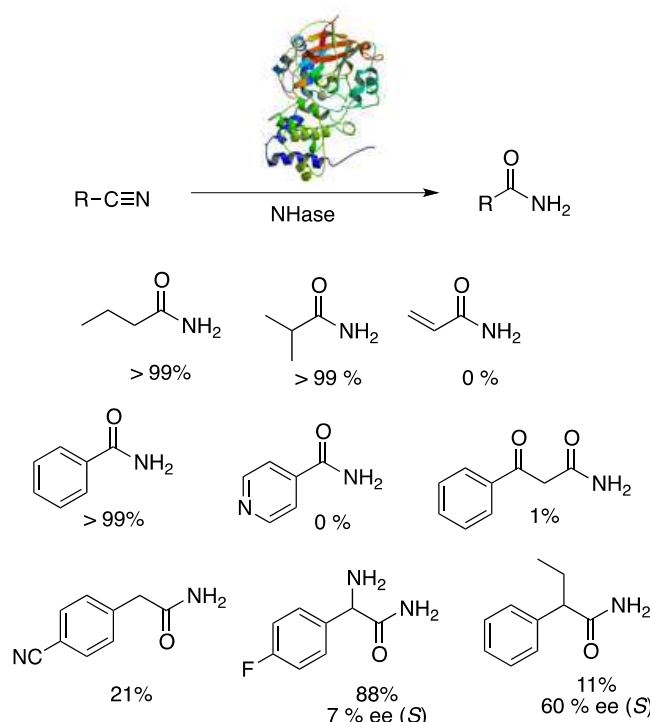
Highlights

The nitrile hydratase genes and the corresponding activator gene from *Rhodococcus erythropolis* were cloned. The overproduced enzyme displayed a broad substrate scope, regio- and enantioselectivity.

Resumo/Abstract

Nitrile hydratase (NHase, EC 4.2.1.84) catalyzes the hydration of nitriles into their corresponding amides, with the further the conversion of the carboxylic acid avoided. They have attracted considerable attention as an industrial biocatalyst in the large-scale production of acrylamide, nicotinamide and 5-cyanovaleramide in a greener way compared to previously manufacture methodologies.¹ Herein, a NHase gene from *Rhodococcus erythropolis* ATCC 4277 was cloned, overexpressed in strain of *E. coli* and evaluated for substrate scope, regio- and enantioselectivity (Scheme 1).

The strategy for the cloning of genomic DNA of *R. erythropolis* was based on Restriction Free (RF) cloning technique using the pACYC Duet-1 vector. The NHase gene of *R. erythropolis* ATCC 4277 consists of an α - and β - subunit genes and an activator gene which were all successfully cloned. The nucleotides sequence of gDNA of the selected clones confirmed that NHase of *R. erythropolis* is a Fe-type NHase. The sequencing of the recombinant strain confirmed the extent of the α - and β - subunits and an activator gene with 220, 221 and 400 amino acids, respectively. The NHase from *R. erythropolis* accepted both aliphatic and aromatic nitriles, moreover, the reactions with recombinant *E. coli* demonstrated the stereoselective and regioselective capacity of NHase as a versatile biocatalyst with potential for commercial applications.



Scheme 1. Substrate specificity and selectivity of the NHase

Acknowledgments:

We would like to thank CERSusChem (GSK and FAPESP grant # 2014/50249-8), CNPq (Proc 134686/2016-0), INCT BioNat (CNPq grant # 465637/2014-0 and FAPESP grant # 2014/50926-0) and CAPES.

References:

[1] Gong, J. S.; Shi, J. S.; Li, H.; Zhou, Z. M.; Xu, Z. H.; Nitrile-converting enzymes as a tool to improve biocatalysis in organic synthesis: recent insights and promises. *Crit. Rev. Biotechnol.*; **2017**, *37*, 69-81.

Nondestructive quantification of cassava starch in wheat flour for bread making by using digital images and PLS regression.

Flaubert S.M. Filho (IC), Gean B. Costa (PQ)^{1*}, Ana L.P.B. Silva (IC), Leticia M.C. Guimarães (IC), Sabryna E. A. Dantas (IC), José G.V. Neto (PQ)², Paulo H.G. Diniz (PQ)³, Ellen S.A. Duarte (PG)⁴, Valber E. Almeida (PG)⁵, David D. S. Fernandes (PQ)⁵, Mário C.U. Araújo (PQ)⁵

flaubertfilho.ff@gmail.com ; geanbc_@hotmail.com

¹Chemistry Department, UFRN; ²Chemistry Department, UEPB; ³Chemistry Department, UFBA; ⁴Chemistry Department, UFPR; ⁵Chemistry Department, UFPB

Keywords: Cassava starch; Wheat flour; Quantification; Color histograms; Partial Least Squares.

Highlights

Development of a nondestructive analytical methodology to quantify the content of cassava starch in wheat flour (used for baking) using digital images coupled to PLS.

Resumo/Abstract

In 2017, Brazil imported 7.2 million tons of wheat (i.e. most of 50% of its consumption), the highest volume in the last decade, after a crop failure in the country¹. As it is not self-sufficient, a Bill of 2009 from the Brazilian Chamber of Deputies discusses the addition of cassava byproducts (refined flour, shaving flour or starch) to wheat flour². However, one of the obstacles to the approval of the bill is to guarantee to the consumer that the product to be acquired has the proposed composition. Thus, in this study, we demonstrated that digital images coupled with PLS regression can provide good alternative analytical methodologies for cassava starch determination in wheat flour for bread-making. PLS results obtained for the differing combinations of color histograms in the Grayscale, RGB (Red, Green and Blue) and HSI (Hue, Saturation and Intensity) channels. As can be seen, all models present similar results in terms of calibration and validation, except for Grayscale that achieved inferior results in terms of coefficient of correlation (r) and root mean square error (RMSE) of the calibration, validation and prediction sets. On the other hand, comparing the predictive ability of the obtained models (except those one using only Grayscale histogram), all models presented excellent results with values of r higher than 0.99, root mean squares error of prediction (RMSEP) lower than 0.13, ratio performance deviation (RPD_{pred}) above 7 and relative error of prediction (REP) lower than 8%. Despite of this, the best approach was obtained by using the RGB + HSI histograms, which achieved r_{pred} of 0.994, RMSEP of 0.091 mg kg⁻¹, RPD_{pred} of 9.667 and REP of only 6.588%.

Table 1. Results obtained for PLS modeling with different color histogram combinations for cassava starch determination in wheat flour in the range of 3–30% m m⁻¹.

| Color histogram | LVs | Calibration ($n = 120$) | | Validation ($n = 40$) | | Prediction ($n = 40$) | | | |
|-------------------|-----|---------------------------|------------------------------|-------------------------|------------------------------|-------------------------|------------------------------|--------------|---------|
| | | r_{cal} | RMSEC (mg kg ⁻¹) | r_{val} | RMSEV (mg kg ⁻¹) | r_{pred} | RMSEP (mg kg ⁻¹) | RPD_{pred} | REP (%) |
| Grayscale | 2 | 0.970 | 0.234 | 0.965 | 0.235 | 0.969 | 0.220 | 4.103 | 18.336 |
| RGB | 10 | 0.992 | 0.123 | 0.992 | 0.113 | 0.992 | 0.102 | 8.192 | 7.740 |
| HSI | 10 | 0.993 | 0.114 | 0.993 | 0.111 | 0.992 | 0.112 | 7.881 | 7.498 |
| Grayscale + RGB | 11 | 0.994 | 0.107 | 0.993 | 0.090 | 0.995 | 0.099 | 10.000 | 6.890 |
| Grayscale + HSI | 8 | 0.992 | 0.124 | 0.993 | 0.107 | 0.990 | 0.126 | 7.198 | 7.769 |
| RGB + HSI | 10 | 0.994 | 0.109 | 0.994 | 0.097 | 0.994 | 0.091 | 9.667 | 6.588 |
| Grayscale+RGB+HSI | 9 | 0.994 | 0.102 | 0.992 | 0.118 | 0.993 | 0.099 | 8.362 | 7.719 |

Reference

- Coelho, M. S., & Salas-Mellado, M. M. (2015). Food Science and Technology, 60, 729–736. 242
- CONAB. Indicadores da Agropecuária, Ano XXVI, n. 12, ISSN: 2317-7535. Brasília-DF, Brasil. (2017)

Agradecimentos/Acknowledgments

UFRN, UEPB, UFPB, UFBA, UFPR

Área: ANA

Inscrição: 48786

Identificação de misturas biodiesel/diesel de acordo com a rota de síntese usando PLS-DA e espectroscopia NIR

Sabryna E. A. Dantas (IC), Gean B. Costa (PG)^{1*}, Ana L.P.B. Silva (IC), Leticia M.C. Guimarães (IC), Flaubert S.M. Filho (IC), José G.V. Neto (PQ)², Paulo H.G. Diniz (PQ)³, Ellen S.A. Duarte (PG)⁴.

sa-brynaeduarda@hotmail.com ; geanbc_@hotmail.com

¹Departamento de Química, UFRN; ²Departamento de Química UEPB; ³Departamento de Química, UFBA; ⁴Departamento de Química, UFPR

Palavras Chave: Classificação, blends, Rota de síntese, Quimiometria.

Highlights

Identification of biodiesel/diesel mixtures according to the route of synthesis using PLS-DA and NIR spectroscopy

Analytical methodology for the classification of biodiesel / diesel mixtures through its route of synthesis (methyl and ethyl) using near infrared spectroscopy-NIR and chemometrics.

Resumo/Abstract

A transesterificação é o processo de transformação de um éster carboxílico em outro, através da troca do grupo RO⁻ presente no éster original por outro grupo semelhante proveniente de um álcool na presença de um catalisador ou condições supercríticas para dar origem à glicerina e a monoalquil-ésteres (biodiesel). Neste sentido, álcoois simples de cadeia curta, como metanol e etanol, têm sido usados na transesterificação. O metanol é mais utilizado por razões de natureza física e química (cadeia curta e polaridade). Contudo, vale ressaltar que o etanol está se tornando popularmente difundido por ser de fonte renovável e não é tóxico¹⁻². Assim, este trabalho objetivou o desenvolvimento de uma metodologia analítica para a classificação de misturas biodiesel/diesel (B7) através de sua rota de síntese (metílico e etílico) empregando NIR e técnicas de reconhecimento de padrões supervisionadas (SIMCA, PLS-DA e SPA-LDA)³. Foram utilizadas 180 amostras de misturas B7, sendo 60 amostras com apenas o álcool metílico, 60 apenas álcool etílico e 60 contendo misturas de ambos os álcoois. Na construção dos modelos quimiométricos as amostras foram divididas em conjuntos treinamento (135; 75%) e teste (45; 25%) utilizando o algoritmo KS. Os espectros foram obtidos na faixa de 900 a 2300 nm. Os dados foram pré-processados com 1ª derivada de Savitzky-Golay, empregando um polinômio de 2ª ordem e janela de 21 pontos. SIMCA, PLS-DA e SPA-LDA foram então construídos com validação cruzada. O PLS-DA apresentou o melhor resultado com 100% de classificação correta.

Tabela 1. Matriz de confusão para os modelos de classificação SIMCA, SPA-LDA e PLS-DA.

| | SIMCA | | | | | | SPA-LDA | | | | | | PLS-DA | | | | | |
|----------------|-------------|----|----|--------|-----|----|-------------|----|----|-------|-----|-----|-------------|-----|-----|-------|-----|-----|
| | Treinamento | | | Teste | | | Treinamento | | | Teste | | | Treinamento | | | Teste | | |
| | MI | ME | ET | MI | ME | ET | MI | ME | ET | MI | ME | ET | MI | ME | ET | MI | ME | ET |
| MI | 33 | 8 | 4 | 14 | 0 | 1 | 40 | 2 | 3 | 14 | 0 | 1 | 45 | - | - | 15 | - | - |
| ME | 7 | 33 | 5 | 0 | 15 | 0 | 6 | 38 | 1 | 2 | 13 | 0 | - | 45 | - | - | 15 | - |
| ET | 3 | 10 | 32 | 0 | 4 | 11 | 1 | 0 | 44 | 0 | 0 | 15 | - | - | 45 | - | - | 15 |
| Sensibilidade | 73 | 73 | 71 | 93 | 100 | 73 | 88 | 84 | 97 | 93 | 86 | 100 | 100 | 100 | 100 | 100 | 100 | 100 |
| Especificidade | 88 | 80 | 90 | 100 | 86 | 96 | 92 | 97 | 95 | 93 | 100 | 96 | 100 | 100 | 100 | 100 | 100 | 100 |
| Classificação | 72,59% | | | 88,89% | | | 90,3% | | | 93% | | | 100% | | | 100% | | |

MI = Mistura Metílico e Etílico, ME = Metílico, ET = Etílico.

Referencias

- [1] Takase, M. (2015) *Renewable & Sustainable Energy Reviews*, 43, 495–520.
- [2] Amais, R.S. (2015). *Analytical Methods*, DOI: 10.1039/C5AY00530B.
- [3] Costa, G.B. (2015). *Talanta*, 139, 50–55.

Avaliação da toxicidade e atividade antioxidante de enol éter

Yara Cecilia Monteiro Oliveira (PG)^{1*}, Geralda de Fátima Lemes (PQ)¹, Maísa Borges Costa (PQ)¹.

yaracmoqi@gmail.com

¹- Laboratório de Síntese, Isolamento e Modificações de Compostos Orgânicos (LabSIMCO) – Campus de Ciências Exatas e Tecnológicas Henrique Santillo – Universidade Estadual de Goiás (UEG-CCET); Caixa Postal 459, Cep. 75132-400 – Anápolis-Go – Brasil.

Palavras Chave: Macrolídeos, Enol Éter, Antioxidante, Toxicidade, Derivatização.

Highlights

Evaluation of the toxicity and antioxidant activity of enol ether

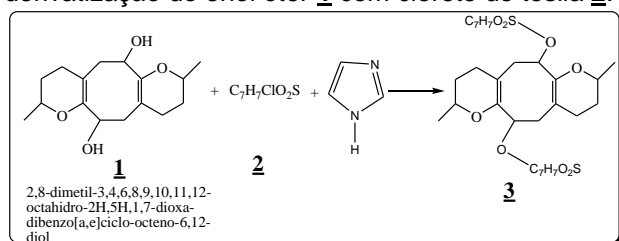
Isolated by Costa and collaborators (2017) from macrolide synthesis, this work aimed to evaluate the toxicity by the lethality test with *Artemia salina* and the antioxidant activity with the free radical of DPPH, of enol ether **1** and its derivative tosylate **3**.

Resumo

Os macrolídeos se destacam como uma das classes de moléculas mais importantes em potencial antimicrobiano.¹ Com o objetivo de se desenvolver rotas sintéticas para a síntese de macrolídeos, Costa e colaboradores (2017)¹, obtiveram no decorrer deste processo um importante intermediário reacional, o enol éter **1** (Esquema 1).

Sendo, portanto inédito, não há registro do estudo de suas atividades biológicas e outros ensaios. Portanto, este trabalho vislumbrou a avaliação da toxicidade e do potencial antioxidante do composto **1** e seu derivado tosilato **3** (Esquema 1).

Esquema 1- Representação do mecanismo de derivatização do enol éter **1** com cloreto de tosilato **2**.



A avaliação da toxicidade de **1** e **3** foi realizada pelo ensaio de letalidade com *Artemia salina* nas concentrações de 1000 - 62,5 µg. mL⁻¹. A toxicidade foi expressa pela concentração letal média, CL₅₀. Em nossos estudos, e de acordo com a classificação do nível de toxicidade por Nguta e colaboradores (2012),³ o enol éter **1**, com CL₅₀=731,69 ± 4,08 µg.mL⁻¹ apresenta baixa toxicidade e seu derivado tosilado **3** com CL₅₀> 1000 µg. mL⁻¹ não apresenta toxicidade.

Já a avaliação da capacidade antioxidante de **1** e **3**, foi realizada através da determinação da porcentagem de redução inicial do radical livre DPPH pela amostra nas concentrações de 500 -

83,3 µg.mL⁻¹. A atividade antioxidante foi expressa como concentração eficiente, CE₅₀. Tais valores foram obtidos a partir da análise de regressão linear da porcentagem de atividade antioxidante em função da concentração da amostra.

Em comparação com o CE₅₀ do padrão de ácido ascórbico, 5,54 ± 0,16 µg.mL⁻¹, tanto o enol éter **1** CE₅₀=235,42 ± 0,24 µg.mL⁻¹, e o seu derivado tosilato **3**, CE₅₀> 4000 µg.mL⁻¹, não apresentam eficiência na ação antioxidante.

Sendo o teste de toxicidade com *A. salina* um ensaio preliminar que pode determinar também a presença de outras ações biológicas no composto, os ensaios aqui realizados se correlacionam, ou seja, o enol éter **1** apresenta baixa toxicidade, assim como baixa ação antioxidante, e o composto **3** não apresenta toxicidade, o que confirma a não ação antioxidante.

Agradecimentos

Os autores agradecem a CCET/UEG e ao órgão de fomento à pesquisa a CAPES.

Referências Bibliográficas

¹ COSTA, M. B.; et al. Synthesis and Expansion of Bicyclic Enol Ether. A Probable Precursor for the Synthesis of Macrolide (±)-Pyrenophorin. *Journal of the Brazilian Chemical Society*. v. 29, p. 74-78, 2017.

² NGUTA, J. M.; et al. Biological screening of Kenyan medicinal plants using *Artemia Salina L.* (Artemiidae). *Pharmacologyonline*, v. 14, n.2, p. 358-361, 2012.

Área: ORG

(Inserir a sigla da seção científica para qual o resumo será submetido. Ex: ORG, BEA, CAT)

Inscrição: 00019

(Inserir o número de inscrição do autor que fez a submissão)

Preparation of β -cyclodextrin thio-derivatives and synthesis of gold and silver nanoparticles

Viviane Costa Souza (PG)^{1,2} e Mauricio Moraes Victor (PQ)^{*1,2}.

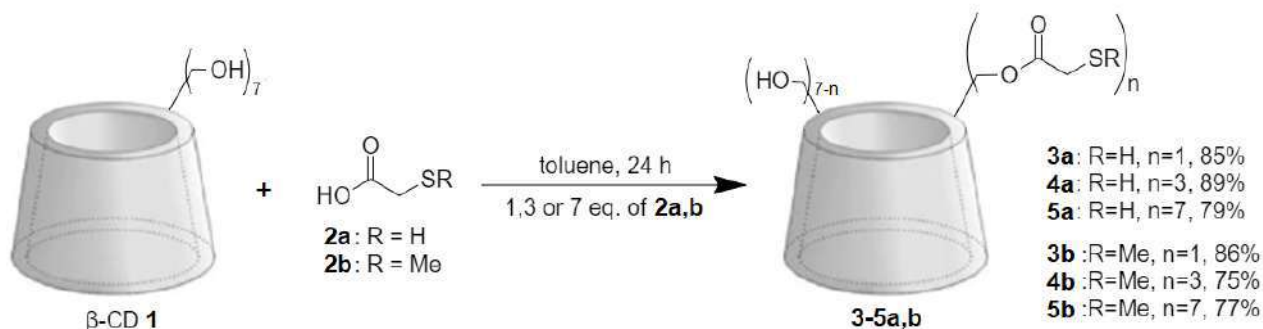
mmvictor@ufba.br; vivi.costa.s@hotmail.com

¹ Organic Chemistry Department, Chemistry Institute, Federal University of Bahia, UFBA, CEP 40170-290, ² National Institute of Science and Technology of Energy and Environmental, UFBA.Keywords: β -cyclodextrin, thioglycolic acid, esterification, gold nanoparticles, silver nanoparticles, cluster.

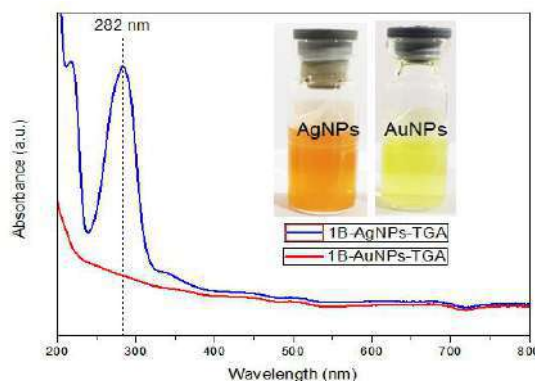
Highlights

The modification of β -cyclodextrin (β -CD, **1**) with thiol- and methylthio acids (**2a** and **2b**) shows stable colloidal systems of gold and silver nanoparticles with the potential to incorporate drugs.

Resumo/Abstract

The synthesis of modified β -CD **3-5a,b** by esterification with the thioglycolic and methylthioglycolic acids (**2a** and **2b**, respectively) were obtained in a single route without the addition of catalysts in a single step¹. The β -CD derivatives were synthesized with β -CD **1** and different molar ratios (1, 3 or 7 equivalents) of thiol or methylthio acids, furnishing **3-5a** in 85, 87 and 79% yields, respectively, and in 86, 75 and 77% yields (**3-5b**, respectively) for the alkylated thioderivatives (Scheme 1).**Scheme 1:** syntheses of **3-5a,b** modified β -CD's with thioglycolic **2a** and methylthioglycolic **2b** acids.

The derivatives were characterized by FTIR, TG, XRD and elemental analysis of sulfur. Colloidal systems of gold and silver nanoparticles (AgNPs and AuNPs)² were synthesized with β -CD derivatives. The preliminary results were satisfactory and with different characteristics among the type of system used, such as solution color and plasmon resonance band, showing that the modification of the type of sulfur compound used as well as its stoichiometric ratio have direct influence on the size and in the forms of the nanoparticles (Figure 1), indicating the presence of clusters in nanoscale (between 10 and 2 nm).

**Figure 1:** UV-Vis spectrum of gold and silver nanoparticles obtained with modified β -CD.

References

- Bourgeat-Lami, E.; Guyot, A.; *Colloid Polym. Science*, **1997**, 275, 716-729.
- Cutrone, G.; Casas, S.; Juan, M.; Vargas, E. A.; *Int. J. Pharm*, **2017**, 531, 621-639.

Área: QPN

Inscrição: 020

***In vitro* synergistic evaluation of association of fractions produced from *Bixa orellana* on human tumor cells**

Pedro M.B. Abreu (IC)¹, Rosanna T. Basting (PG)², Ana L.T.G.Ruiz (PQ)¹, Paulo Carvalho(PQ)³, João E. Carvalho(PQ)¹, Mary A. Foglio (PQ)^{1*}

foglioma@unicamp.br

¹Faculty of Pharmaceutical Science, FCF; ²Faculty of Medical Science phenotype resistant to multiple drugs; ³Institute of Food Technology (ITAL)

Key words: *Bixa orellana*, cytotoxicity, cancer, antiproliferative activity, synergy

Highlights

In vitro synergistic evaluation of association of fractions produced from *Bixa orellana* on human tumor cells. Herein the activity of association of *B.orellana* fractions on cell viability of cancer strains is reported.

Resumo/Abstract

Annatto (*Bixa orellana* L.) seeds are known mainly for the production of natural dyes for the food industry. However, they have been used in traditional medicine as anti-inflammatory, hypotensive, antibiotic, among other activities. These properties are attributed to compounds such as geranylgeranyl, a diterpene used successfully in the prophylaxis of various types of cancer and tocotrienols, natural forms of vitamin E with intense antioxidant activity found in the seeds. The purpose of this study was to assess the synergistic effect among fractions produced from *Bixa orellana* by molecular distillation. Cancer cell lines : U251 (glioma), MCF-7 (breast), NCI-ADR/RES (ovarium phenotype resistant to multiple drugs), 786-0 (kidney), NCI-H460 (lung), PC-3 (prostate), HT-29 (cólon), K562 (leukemia) and non-tumor human cells: HaCaT (queratinócite).

Table 1: Total Growth Inhibition (TGI) values of fractions and their associations obtained on cell viability test after 24hours of cell growth compared to doxorubicin:

| | TGI (µg/mL) | | | | | | | |
|------------|----------------------------|-------|--------|--------|-------|--------|--------|--------|
| | Doxorrubicina [#] | UB | U1 | U2 | U3 | U1+U2 | U1+U3 | U2+U3 |
| 2* | 2,58 | 18,81 | 34,33 | 213,68 | 81,80 | 109,09 | 45,04 | 178,92 |
| m* | 1,47 | 10,60 | 83,88 | 166,66 | 77,68 | 80,25 | 52,45 | 46,22 |
| a* | 2,35 | 5,93 | 43,01 | 204,50 | 88,30 | 72,02 | 96,45 | 88,67 |
| 7* | 1,41 | 25,85 | 43,86 | 173,98 | 72,42 | 59,42 | 66,85 | 78,87 |
| 4* | 0,34 | 15,35 | 110,67 | >250 | 83,25 | 127,18 | 78,75 | 67,07 |
| P* | 1,93 | 9,02 | 58,00 | 166,05 | 61,61 | 69,62 | 37,11 | 49,18 |
| h* | 0,62 | 11,44 | 82,78 | 159,12 | 88,43 | 120,01 | 58,634 | 80,43 |
| k* | 2,70 | 6,48 | 33,64 | 75,63 | 40,80 | 36,20 | 86,59 | 126,61 |
| q** | 0,29 | 10,85 | 66,81 | >250 | 72,33 | 44,94 | 63,29 | 85,37 |

* 2 = U251 (glioma), m = MCF-7 (breast); a = NCI-ADR/RES (phenotype resistant to multiple drugs); 7 = 786-0 (kidney); 4 = NCI-H460 (lung); p = PC-3 (próstata); h = HT-29 (cólon); k = K562 (leukemia).

** Non-tumor human cells: q = HaCaT (queratinócite).#Doxorrubicine (positive control).

Acknowledgements FAPESP, CNPq, and CAPES

Hydrosilylation with Platinum Catalysts: influence of auxiliary ligands in Chalk-Harrod mechanism

William Silva Fernandes (PG),^{1*} Thiago Messias Cardozo (PQ),¹

fernandeswill31@gmail.com; thiago.dfq@gmail.com

¹Departamento de Físico-Química, Instituto de Química – UFRJ.

Palavras Chave: *hydrosilylation, platinum, chalk-harrod mechanism, organometallics, DFT.*

Highlights

This theoretical work shows trends between different auxiliary ligands in hydrosilylation reaction catalysed by platinum complexes that could help in better understand of the Chalk-Harrod mechanism.

Resumo/Abstract

Hydrosilylation is an industrial process for producing organofunctional silanes and silicones, and is one of the most important process in the silicon industry. The reaction is an addition of silicon hydride (silane) to an unsaturated bond, forming the organosilane compound, through organometallic platinum catalysts. The first catalyst found for this purpose was hexachloroplatinic acid, known as the Speier catalyst, followed by the Karstedt catalyst. Karstedt catalyst has better activity and selectivity than Speier's, but both are deactivated by formation of colloidal platinum, a very serious economic problem for the industry. Therefore, there is much interest in finding alternative ligands in order to surpass colloidal platinum formation and keep the Karstedt catalyst activity, or overcome it¹. The Chalk-Harrod mechanism is the most accepted to explain the catalyzed reaction of hydrosilylation, being based on elementary steps common in organometallic chemistry, but there are still some questions regarding some of its steps².

In this work, a theoretical study of the Chalk-Harrod mechanism was carried out, using the Karstedt catalyst with two carbenes, two silylenes and diethylsulfide as auxiliary ligands (Fig 1). The structures of the reaction intermediates and possible transition states were obtained with the DFT method with LACV3P**++ basis functions and the M06-2X functional, in order to determine the influence of the ligands on the stabilization of intermediates and transition states. Enthalpy and Gibbs free energy variation of all reactional steps were also calculated.

The study shows that the silylene ligand DSi helps the stabilization of the Karstedt catalyst due to its great σ -donor and π -acceptor properties and that the sulfide ligand S is the worst, since it binds weakly to the Karstedt catalysts and leads to large energy variations in some steps of the mechanism.



Fig 1. Auxiliary ligands: carbenes (NHC D, NHC S) sulfide (S) and silylenes (NHSi D, DSi).

1 - TROEGEL, D.; STOHRER, J. Coordination Chemistry Reviews, v. 255, n. 13–14, p. 1440–1459, jul. 2011.

2 - MEISTER, T. K. et al. ACS Catalysis, v. 6, n. 2, p. 1274–1284, 2016

Agradecimentos/Acknowledgments

The authors acknowledge to CNPq, CAPES and PGQu/IQ-UFRJ.

On the Mechanism of Eosin Y Catalyzed Diastereoselective [2+2] Cycloadditions of Erlenmeyer Azlactones: a Theoretical Investigation

Pedro P. de Castro (PG),¹ Isabella F. S. Marra (PG),¹ Angelina M. de Almeida (PQ),¹ Larissa P. Silva (IC),¹ Giovanni W. Amarante (PQ).^{1*}

pedro_possa@hotmail.com; giovanni.amarante@ufjf.edu.br

¹Departamento de Química, Universidade Federal de Juiz de Fora, Juiz de Fora – MG.

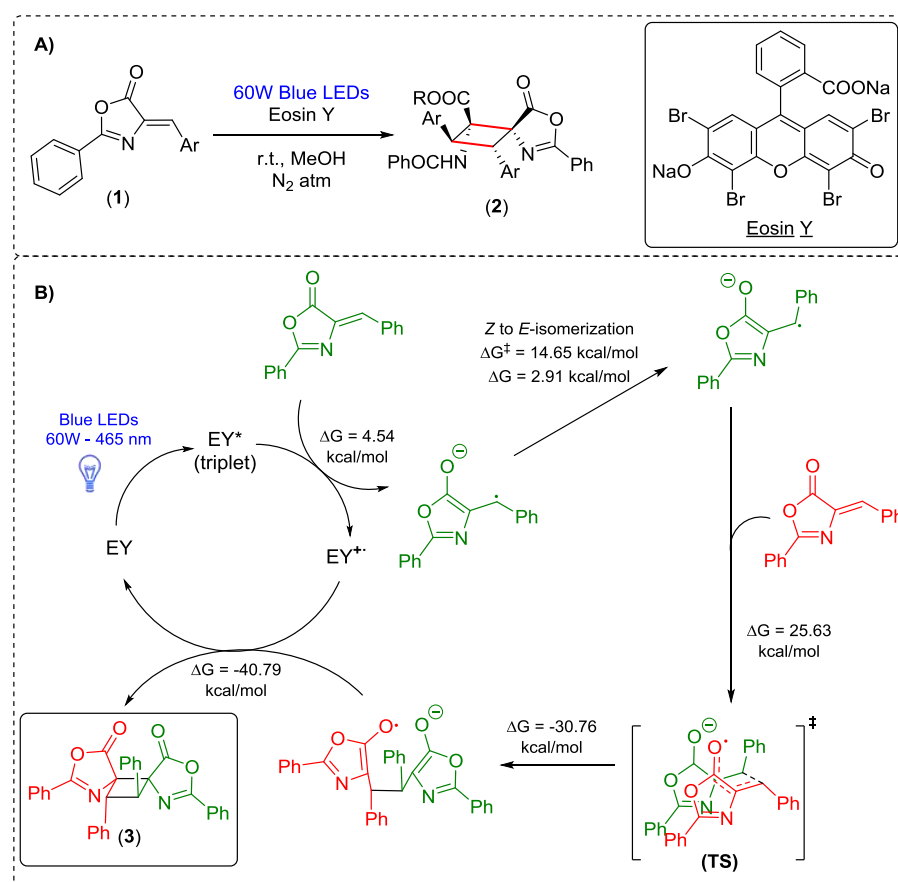
Palavras Chave: Erlenmeyer Azlactone, [2 + 2]-Cycloaddition, Photoredox Catalysis, DFT.

Highlights

The diastereoselective photocatalyzed formation of diaminotruxinic derivatives through a [2+2]-cycloaddition of Erlenmeyer azlactones was investigated. The reaction proceeds through a neutral photocatalytic pathway.

Abstract

Scheme 1. A) Diaminotruxinic derivative preparation; B) Proposed catalytic cycle for the formation of diaminotruxinic derivative.



Our group recently described that Erlenmeyer azlactones (1) in the presence of Eosin Y catalyst and blue light LED affords diaminotruxinic derivatives (2) with high regio and diastereocontrol through a intermolecular [2+2]-cycloaddition reaction (Scheme 1A).¹ Aiming new insights regarding the reaction mechanism and towards the stereospecificity of this transformation, we decided to carry out a theoretical study of the formation of the key intermediate 3.

The calculations were performed employing DFT or TD-DFT and the M06-2X-D3/6-31++G(d,p)//M06-2X/6-31G(d,p) level of theory.

The triplet excited state of eosin is compatible with the blue light energy. It can then proceed through three possible pathways: receive or donate an electron to a Z-azlactone (photoredox catalysis) or, if triplet states energy is close enough, only

energy transfer might occur. The latter is not probable, since the Z-azlactone* (triplet) requires 7.25 kcal/mol more energy than released by the return of eosin to ground state. Moreover, considering electron transfer, Z-azlactone*/eosin* formation is favored over Z-azlactone*/eosin* (ΔG of 4.54 kcal/mol against 18.86 kcal/mol). Thus, the reaction follows with an isomerization of the radical anion, reaction with another neutral Z-azlactone and ring-closure (Scheme 1B).

Aiming to explain the stereoselectivity, the formation of all six possible head-to-head diastereomers was evaluated. Only the coupling of E-E and Z-E-azlactones is thermodynamically favored (-2.9 to -7.8 kcal/mol) and, since no neutral E-azlactone is available during the reaction, the E-E coupling is unlikely to occur. Furthermore, the anti coupling is favored to syn addition (anti = -5.12 to -7.8 kcal/mol; syn = -2.9 to -3.6 kcal/mol); we propose in this step the configuration of the product is determined and that the sum of these observations makes the formation of 1,2-Z,E-anti diastereomer the most probable to occur.

Acknowledgements: CAPES (Finance Code 001), FAPEMIG and CNPq for financial support.

References: ¹ *J. Org. Chem.* 2018, 83, 15144–15154.

Área: FISNº de Inscrição: 0024**Equilibrium parameters of indigotine to *Lagenaria* spp. biomass**Stephany Baumer Franceschini (IC),¹ Clésia Fabian (IC),¹ Keller Paulo Nicolini (PQ),¹ Jaqueline Nicolini (PQ).^{1*}jaqueline.nicolini@ifpr.edu.br

Lacoppi – Laboratório de Corantes e Processos Pirolíticos. Dep. de Química, Instituto Federal do Paraná – IFPR, Avenida Bento Munhoz da Rocha Neto, s/n, CEP 85555-000 – Palmas – PR.

Keywords: indigotine, equilibrium parameters, *Lagenaria* spp.**Highlights**

The results indicate $0 < R_L < 1$ (favorable sorption) and $\Delta G^0 > 0$ (not spontaneous)
 LAG is able to separate indigotine from methylene blue selectively
 LAG has low chemical affinity with anionic dyes

Abstract

Sorbents able to minimize environmental impacts are important to the scientific community, and studies from our research group and the literature indicate that *Lagenaria* spp. (LAG) is an efficient biosorbent for blue methylene in water.^{1,2} This work aims to study the equilibrium parameters of the indigotine on *Lagenaria* spp. biomass. LAG biomass was micronize in particle size $\leq 150 \mu\text{m}$. The tests were performed in batch, consisting of the use of 0.15 g of biomass in 20 mL of aqueous solution containing indigotine. The sorption tests were carried out in thermostatic bath with periodic stirring until equilibration (25 min) at temperatures of 25, 40 and 55 °C in 9 concentrations (between 5.07×10^{-6} and $2.17 \times 10^{-5} \text{ mol L}^{-1}$). The Langmuir and Freundlich isotherms fitted to temperature of 25 °C, indicating that temperatures higher than 25 °C do not contribute to the indigotine sorption process to LAG. The equilibrium parameters (**Table 1**) indicate that the better fit is to the Langmuir isotherm. This isotherm is applicable to the homogeneous sorption in monolayer, where the sorption of each molecule of sorbate on the surface has equal sorption activation energy.³ It is observed that monolayer sorption is favorable⁴ ($0 < R_L < 1$), however the process occurs in favor of the Gibbs free energy reagents⁵ of 8.95 kJ mol^{-1} ($\Delta G^0 > 0$) ($\Delta G^0 = -RT \ln K_{eq}$) indicating the non-spontaneity of the system with $q_{e,max} = 1.49 \times 10^{-8} \text{ mol g}^{-1}$. These results indicate that LAG in natura has low affinity with anionic dyes such as indigotine. LAG is a "green sorbent" efficient to separate selectively indigotine of methylene blue. Studies of our group have shown that in environmental monitoring, in soil amended with indigotin, have the same seed germination rate as *Ocimum* sp. relative to the control, being equal to 62%.

Table 1. Equilibrium parameters for sorption of indigotine to *Lagenaria* spp. at 25 °C

| Isotherm | | | | | |
|-------------------------|--------------------------------------|---------------------------------------|---------------------------------------|--------------------------------------|-------|
| ^g Langmuir | ^a $K_L (\text{L g}^{-1})$ | ^b $a_L (\text{L mg}^{-1})$ | ^c $Q_o (\text{mg g}^{-1})$ | ^d $R_L (\text{L g}^{-1})$ | R^2 |
| | 4.78×10^{-3} | 2.41×10^5 | 5.05×10^1 | 0.161 | 0.605 |
| ^h Freundlich | ^e $K_F (\text{L g}^{-1})$ | ^f b_F | R^2 | | |
| | 2.83×10^{-7} | 3.80 | 0.472 | | |

^a K_L : equilibrium constant of Langmuir related to sorption or sorbate; ^b a_L : Langmuir constant related to adsorption energy. ^c $Q_o = a_L/K_L$. ^d $R_L = (1/1+a_L \cdot C_o)$. ^e K_F : Freundlich's constant; ^f b_F : empirical constant of the Freundlich isotherm. ^g $q_e = (K_L C_e)/(1+a_L C_e)$. ^h $q_e = K_F C_e^{b_F}$.

¹ Bojic, et al., *Desalin. Water Treat.* **2013**, 51, 6871.² Franceschini, et al, *Resumos do XXV Encontro de Química da Região Sul*, Londrina, **2018**.³ Azizian, S, Eris, S, Wilson, L.D. *Chem. Phys.* **2018**, 513, 99.⁴ Choi Y-S, Cho J-H. *Environ. Technol.*, **1996**; 17, 1169.⁵ Davis, T.A., Volesky, B., Mucci, A. *Water Res.*, **2003**, 37, 4311.**Acknowledgments**

LACOPPI, IFPR, PIBIC/CNPQ, PIBIC-Jr/CNPQ, CNPq.

Properties of PLA polymers produced by heterogeneous catalytic polycondensation of D,L-lactic acid

Mateus F. Paiva^{1*} (IC), Juliene O. C. de França¹ (PG), Liana S. Chafran¹ (PQ), Maria José A. Sales¹ (PQ), Sílvia C. L. Dias¹ (PQ) and José A. Dias¹ (PQ)

freitas-paiva@hotmail.com

¹Universidade de Brasília, Campus Darcy Ribeiro - Asa Norte, Instituto de Química, Laboratório de Catálise (A1-62/21), Brasília-DF, 70910-900, Brazil.

Keywords: Supported heteropolyacid, Blends of poly(lactic acid), Thermodynamic and physical properties.

Highlights

Supported HPW on carbon, silica and alumina were active catalysts in the synthesis of PLA; The nature of blends formed was determined and important thermodynamic and physical properties were obtained.

Abstract

Poly(lactic acid) (PLA) is a significant polymer that is based on renewable biomass resources. Production of PLA by polycondensation using heterogeneous catalysis is on the focus for sustainable and economical processes [1]. A series of samples comprising supported 12-tungstophosphoric acid (HPW) on activated carbon, silica and alumina were prepared, characterized and induced catalytic polymerization of D,L-lactic acid to form blends of PLA. The nature of the polymers formed was explored by multiple techniques. DSC curves (Figure 1) suggest first-order transitions, exhibiting two fusion peaks (i.e., one associated with the PDLA chains and the other associated with PLLA; $T_m \geq 138$ °C). Notably, the presence of only a second-order transition related to the glass-transition temperature (T_g) denotes that the blends formed are miscible and ordered, which agrees with the literature [2,3]. The data for the formed polymers and the related enthalpies (ΔH_c and ΔH_m) are listed in Table 1. It is also demonstrated, by GPC results, the role of HPW in these polymerizations, so that without the Keggin acid, only oligomeric units ($M_w < 10,000$ Daltons) could be obtained.

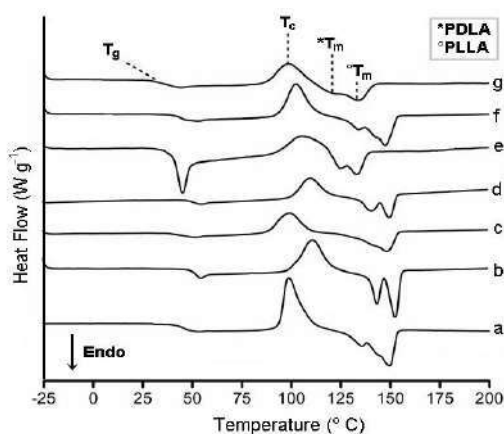


Figure 1. DSC curves of PLA polymers obtained by polycondensation with: **a** HPW, **b** SiO₂ (Si), **c** Al₂O₃ (Al), **d** Carbon (C), **e** 20PW/Si, **f** 20PW/Al, **g** 20PW/C.

Table 1. Thermodynamic parameters and relative average molar mass of the polymers from each process using pure solids and heterogeneous supported catalysts.

| Polymer from | T_g (°C) | T_c (°C) | ΔH_c (J g ⁻¹) | PDLA | | PLLA | | M_w (g mol ⁻¹) |
|--------------------------------|------------|------------|-----------------------------------|------------|-----------------------------------|------------|-----------------------------------|------------------------------|
| | | | | T_m (°C) | ΔH_m (J g ⁻¹) | T_m (°C) | ΔH_m (J g ⁻¹) | |
| HPW | 47 | 100 | -32 | 135 | - | 148 | 31 | 9988 |
| SiO ₂ | 55 | 111 | -33 | 144 | 8 | 153 | 14 | 8350 |
| Al ₂ O ₃ | 52 | 100 | -25 | - | - | 149 | 22 | 7709 |
| C | 58 | 110 | -34 | 135 | 8 | 150 | 13 | 9672 |
| 20PW/Si | 45 | 106 | -8 | 125 | - | 138 | 5 | 14573 |
| 20PW/Al | 53 | 103 | -29 | 134 | 0,9 | 148 | 14 | 14827 |
| 20PW/C | 30 | 84 | -15 | 120 | 1,2 | 138 | 12 | 15189 |

(-) Represents points where the thermodynamic parameters (T_m or ΔH_m) were attributed to a single PLA specie, since in the method used, its contribution was the majority.

[1] Dusselier, M., *et al. Energy Environ. Sci.*, **2013**, 6, 1415-1442.

[2] Garlotta, D.; *J. Polym. Environ.*, **2001**, 9, 63–84.

[3] Sarasua, J. R. *et al. Macromolecules*, **1998**, 31, 3895-3905.

Acknowledgments

CNPq, CAPES, UnB/DPI/IQ, CAPES, MCTIC, FAPDF, FINATEC, FINEP/CTPetro/CTInfra, and Petrobras.

42ª Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química: Eixos Mobilizadores em Química

Interaction Studies of the Recreational Drugs 25I-NBOH and 25I-NBOMe with Human Serum Albumin (HSA): A Spectroscopic Approach

Wellington A. de Barros (PG),^{1*} Grazielle M. Borges (IC),¹ Marcelo P. Queiroz (IC),¹ Leonardo da S. Neto (PQ),¹ Josué C. C. Santos (PQ),² Isis M. Figueiredo (PQ),² Ângelo de Fátima (PQ).^{1*}

adefatima@qui.ufmg.br; wellington.wab@gmail.com

¹Chemistry Department, UFMG, Brazil; ²Institute of Chemistry and Biotechnology, UFAL, Brazil.

Keywords: Recreational drugs, phenethylamines, 25I-NBOH, 25I-NBOMe, spectroscopic studies.

Highlights

◆ There are few studies relating to the interaction of HSA with recreational drugs. ◆ Our studies showed that 25I-NBOH and 25I-NBOMe bind to of HSA by stablishing hydrogen bonds with the -NH- group.

Abstract

Human Serum Albumin (HSA) binds to a range of drugs, limiting their free/active concentrations and/or altering their bioavailability/activity.¹ Notably, no studies focusing on the interaction between HSA and the recreational drugs² 25I-NBOH (**1**) and 25I-NBOMe (**2**) are reported so far. Therefore, we have used spectroscopic techniques to investigate³ the extent of such interactions. Hydrogen bonds- and Van der Waals forces-driven⁴ static quenching was observed by molecular fluorescence and UV-vis, with moderate binding constant (K_b) (**1**: $K_b = 1.55 \times 10^4 \text{ M}^{-1}$; $\Delta H = -67.99 \text{ kJ.mol}^{-1}$; $\Delta S = -148.16 \text{ J.K}^{-1}.\text{mol}^{-1}$; $\Delta G = -23.10 \text{ kJ.mol}^{-1}$; **2**: $K_b = 4.32 \times 10^4 \text{ M}^{-1}$; $\Delta H = -45.21 \text{ kJ.mol}^{-1}$; $\Delta S = -66.84 \text{ J.K}^{-1}.\text{mol}^{-1}$; $\Delta G = -24.96 \text{ kJ.mol}^{-1}$). The variation of ionic strength not influence the interaction process, however, **2** alters the surface hydrophobicity of HSA. The quenching process for Trp and Tyr residues was monitored individually by synchronized fluorescence, in which higher K_{SV} was recorded for Trp with red shift of 2 nm, indicating a change in the polarity of the microenvironment of this amino acid residue. Additionally, 3D fluorescence and circular dichroism evidenced structural changes in the HSA polypeptide chain in the presence of **1** or **2**. The use of warfarin and dansylglycine showed that **1** and **2** to bind HSA in both sites, I and II. ¹H NMR studies revealed that the alkyl units bound to the -NH- interact preferably with HSA resulted in chemical shifts and greater displacements for the hydrogen in the alkyl units (Fig.1).

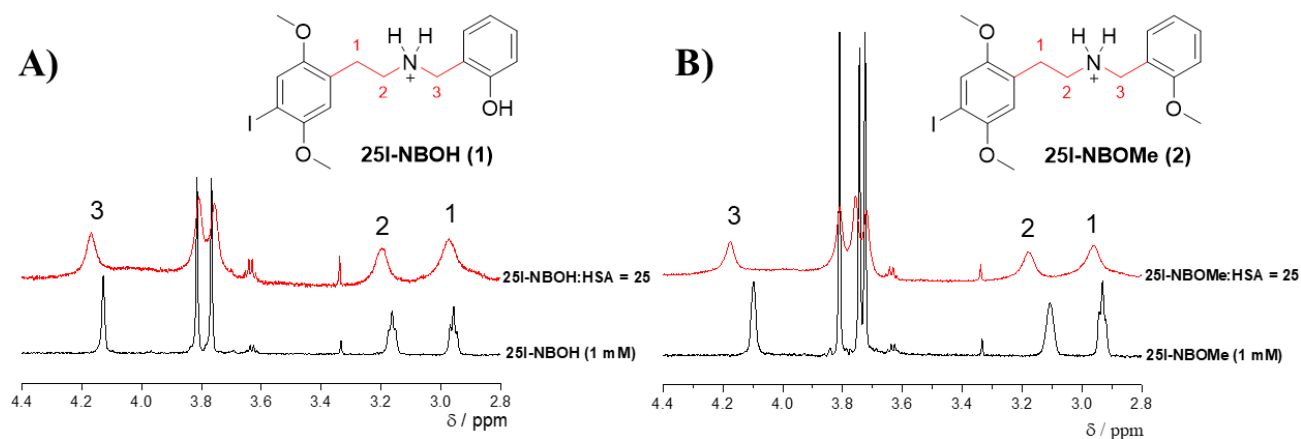


Fig. 1. ¹H NMR spectrum (600 MHz, phosphate buffer pH 7.4 in D₂O) para A) ● 25I-NBOH (**1**) (1 mM), ● 25I-NBOH (1 mM) + HSA (40 μM) B) ● 25I-NBOMe (**2**) (1 mM), ● 25I-NBOMe (1 mM) + HSA (40 μM).

References and notes: [1] M.M. Silva *et al.*, *J Photochem Photobiol B*, **2018**, 165-175. [2] **Recreational drugs** are illegal drugs used without medical reason to induce an altered state of consciousness for pleasure, by modifying the perceptions, feelings, and emotions of the user. [3] This study was financed in part by the CNPq, CAPES, FAPEMIG and FAPAL. [4] P.D. Ross & S. Subramanian, *Biochemistry*, **1981**, 20, 3096-3102.

MCM-22 zeolite using biogenic silica from an agro-industrial waste – Synthesis and adsorption properties

Jaine F. Gomes (IC), Anderson J. Schwanke (PQ), José R. Gregório (PQ), Katia Bernardo-Gusmão (PQ).

katiabq@iq.ufrgs.br; jaine_f_gomes@hotmail.com

Instituto de Química, UFRGS

Keywords: MCM-22, Zeolite, MWW, Biogenic Silica, Rice-Husk Ash.

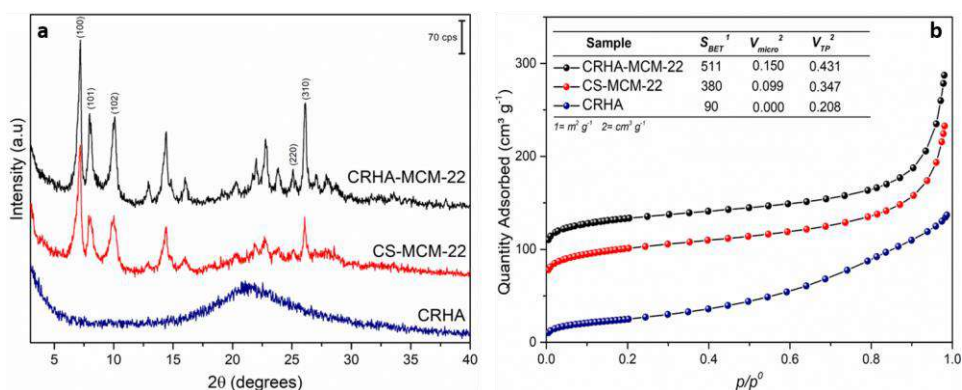
Highlights

Biogenic silica from calcined rice-husk ash (CRHA) was used for synthesis of MCM-22. The obtained material showed specific surface area of $511 \text{ m}^2 \text{ g}^{-1}$. After 1 min, the zeolite showed 40.8% efficiency for the adsorption of 4 ppm of an aqueous solution of methylene blue.

Abstract

Zeolites are microporous crystalline materials widely used as catalysts, ion exchangers, and adsorbents. However, the usual sources of silica employed for their synthesis have a high cost, require several purification treatments, and generate many residues. Thus, several efforts have been made to obtain zeolites using environmentally benign reactants. Rice husk (RH) is an abundant agricultural waste used as fuel in thermoelectric plants to produce heat or power. With the combustion of RH another residue was produced, the rice-husk ash (RHA), containing about 65 - 97% of silica. Here, we described the synthesis of MCM-22 zeolite using calcined rice-husk ash (CRHA) at $600 \text{ }^\circ\text{C}$ without any additional treatment. The obtained material was compared with a traditional MCM-22 zeolite synthesized with commercial fumed silica. The synthesis was done at $135 \text{ }^\circ\text{C}$ for a period of 7 days, with rotating autoclaves, using the following molar composition of gel: $1 \text{ SiO}_2 : 0.024 \text{ NaAlO}_2 : 0.521 \text{ HMI} : 0.097 \text{ NaOH} : 46.707 \text{ H}_2\text{O}$. The obtained materials were calcined at $580 \text{ }^\circ\text{C}$ for 12 hours.

Fig. 1a shows the XRD analysis of the calcined rice-husk ash (CRHA), and MCM-22 zeolite with commercial silica (CS-MCM-22) and with rice-husk (CRHA-MCM-22). A large reflection is observed between $2\theta = 15 - 30^\circ$ for CRHA, which is characteristic of an amorphous material. Both the CRHA-MCM-22



zeolite precursor and CS-MCM-22 showed characteristic planes of the MWW topology. Nitrogen adsorption isotherms in Fig.1b showed type I isotherms characteristic of microporous materials for both MCM-22 zeolites. In addition, textural analysis showed S_{BET} of $511 \text{ m}^2 \text{ g}^{-1}$ for CRHA-MCM-22 and $380 \text{ m}^2 \text{ g}^{-1}$ for the CS-MCM-22 zeolite. The difference between S_{BET} values may be related with presence of divalent (Mg^{2+} , Ca^{2+}) and trivalent (Fe^{3+}) charge-compensating cations in CRHA-MCM-22, two or three times the Na^+ content being necessary in each case. This can be associated to the increase of accessibility of the microporous network when compared with monovalent (Na^+) compensating cation present in CS-MCM-22. Indeed, atomic absorption spectroscopy (AAS) analyses confirmed that these three cations (Mg^{2+} , Ca^{2+} , Fe^{3+}) were present in both CRHA and CRHA-MCM-22 samples. Methylene-blue adsorption tests were performed with a 4 ppm solution, using 20 mg of solid, under stirring, with resulting adsorption efficiencies of 40.8% for RHCA-MCM-22, 30.4% for CS-MCM-22, and 20.5% for RHCA, after 1 minute. In conclusion, it was possible to obtain MCM-22 zeolite with good crystallinity and high specific surface area using an agro-industrial waste.

Acknowledgments

We acknowledge support from CAPES, CNPQ and PPGQ-UFRGS.

42ª Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química: Eixos Mobilizadores em Química

Área: EDU

(Inserir a sigla da seção científica para qual o resumo será submetido. Ex: ORG, BEA, CAT)

Nº de Inscrição: 00029

(Inserir o número de inscrição do autor que fez a submissão)

Lise Meitner e a fissão nuclear: buscando caminhos para a reflexão do papel da mulher na ciência

Denise Leal de Castro (PQ),¹ Lucas Peres Guimarães (FM)²

denise.castro@ifrj.edu.br; lucaspegui@hotmail.com

¹Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia do Rio de Janeiro – Campus Nilópolis; ²Colégio Nossa Senhora do Amparo – Barra Mansa

Palavras Chave: *Mulheres na Ciência, Ensino de Química, História da Química.*

Highlights

Lise Meitner and nuclear fission: seeking ways to reflection on the role of women in science

The work aims to investigate the students' ideas about scientists and how to relate to women with science. We emphasize the importance of breaking the stereotype of a scientist, and competence of chemical education to develop understanding of pupils and students.

Resumo/Abstract

Um das funções que o Ensino de Química deve desempenhar na Educação Básica é mostrar ao aluno a necessidade da equidade social da mulher e a importância de dar visibilidade à atividade científica feminina, o trabalho aqui desenvolvido tem como proposta investigar as ideias dos alunos a respeito de cientistas e como relacionam a mulher com a ciência. A História da Química no Ensino foi inserida através do episódio histórico referente a cientista Lise Meitner e toda sua trajetória envolvendo a fissão nuclear. Utilizou-se uma metodologia qualitativa e observação participante. A coleta de dados foi através de diário de bordo e questionários, e a análise interpretativa. Inicialmente, os alunos escreveram no papel o nome de cientistas homens de um lado e de mulheres do outro. Em ato contínuo, os alunos se manifestaram prontamente que eles não sabiam quase nenhum nome de uma cientista mulher, uma vez que aprendem na escola leis científicas de diversos cientistas, mas nunca ouviram falar de uma mulher cientista que “inventou” uma lei. Ao fim da discussão os alunos relataram a necessidade de os professores reforçarem em suas aulas o papel de cientistas mulheres na ciência, e eles mesmos pesquisarem mais sobre elas. Em seguida, foi passado o trecho do filme: “A Grande Ideia de Einstein: $E=mc^2$ ”, onde existe um trecho que relata com propriedade Lise Meitner e suas dificuldades por ser judia e mulher, na ciência, em uma Alemanha preste a se tornar nazista. Após o filme, uma discussão coletiva com os alunos relativa a um trecho do filme e ao papel da mulher na ciência foi discutindo, contextualizando com todo o episódio histórico apresentado, após isso foi aplicado um questionário reforçando a relação com Otto Hann e a análise das atitudes da cientista frente as dificuldades impostas pelo nazismo. A investigação foi feita com uma turma de primeiro ano do Ensino Médio de uma escola particular do município de Barra Mansa (RJ). Concluímos que as alunas e os alunos investigados tinham uma visão distorcida dos cientistas, com ideia de uma ciência masculinizada, mas que a problematização do episódio histórico de Lise Meitner, e a descoberta da fissão nuclear proporcionou uma reflexão inicial dos estereótipos apresentados pelos estudantes. Destacamos a importância do rompimento do estereótipo de cientista, sendo competência de a educação química desenvolver a compreensão dos alunos e das alunas em relação à atividade científica.

¹ CINELAB: A Grande Ideia de Einstein: $E=mc^2$, disponível em: <https://m.youtube.com/watch?v=4mQFeeScAXM>. Acesso em: 06 fev. 2019.

Agradecimentos/Acknowledgments

Ao IFRJ pelo apoio à pesquisa.

Total synthesis of 3,4-dehydrofloridanolide *via* an oxidative strategy

Luiz F. T. Novaes (PG), Kevin Hung (PQ), Matthew L. Condakes (PQ), Thomas J. Maimone (PQ).*

luiznovaes@berkeley.edu; maimone@berkeley.edu

¹Department of Chemistry, University of California-Berkeley, 826 Latimer Hall, Berkeley CA 94720, United States
Total Synthesis, Terpene, Illicium, C-H Oxidation, Cedrol.

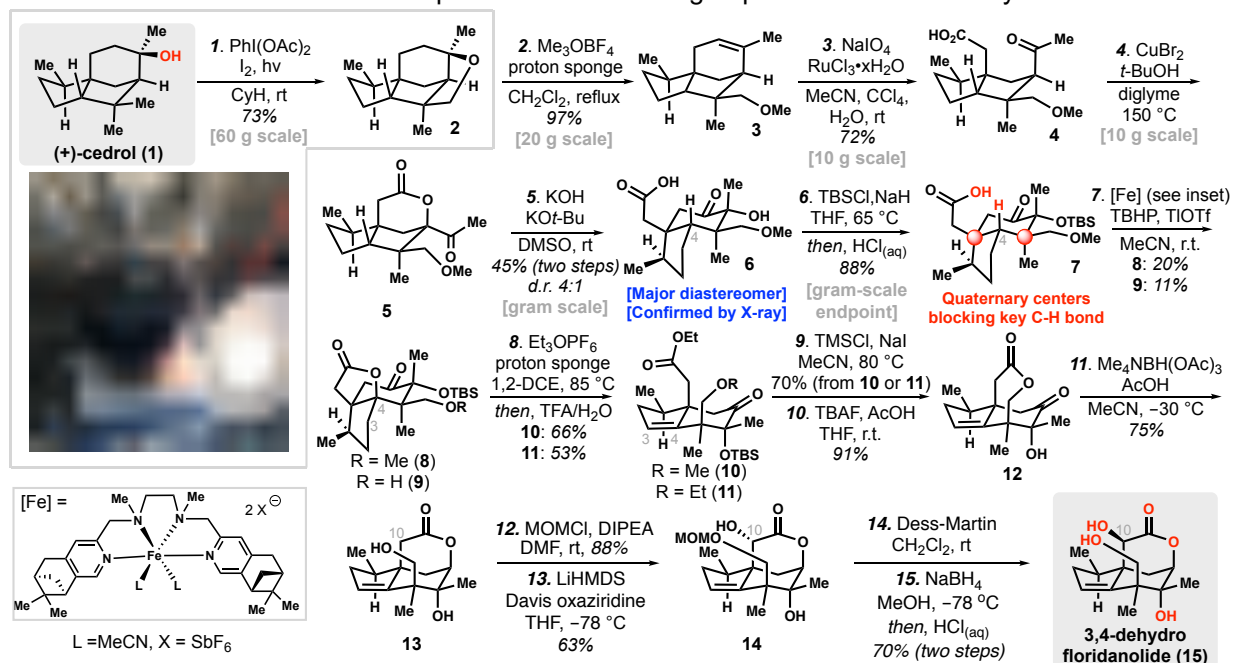
Highlights

Here, we describe a 15-step total synthesis of a complex sesquiterpene isolated from *Illicium sp.* Our approach utilizes cedrol as a cheap starting material and an orchestrated sequence of oxidations.

Abstract

Inspired by nature's ability to perform site-selective oxidations on hydrocarbon skeletons, several research groups have focused their efforts to develop new C-H oxidation methods, which has greatly impacted modern synthetic planning. Our group decided to use an oxidative approach as a general and efficient strategy to synthesize highly oxidized sesquiterpenes isolated from the *Illicium* genus. More than 100 molecules of this class have been isolated to date, and while some of these presented neurotoxic profiles, *via* inhibition of GABA_A receptor, several natural products proved to be neurotrophic, demonstrating potential for the treatment of neurodegenerative diseases, such as Alzheimer's and Parkinson's.¹

Here, we report a successful synthesis of 3,4-dehydrofloridanolide (**Scheme 1**).² To begin our synthesis, the cheap (~\$0.05 USD/g) and renewable terpene (+)-cedrol was subjected to a scalable Suárez reaction, followed by opening of the strained tetrahydrofuran **2** with Meerwein salt and base. Alkene **3** was cleaved with *in situ* prepared RuO₄, and ketone **4** was subsequently oxidized with CuBr₂, the presumed carbocation intermediate was intercepted by the pending carboxylic acid. The carbon backbone was then rearranged, *via* a hydrolysis and an α -ketol ring shift. In order to oxidize the challenging tertiary C-H at C4, tertiary alcohol **6** was protected and compound **7** was submitted to an iron-catalyzed lactonization, a method developed by White.³ The alkene between C3-C4 was installed after opening lactones **8** and **9** with Meerwein salt and base. Next, primary and tertiary alcohols were deprotected (TMSI *in situ* and TBAF), and a directed reduction of ketone **12** induced translactonization to δ -lactone **13**. After primary alcohol protection, C10 was oxidized with Davis oxaziridine. The correction of stereochemistry at C10 was performed with Dess-Martin oxidation and NaBH₄ reduction with acidic workup to cleave the MOM group and finish the total synthesis.



¹ M. L. Condakes, L. F. T. Novaes, T. J. Maimone, *J. Org. Chem.* **2018**, *83*, 14843. ² Steps 1-10 were previously explored by our group during (+)-pseudoanisatin and (-)-3-deoxy-pseudoanisatin syntheses, see: (a) K. Hung, M. L. Condakes, T. Morikawa, T. J. Maimone, *J. Am. Chem. Soc.* **2016**, *138*, 16616; (b) K. Hung, M. L. Condakes, L. F. T. Novaes, S. J. Harwood, T. Morikawa, Z. Yang, T. J. Maimone, *J. Am. Chem. Soc.* **2019**, *141*, 3083. ³ M. S. Chen, M. C. White, *Science* **2007**, *318*, 783.

[3,3]-Sigmatropic rearrangement of allylaryl ether followed by [3+2]-1,3-dipolar cycloaddition applied to the synthesis of liquid crystals.

Luma Fritsch (PG),¹ Richard J. Mandle (PQ),² Aloir A. Merlo (PQ).^{1*}

aloir.merlo@ufrgs.br

¹Instituto de Química, UFRGS, Brazil; ²Chemistry Department, University of York, UK.

Key words: Claisen rearrangement, [3+2]-1,3-dipolar cycloaddition, allylaryl ethers, liquid crystals, isoxazolines, isoxazoles.

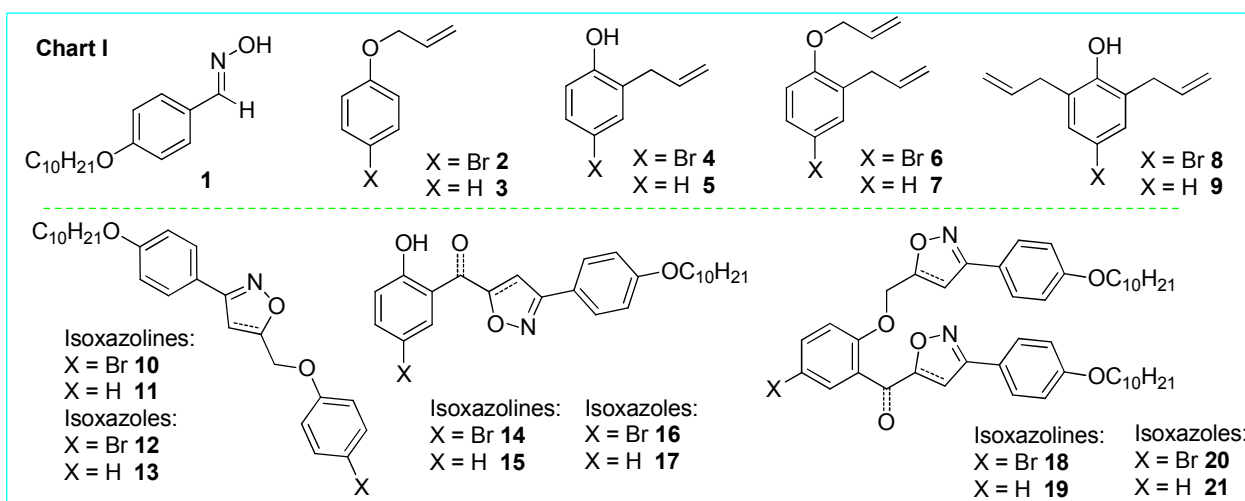
Highlights

[3,3]-Sigmatropic rearrangement of allylaryl ether was the key step to access the allyl derivatives **4-9** as dipolarophile precursors for [3+2]-1,3-dipolar cycloaddition to obtain new liquid crystals (LCs). Smectic A (SmA) and columnar mesophase (Col) were founded for some of them. Surprisingly, during the oxidation stage of isoxazoline **18-19** to isoxazole **20-21** by MnO₂, the oxidation of CH₂ group of disubstituted cycloadduct was concomitant and selectively oxidized to ketone group.

Resumo/Abstract

Chart I summarize the intermediates and final compounds **10-21** that have been prepared in this communication. Allylaryl ether **2** and **3** were submitted to Claisen rearrangement to afford products **4-9**. All rearranged products, included precursors **2** and **3**, were exposed to [3+2]-1,3-dipolar cycloaddition to yield final molecules **10-21**. Smectic A (SmA) mesophase was founded for **12** and **20**, whereas **19** displayed columnar mesophase that is under X-ray analyses. Thermal behavior for all the others rearranged products are under investigation.

Isoxazoline oxidation to isoxazole, by MnO₂, displayed a surprise concomitant oxidation of methylene group of the cycloadduct. Interestingly, the CH₂-oxidation is completely chemoselective as verified by the transformation of **18** to **20** and **19** to **21**. However, the oxidation process does not take place in **10** to **12** or **11** to **13**. Synthesis of cycloadducts from **8** and **9** are in progress.



[1] Merlo, Aloir Antonio. Reações Pericíclicas: Uma sinfonia de moléculas e elétrons. Porto Alegre, Ed. UFRGS. 2012.

Agradecimentos/Acknowledgments

This work was supported by MCT/CNPq Ed Universal 01/2016 no. 403075 2016-5, FAPERGS and PPGQ-UFRGS. This study was financed in part by the Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior – Brasil (CAPES) - Finance Code 001.

Identification of thiosemicarbazones with potential antiviral activity against Chikungunya Virus nsP2 protease

Isabela de Oliveira Estrela (IC)¹, Aline Casais Tavares (PG)², Danilo Santana Galvão (PG)², Silvio do Desterro Cunha (PQ)², Samuel Silva da Rocha Pita (PQ)¹,

Isabelaestrela012@gmail.com; samuelrpita@gmail.com

¹Laboratório de Bioinformática e Modelagem Molecular, Faculdade de Farmácia-UFBA; Ondina, CEP: 40170-115, - Salvador- BA- Brasil; ²Grupo de Pesquisa em Síntese Química e Bioatividade Molecular, Instituto de Química-UFBA, Ondina, CEP: 40170-115, - Salvador- BA- Brasil.

Keywords: Structure-Based Drug Design, Molecular Docking, Thiosemicarbazones, Chikungunya Virus.

Highlights

Chikungunya disease is caused by the chikungunya virus classified as a neglected disease. In the absence of effective treatments, non-structural proteins are potential targets for new inhibitors, especially nsP2. The thiosemicarbazones derivatives present several biological activities including antiviral properties which can be useful in Anti-CHIKV design.

Abstract

The Chikungunya virus (CHIKV) is a causative agent of Chikungunya fever (CHIKF) which is characterized by intense polyarthralgia that can last for weeks to years. CHIKF as well as other arboviruses, is observed in global re-emergence affecting Europe, USA, Southern Asia and Latin America. Unfortunately, there is any specific treatments and non-structural proteins of CHIKV (nsP1, nsP2, nsP3 and nsP4) are considered potential targets. Specifically, nsP2 is an attractive target due to its thiol protease activity which is essential for virus replication. The crystallographic structure of the nsP2 protease, available in *Protein Data Bank* (PDB ID: 3TRK) was employed at Autodock 4.2.6 calculations against a series of thiosemicarbazones. They were synthesized by multicomponent reaction, using ethanol as solvent agreeing with principles of Green Chemistry. The physicochemical, pharmacokinetic and toxicological properties of these derivatives were evaluated by pKCSM server. The 24 compounds agreed to the “rule of five” presenting good drug likeness properties which suggests the capability to be orally used in humans. They also obtained good intestinal absorption (IA <87,0%) and they did not demonstrate hepatotoxic potential, except **DG80**. The **MBZM-3-IBT** was tested before against CHIKV (Mishara et al., 2015) and so it was chosen as our reference compound. The best docking pose for **MBZM-3-IBT** had -7.36 kcal/mol of binding energy. For thiosemicarbazones derivatives, **DG99** presented the best binding energy (-7.61 kcal/mol). Analyzing their interactions, **MBZM-3-IBT** interacted with the following residues: Leu1205, Tyr1079 and Asn1082 (figure A). **DG99** interacted with Tyr1047, Tyr1079, Trp1084 and Asn1082 (figure B), exhibiting more and different interactions than the reference compound, which could justify its better energy. These results suggest that thiosemicarbazones can be useful as scaffold for Anti-CHIKV design.

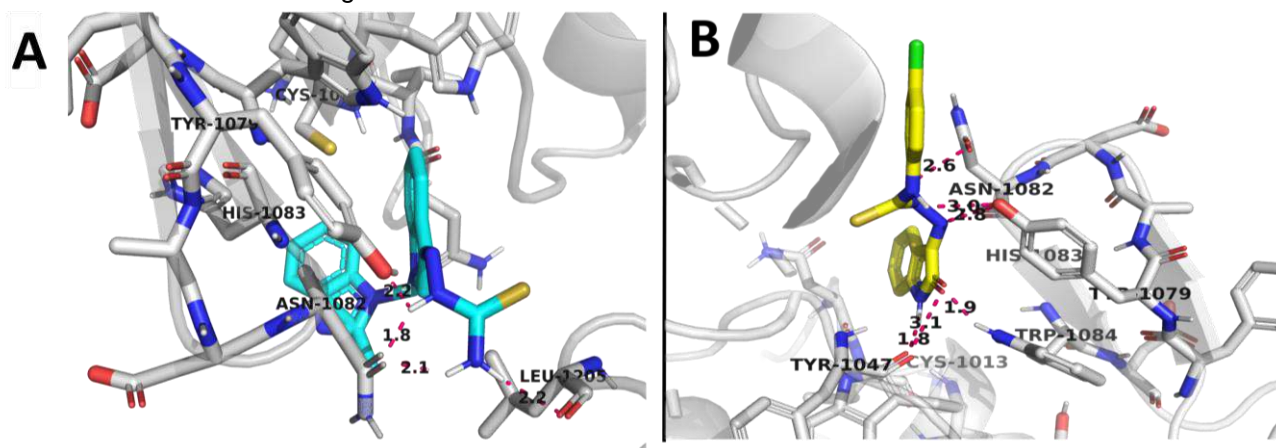


Figure 1: Main interactions at the proteolytic site of nsP2 (gray stick) and the catalytic residues (Cys1013 and His1083). **A)** MBZM-3-IBT (cyan) and **B)** DG99 (yellow).

Área: QPN

Nº de Inscrição: 00041

(Inserir o número de inscrição do autor que fez a submissão)

Chemotypification and circadian rhythm influence on the essential oil production from leaves of *Piper gaudichaudianum* Kunth (Piperaceae)

Ygor Jessé Ramos (PG)^{1,2}, Katherine Cervai Ribeiro (IC)³, Davyson de Lima Moreira (PQ)^{1,2,3}.

ygorjesse@gmail.com; davysonmoreira@hotmail.com

¹Pós-graduação em Biologia Vegetal – Universidade do Estado do Rio de Janeiro (UERJ), Rio de Janeiro, RJ;²Departamento de Produtos Naturais - Farmanguinhos – Fundação Oswaldo Cruz, Rio de Janeiro – RJ; ³Laboratório de Toxicologia Ambiental – DCB – ENSP - Fundação Oswaldo Cruz, Rio de Janeiro – RJ.Keywords: Sesquiterpenes, *epi-α-cadinol*, *E-caryophyllene*, Chemotypes.

Highlights

Chemical composition of the essential oil during 24h correlated with abiotic factors; chemotypes for PG.

Resumo/Abstract

Circadian rhythms of plant species have directly connection with endogenous biochemical processes. The essential oils (EO) are examples of possibility of changes in the production and/ or chemical composition according to the time of day or even the season. *Piper gaudichaudianum* Kunth (PG) is a species belonging to the family Piperaceae, known to be aromatic and popularly used for the treatment of diseases associated with the gastrointestinal tract. Since this plant species is rich in EO we proposed to evaluate the variation of the chemical composition of a specimen from Tijuca Forest, Rio de Janeiro, RJ, Brazil, as well as to verify the chemical diversity based on multivariate analysis tools. To achieve this goal, leaves (150g) were collected every 3 h for a period of 24 h in March 2017. Fresh leaves were submitted to hydrodistillation in a modified Clevenger-type apparatus to obtain the EO that were analyzed by Gas Chromatography coupled to Mass Spectrometry (GC-MS) and GC coupled to the Flame Ionization Detector (GC-FID). All samples were run in triplicate. Abiotic factors including humidity, temperature and radiation were used to verify the influence on the chemical composition using Pearson's correlation. In order to determine possible chemotypes, a review of the EO chemical composition from literature records was carried out, followed by principal component and hierarchical analyzes, using Statistica 10 software. The major components of the EO from Tijuca Forest were identified as sesquiterpenes: *E-caryophyllene* (1.30% - 15.71%), *Z-eudesma-6,11-diene* (1.45% - 21.77%), bicyclogermacrene (7.93% - 19.55%), α -panasinsen (0.32% - 23.30%) and *epi-α-cadinol* (0.23% - 15.45%). Regarding the abiotic factors, the temperature exerted the greatest influence on the EO chemical composition, for example *epi-α-cadinol*: the lower the temperature the higher the production of this sesquiterpene ($r^2 = -0.9179$; $p > 0.01$). In relation to the *P. gaudichaudianum* chemodiversity (Figure 1), considering 27 EO chemical composition found in the literature and 08 of our study, it was identified eight possible chemotypes: 1 - dillapiole; 2- *E-nerolidol*; 3 - α -humulene + *E-caryophyllene*; 4 -*E-caryophyllene* + bicyclogermacrene (EO chemotype from our study); 5 - longipinanol; 6-aromadendrene; 7-germacrene B and 8 - δ -cadinene.

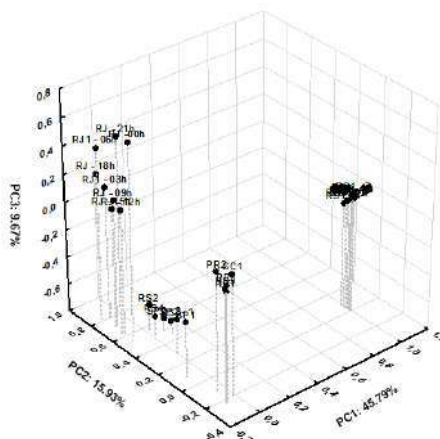


Figure 1 – PCA analysis, considering major components of the essential oil.

Área: CAT

Inscrição: 00042

Design of sustainable catalysts derived from gum arabic for organophosphate degradation: functionalization with hydroxamic acids

Willian H. Takarada (IC), José G. L. Ferreira (PG), Izabel C. Riegel-Vidotti (PQ), Elisa S. Orth (PQ)

hidetak10@gmail.com;

Department of Chemistry, Universidade Federal do Paraná (UFPR), CP 19032, CEP 81531-980, Curitiba, PR, Brazil

Palavras Chave: Detoxification, Biocatalyst, Pesticides, Green Chemistry, Acacia gums, Black Wattle Gum

Highlights

Two catalysts were developed by functionalization of *Acacia* gums with hydroxamic acid groups. The samples presented prominent catalytic activity and potential use for organophosphates degradation.

Resumo/Abstract

Arabic gum (GA) and Black Wattle gum (GNF) are natural polymers extracted from exudates of *Acacia* trees. While GA is highly employed in food and pharmaceutical industries, GNF is a residue from tannin industry, whose application is little exploited. Previous studies revealed some similarity between GA e GNF backbones^[1] and moreover, the potential application of GA in the design of biocatalysts for detoxification reactions of organophosphates^[2] (OP). OP are compounds employed as pesticides and chemical warfare agents due to their high toxicity. Degradation of these compounds are challenging due to their stability, a reason why the study of these reactions is relevant. Herein, sustainable catalysts for OP degradation were obtained by chemical modification of GA and GNF with hydroxamic acid groups, resulting in the samples GAHDA e GNFHDA, respectively. For this, the uronic groups on the gums were functionalized with 1-ethyl-3-(3-dimethylaminopropyl) carbodiimide (EDC)/N-hydroxysuccinimide (NHS)/hydroxylamine hydrochloride method^[3], represented in Figure 1A. The samples were characterized by infrared spectroscopy, nuclear magnetic resonance and potentiometric titration proving the functionalization. Finally, GAHDA e GNFHDA were evaluated as catalysts with the model substrate diethyl 2,4-dinitrophenyl phosphate (DEDNPP), resulting in an increment of 10⁴-fold compared to the spontaneous reaction. The results so far indicate catalytic activity in dephosphorylation reactions, as revealed in Figure 1B, due to hydroxamate groups in the samples and the increment is between the highest reported. Thus, these catalysts enable several applications, such as development of sensors and detoxifying agents. Moreover, we were able to obtain environmentally friendly catalysts from: (i) a commercial, cheap and biocompatible gum (GA) and the (ii) industrial waste (GNF).

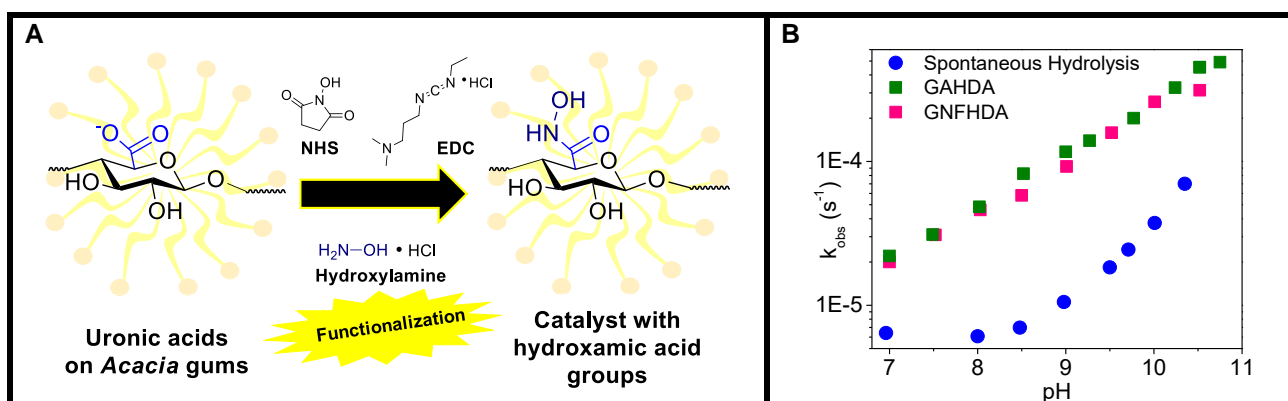


Figure 1. (A) Functionalization of *Acacia* gums with hydroxamic acid groups; (B) pH rate profile at 21°C with DEDNPP.

[1] A. Grein-Iankovski et al., *Food Hydrocolloids* **2018**, 85, 167-185

[2] J. G. Ferreira et al., *Chemical Communications* **2015**, 51, 6210-6213.

[3] R. K. Shervedani and M. Bagherzadeh, *Electrochimica Acta* **2008**, 53, 6293-6303.

Authors acknowledge the Financial support from UFPR, CAPES, CNPq, PhosAgro/UNESCO/IUPAC, L'Oréal-UNESCO-ABC, FINEP, Fundação Araucária and LabRMN-DQUI.

Área: ORG

(Inserir a sigla da seção científica para qual o resumo será submetido. Ex: ORG, BEA, CAT)

Nº de Inscrição: 00044

(Inserir o número de inscrição do autor que fez a submissão)

Synthesis of naphthoquinoid compounds with antitumor activities and higher trypanocidal potential.**Renata G. Almeida (PG)¹, Wagner O. Valença (PG)¹, Renato L. de Carvalho (PG)¹, Guilherme G. C. de Carvalho (PG),² Claudia Pessoa (PQ)², Caterina Montesi (PG)³, Romana Fato (PQ)³ Maria L. Bolognesi (PQ)³ and Eufrânio N. da Silva Júnior (PQ)¹**renag.almeida@gmail.com¹Federal University of Minas Gerais, Belo Horizonte, 31270-901, Minas Gerais, Brazil; ²Federal University of Ceará, Fortaleza, 60430-270, Ceará, Brazil; ³University of Bologna, Via Belmeloro 6/Via Irnerio 48, 40126 Bologna, Italy.

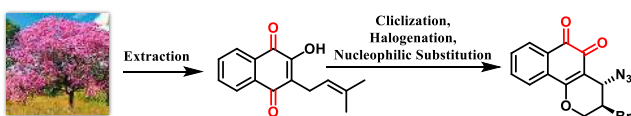
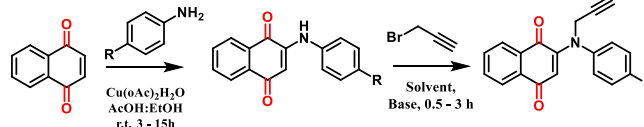
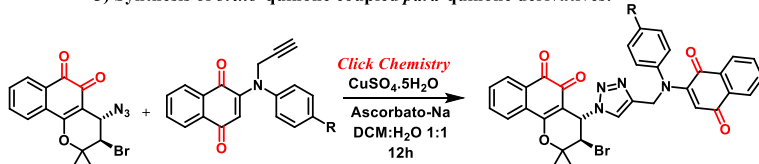
Keywords: naphthoquinone, "click" chemistry, triazole, cancer.

Highlights

A variety of quinone-based 1,2,3-triazoles were synthesized by using click chemistry reactions, copper catalyzed azide-alkyne 1,3-dipolar cycloaddition, and evaluated against six types of cancer cell lines: HCT-116 (human colon carcinoma cells), PC3 (human prostate cells), HL-60 (human promyelocytic leukemia cells), SF295 (human glioblastoma cells) and NCI-H460 (human lung cancer cells). Murine fibroblast immortalized cell lines (L929) were used to evaluate the selectivity of the compounds. The trypanocidal potential of the compounds were also evaluated in glyceraldehyde-3-phosphate dehydrogenase enzyme from *Trypanosoma brucei*. These compounds could provide promising new multitarget derivatives and represent a new class of quinonoid compounds with potent bioactivity.

Resumo/Abstract

A variety of quinone-based 1,2,3-triazoles were synthesized by using click chemistry reactions, copper catalyzed azide-alkyne 1,3-dipolar cycloaddition.

1) Synthesis of the clickable 3-bromo-4-azide-b-lapachone derivative:**2) Synthesis of the clickable alkyne quinone derivatives:****3) Synthesis of ortho-quinone coupled para-quinone derivatives:**

New compounds possessing two redox center



6 compounds evaluated against cancer cell lines Glyceraldehyde-3-Phosphate Dehydrogenase Enzyme from *Trypanosoma brucei*

Agradecimentos/Acknowledgments

This research was funded by grants from CNPq, CAPES and FAPEMIG.

- G. A. M. Jardim, E. H. G. da Cruz, W. O. Valença, D. J. B. Lima, B. C. Cavalcanti, C. Pessoa, J. Rafique, A. L. Braga, C. Jacob, E. N. da Silva Júnior, *Molecules*, 2018, **23**, 83.
- G. A. M. Jardim, T. T. Guimaraes, M. C. F. R. Pinto, B. C. Cavalcanti, K. M. Farias, C. Pessoa, C. C. Gatto, D. K. Nair, I. N. N. Namboothiri and E. N. da Silva Junior, *Med. Chem. Commun.*, 2015, **6**, 120
- T. V. Baiju, R. G. Almeida, S. T. Sivanandan, C. A. de Simone, L. M. Brito, B. C. Cavalcanti, C. Pessoa, I. N. N. Namboothiri, E. N. da Silva Júnior, *Eur J Med Chem*, 2018, **151**, 686-704.

Extraction and Characterization of Genpin Extracted from Genipap (*Genipa americana*)

João Vitor S. Medeiros (TM),^{1*} Alexandro S. Oliveira (TM),¹ José Carlos A. Vieira Júnior (TM),¹ Maria Israele S. Sousa (TM),¹ Rochelle F. Lins (TM),¹ Mariana S.S.P. Costa (PQ),² Hugo Alexandre O. Rocha (PQ),³ Érico Moura Neto (PQ).¹

erico.neto@ifrn.edu.br; v.joao@academico.ifrn.edu.br

¹Diretoria Acadêmica – Campus Macau, IFRN; ²Diretoria Acadêmica – Campus João Câmara, IFRN; ³Departamento de Bioquímica, UFRN

Palavras Chave: Genipap, *Genipa americana*, Genipin, Crosslinking).

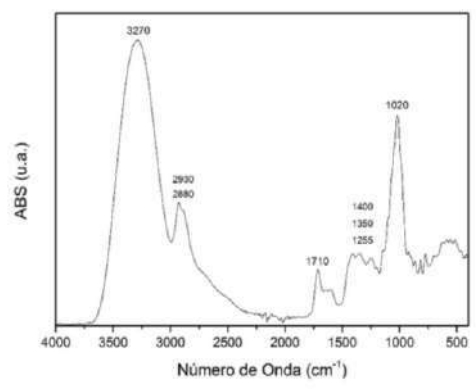
Highlights

For biomedical uses it is necessary to search for less toxic crosslinkers than the most commonly used ones such as glutaraldehyde. Genipin was obtained from *Genipa americana* in yield of 0.4285%.

Resumo/Abstract

With the need to use non-toxic crosslinking agents, to be used in biocompatible and biodegradable polymer matrices for biomedical uses, it is necessary to search for less toxic crosslinkers than those most commonly used commercially as glutaraldehyde. In this sense, several studies point to the genipina extracted from the genipapo fruit as a molecule that performs very well this activity and that proved to be much less toxic than the most common crosslinking agents, so that it can be applied in several areas, in the food industry, in tissue engineering and in the environment. The main objective of the present work was the extraction and characterization of genipin (Figure 1A), which was extracted from genipap (*Genipa americana*) with a yield of 0.4285% and characterized by spectroscopy in the ultraviolet-visible region and infrared (Figure 1B). These results showed that the extraction of genipine from the jenipapo fruit is very promising to obtain a less toxic crosslinking agent to be used in crosslinks.

Figure 1- A) Photo of extracted genipine and B) Infrared spectrum of the obtained material.



Fonte: Autoria própria em 2018.

Agradecimentos/Acknowledgments

The authors thank the IFRN-campus Macau for the support and the Laboratory of Biotechnology of Natural Polymers of the UFRN for the cytotoxic analysis.

Fe speciation in seawater from Guaratuba Bay, Brazil

Letícia Tereski (IC),^{1*} Sheisa F. D. Sierpinski (PG),¹ Marco T. Grassi (PQ)¹

leticiatereski@gmail.com

¹Departamento de Química, UFPR.

Palavras Chave: Iron, Cathodic stripping voltammetry, Seawater, Iron speciation.

Highlights

The competing ligand exchange-adsorptive cathodic stripping voltammetry was used. Results show that most of Fe is complexed by natural binders. A small fraction of total Fe is bioavailable.

Resumo/Abstract

Low Fe availability in combination with relatively large cellular demands among phytoplankton cause Fe to be a central determinant of world ocean productivity. The chemistry of Fe in oceans is characterized by its very low solubility, from nano to picomol levels, although complexation of Fe by organic ligands increases its solubility.^[1] Thus, many studies have been developed and related to the speciation of this element to better understand its behavior in seawater.

The voltammetric method used is based on the adsorptive properties of the Fe(III)-2,3-dihydroxynaphthalene (DHN) complexes on the hanging mercury drop electrode with catalytic enhancement by bromate ions. Voltammetric titration was used to evaluate Fe speciation. The different forms of the metal investigated are them computed via thermodynamic considerations, equilibrium constants and mass-balance equations, according the van den Berg–Ruzic model.^[2] Compromise conditions were defined and optimized. LOD and LOQ are 40.0 pmol L⁻¹ and 135 pmol L⁻¹, respectively.

Guaratuba Bay is a subtropical estuary on the Southern Brazilian coast. Circled points (1, 2, and 3) on Fig. 1 represent the sampling sites. Its hydrodynamics is mainly governed by river flows and tides, wherein Cubatão and São João rivers are the major contributors. In the summer its population can increase six-fold as a result of the intensive tourism activities in its surroundings. Besides, domestic sewage is still considered problematic due to poor collection and treatment.^[3]

The determination of the total Fe content was consistent with sampling conditions, with 252.4, 3.40 and 8.63 nmol L⁻¹ for samples 1, 2 and 3, respectively, which demonstrates the effect of high population density, especially on site 1, which has the highest contribution of Fe and organic matter.

Results from voltammetric titration and the van den Berg–Ruzic model for sample 1 show that most of Fe is complexed (248.7 nmol L⁻¹) and only 3.7 pmol L⁻¹ corresponds to the labile fraction, which is justified by the high concentration of natural ligands (332.5 nmol L⁻¹) as well as by its high conditional stability constant (7.94 x 10¹²). Our results demonstrate the effect of anthropogenic actions on iron speciation, since this region presents flow area of important rivers and is exposed to domestic sewage.

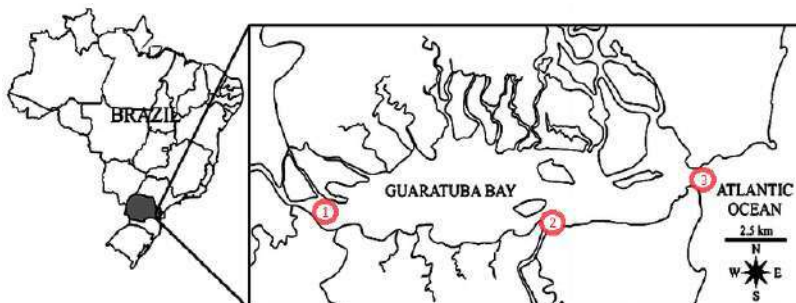


Fig. 1 - Sampling points in Guaratuba Bay, Brazil. Adapted from MARTINS, S. B., MASUNARI, S., (2013).

References

- [1] Rijkenberg, M. J. A., Middag R., Laan P., et al., *PLoS One*, 2014.
- [2] Laglera, L. M., Santos-Echeandía, J., Caprara, S., Monticelli, D., *Anal. Chem.*, 2013.
- [3] Cabral, A. C., Stark, J. S., Kolm, H. E., Martins, C. C., *Environmental Pollution*, 2018.

Agradecimentos/Acknowledgments

CNPq, UFPR, CAPES, FINEP.

One synthesis, multiple materials: from molybdenum sulfide to oxide

Ariane Schmidt (PG),¹ Aldo J. G. Zarbin (PQ)¹

arianeeschmidt@gmail.com; aldozarbin@ufpr.br

¹Chemistry Department, UFPR

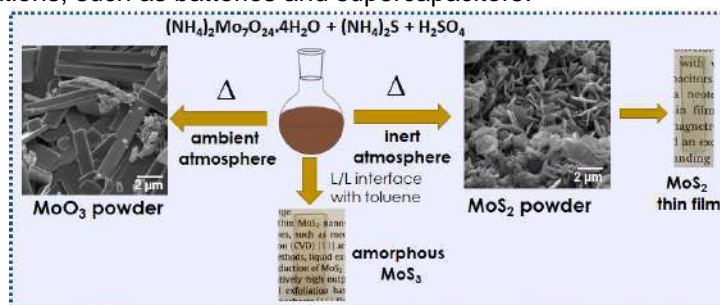
Keywords: *molybdenum disulfide, molybdenum trioxide, thin films, 2D materials.*

Highlights

Amorphous molybdenum sulfide, molybdenum disulfide and molybdenum trioxide were synthesized through a single reaction and processed as thin films through the liquid-liquid interfacial method.

Abstract

Molybdenum is a versatile element, able to form many compounds with oxygen and sulfur, like molybdenum trioxide (MoO_3) and molybdenum disulfide (MoS_2). With the advent of two-dimensional (2D) materials these compounds have gained new properties and applications, specially in supercapacitors and batteries.¹ The synthesis and processability of 2D materials it's a major drawback, once many cases involves toxic solvents and complex synthesis like chemical vapor deposition and hydrothermal synthesis.² In this work, we have investigated different conditions of reaction in order to synthesize molybdenum-based 2D materials. For this purpose, ammonium molybdate and ammonium sulfide reacted in an acidic media, in one and in two liquid-liquid (L/L) phase system,³ and further steps involving the annealing in ambient and inert atmosphere in distinct temperatures. All samples were fully characterized by Raman and UV-Vis spectroscopies, XRD, TGA, SEM and cyclic voltammetry. At first, the synthesis was done in (i) one and in a (ii) two (L/L) phase system, with no post treatment, leading to (i) an amorphous powder composed by molybdenum sulfide and oxide and (ii) a thin film of amorphous MoS_3 and MoS_2 directly obtained at the L/L interface. With the annealing in inert atmosphere, the previously obtained powder became mostly MoS_2 and $\text{MoO}_3/\text{MoO}_2$. Also, this material was submitted to liquid exfoliation and processed through the L/L interfacial method, leading to a thin film almost entirely constituted of MoS_2 . These results were mainly confirmed through the Raman spectra, which exhibited the MoS_2 bands E_{2g} (385 cm^{-1}) and A_{1g} (408 cm^{-1}), and UV-Vis spectra, through the appearance of the MoS_2 excitonic transitions A (at 660 nm) and B (at 610 nm). SEM images showed MoS_2 and MoO_3 morphologies to be dependent on the annealing temperature, varying from flower-like to lamellar plates. A summary of all process is presented in Figure 1. Overall, this work showed a simple and versatile route that brought the possibility of controlling the composition and the morphology of molybdenum sulfide based materials, as well as presents an original route to process these materials as thin films, both crucial for electrochemical applications, such as batteries and supercapacitors.



Acknowledgments

Authors acknowledge Capes, CNPq, INCT-Nanocarbono for financial support and Mackgrape for the Raman spectroscopy analysis.

1. Zhang, W.-J. & Huang, K.-J. *Inorg. Chem. Front.* **2017**, 4, 1602–1620.
2. Afanasiev, P. *Comptes Rendus Chim.* **2008**, 11, 159–182.
3. Salvatierra, R.V.; Oliveira, M.M.; Zarbin, A.J.G., *Chem. Mater.*, **2010**, 22, 5222.

New antitumoral prenylated hydroquinones from inflorescences of *Piper crassinervium* (Piperaceae)

Natalia F. Quintiliano (PQ)¹, Juliana R. Brito (PG)¹, Carlos R. Figueiredo (PQ)¹, Patricia Sartorelli (PQ)¹, Guilherme M. Antar (PG)², João Henrique G. Lago (PQ)³ Email: joahglago@gmail.com

¹Instituto de Ciências Ambientais, Químicas e Farmacêuticas, Universidade Federal de São Paulo, SP; ²Instituto de Biociências da Universidade de São Paulo – SP; ³Centro de Ciências Naturais e Humanas, Universidade Federal do ABC, Santo Andre-SP

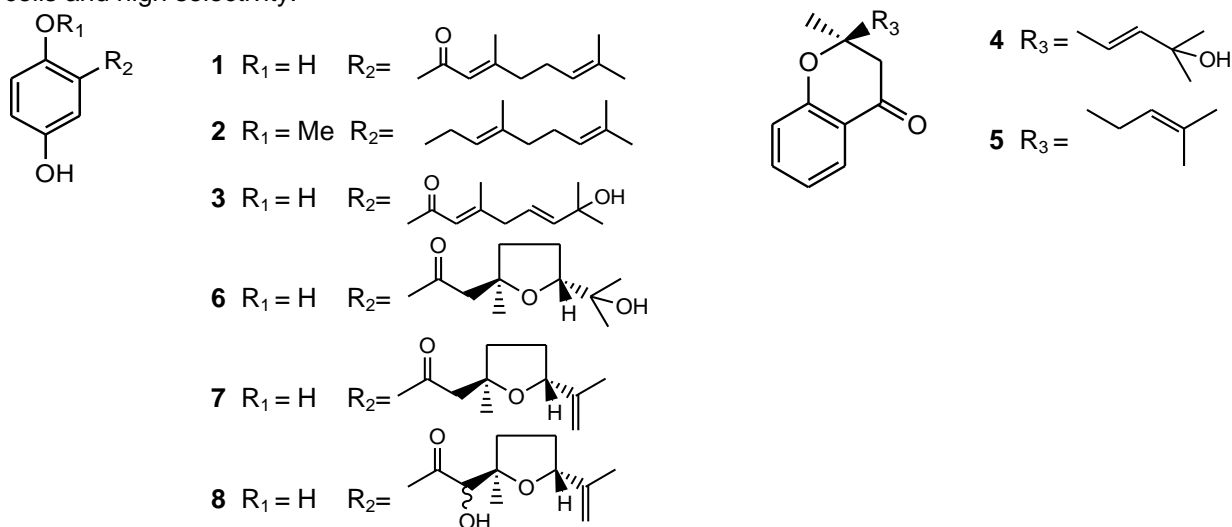
Palavras Chave: *Piper crassinervium*, prenylated hydroquinones, antitumoral activity.

Highlights

New hydroquinone derivatives from inflorescences of *Piper crassinervium* Kunth (Piperaceae). In this work it was performed the chemical study of hexane extract from inflorescences of *Piper crassinervium* Kunth (Piperaceae). Successive chromatographic procedures using silica gel, Sephadex LH-20 and RP-HPLC afforded eight prenylated hydroquinones being five new compounds. Additionally, the antitumoral potential of isolated compounds was evaluated *in vitro* against different tumor and non-carcinogenic cells.

Abstract

Previous studies reported the occurrence of antifungal prenylated hydroquinone derivatives from leaves and roots from *P. crassinervium*.^{1,2} In the present work it was performed, at first time, the chemical study of inflorescences of this plant species. The respective hexane extract was fractionated over silica gel, Sephadex LH-20 and RP-HPLC to afford eight prenylated hydroquinones: 1,4-dihydroxy-2-(3',7'-dimethyl-1'-oxo-2'E,6'-octadienyl)benzene (**1**), 3-[(2E)-3,7-dimethylocta-2,6-dien-1-yl]-4-methoxyphenol (**2**) and crassinervin A – F (**3 – 8**), being compounds **3 – 8** new prenylated hydroquinone derivatives. The isolated substances had their structures identified or elucidated by HRESIMS and NMR. Additionally, the crude hexane extract from inflorescences displayed *in vitro* activity against murine melanoma cell line (B16F10-Nex2)³. After evaluation of the cytotoxicity of the compounds **1 – 8** against human melanoma (A2058), breast adenocarcinoma (MCF7), leukemia (HL-60) and cervical carcinoma (HeLa) was observed that compound **1** displayed higher potential since its presented EC₅₀ values of 8.6 ± 0.6 µg/mL (33.1 ± 2.3 µM) for the A2058 lineage, reduced toxicity for non-carcinogenic human fibroblast cells - T75 (EC₅₀ > 300 µM) and, consequently, high selectivity (SI > 11.6). Thus, this substance can be considered as a promising prototype for the development of new drugs for the treatment of skin cancer. Therefore, the results obtained in this study bring contributions to the chemotaxonomy of *Piper* genus, due to the occurrence of rare compounds, besides aggregating value to these natural products, especially compound **1**, due to its activity against tumor cells and high selectivity.



References: ¹Danelutte et al. *Phytochemistry* **2003**, 64, 555. ²Lopes et al., *Nat Prod Res.* **2008**, 22, 1040. ³Sousa et al., *Phytochemistry* **2017**, 140, 108.

Acknowledgments: CAPES, FAPESP and CNPq.

Electrodes modified with barley bagasse (*Hordeum vulgare*) developed for the voltammetric determination of Pb (II)

Daniel J.A. dos Santos (PG),^{1*} Viviane G. Bonifácio (PQ)¹, Cleide S. T. Araújo (PQ)¹

danielquimico10@gmail.com

¹Universidade estadual de Goiás - campus ciências exatas e tecnológicas

Palavras Chave: Eletrodos modificados, determinação voltamétrica de Pb (II), bagaço de cevada (*Hordeum vulgare*)

Highlights

- Carbon paste electrodes modified with barley bagasse (*Hordeum vulgare*) were developed for the voltammetric determination of Pb (II) using a simple, quick and sensitive procedure.
- Barley bagasse (*Hordeum vulgare*) natural adsorbents
- Determination of Pb (II) in cosmetics

Resumo

As análises químicas requerem cada vez mais técnicas com alta sensibilidade, praticidade e um baixo custo. Neste sentido a voltametria por redissolução é uma técnica que, no tocante ao custo benefício em análise de metais, mostra-se eficiente e barata em relação a outras técnicas que envolvem alto custo de equipamento, utilização de gases de alto valor além limitação de análise In situ. As técnicas voltamétricas são ainda mais eficazes com utilização de eletrodos modificados para análises específicas. Os adsorventes naturais são exemplos de modificador de eletrodos e a literatura traz boas experiências neste sentido. O bagaço de cevada (*Hordeum vulgare*) (BC) é um resíduo indústria cervejeira sendo que a literatura apresenta resultados satisfatório na adsorção de metais tal como Pb (II) entre outros íons. O BC foi caracterizado por técnicas espectrométricas de MEV e FTIR e técnicas voltamétricas de varredura linear e posteriormente utilizado na construção dos eletrodos. Este trabalho trata do desenvolvimento e aplicação de um eletrodo de pasta de carbono modificado com bagaço de cevada (*Hordeum vulgare*) EPCMBC para a determinação voltamétrica de Pb (II) através de um procedimento simples, rápido e sensível. Os EPCMBC apresentaram ótima repetitividade e reprodutividade além de uma resposta linear entre $1,6 \times 10^{-1} \text{ mol L}^{-1}$ e $9,7 \times 10^{-7} \text{ mol L}^{-1}$ e limite de detecção de $3,5 \times 10^{-10} \text{ mol L}^{-1}$. Os eletrodos também foram testados na determinação de Pb (II) em amostras cosméticos onde também mostrou-se eficaz. Encontra-se em andamento o estudo da interferência de outros íons nas análises de chumbo (II). Todavia o eletrodo mostra grande potencial em ser aplicado na determinação voltamétrica de Pb (II) em amostras reais.

Referências bibliográficas

ARAÚJO, C.S.T.; CUNHA, A.H.N.; MARCIONÍLIO, S.M.L.O. et. al. **Caracterização do bagaço de cevada (*Hordeum vulgare*) resíduo de indústria cervejeira antes e após a adsorção de íons Pb (II)**. Revista Mirante. Anápolis-GO, v.8, n 1, junho, 2015. P149-158.

CERVBRASIL - Associação Brasileira da Indústria da Cerveja. Mercado cervejeiro, 2018. Disponível: <http://www.cervbrasil.org.br/paginas/index.php?page=mercado-cervejeiro> ACESSO EM 03/05/2018

BERGAMINI, M.F.; LIVEIRA, P. R.; Alyne C. LAMY-MENDES, A.C.; REZENDE E.I.P.; MANGRICH, A.S.; MARCOLINO, L.H.J. **Electrochemical determination of copper ions in spirit drinks using carbon paste electrode modified with biochar**. Food chemistry, Brazil, n. 171, p. 426-431.2014.

Agradecimentos

Ao prof. Dr. Luiz Humberto Marcolino Júnior coordenador do LabSense – UFPR;



Novel praziquantel analogues with antiparasitic effect against adult and immature forms of *S. mansoni*, the ethiological agent of Schistosomiasis

Rafael F. Dantas¹ (PQ), Frederico R. C. Noronha Jr² (PG), Walter César G. Valente (TC)¹, João M. Rezende-Neto¹ (TC), Giuliana V. Shirato¹ (TC), Helen L. Whiteman³ (PQ), Karl F. Hoffmann³ (PQ), Sabrina B. Ferreira² (PQ), Floriano P. Silva Jr^{1*} (PQ).

*email: floriano@ioc.fiocruz.br

¹Laboratory of Experimental and Computational Biochemistry of Drugs, Oswaldo Cruz Institute, Oswaldo Cruz Foundation, RJ, Brazil. ²Laboratory of Organic Synthesis and Biological Prospecting, Chemistry Institute, Federal University of Rio de Janeiro, RJ, Brazil. ³Karl Hoffmann Laboratory, The Institute of Biological, Environmental and Rural Sciences (IBERS), Aberystwyth University, SY23 3DA, Wales, UK

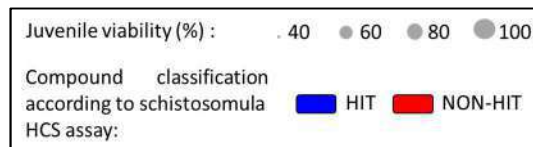
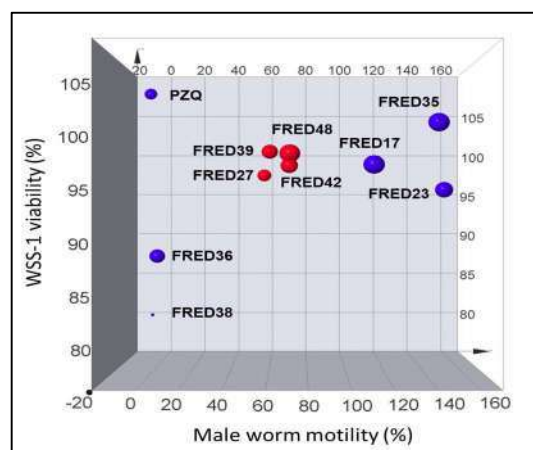
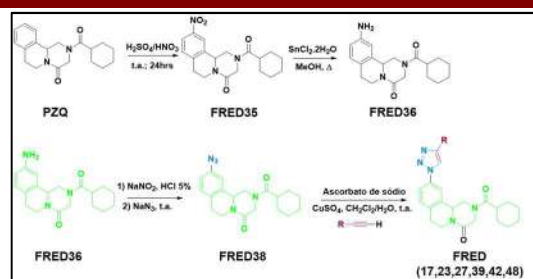
Keywords: Praziquantel analogues, Triazole, Click chemistry, Schistosomiasis drug discovery, Neglected tropical diseases

Highlights

A novel series of praziquantel analogs carrying the 1*H*-1,2,3-triazole moiety and their chemical precursors were synthesized and screened against *S. mansoni* worms and mammalian cells, showing schistosomicidal activity.

Abstract

Schistosomiasis is a neglected tropical disease (NTD) caused by trematode parasites from *Schistosoma* genus, such as *S. mansoni*. It affects millions of people worldwide, especially in low income countries. Since the 80's, praziquantel (PZQ) has been the sole drug used to treat Schistosomiasis. However, PZQ has several therapeutic limitations, including low activity against immature forms of the parasite infecting the human host (schistosomula and juvenile), which allows reinfection. Therefore, there is an urgent need for new schistosomicidal agents. In this work, we synthesized a novel series of 1*H*-1,2,3-triazoles tethered to PZQ (FRED) by the copper-catalyzed 1,3-dipolar cycloaddition reaction. The triazoles and their chemical precursors were screened against adult and immature forms of the parasite, as well on normal human cell line (WSS-1), using colorimetric, fluorimetric and high content screening (HCS) assays. All compounds showed low WSS-1 cytotoxicity (cell viability > 80 %) at 10 μ M after 48h of incubation. Apart from FRED17/23/35, the other compounds decreased male adult worm's motility to approximately 65 % (FRED27/39/42/48) or almost to zero (FRED36/38 and PZQ) using the same concentration and incubation time of cell viability assay. FRED38 was also the most active compound against juvenile worms (38.5 % viability) at 100 μ M (48h incubation), a value 1.6x lower than PZQ (68.3 %). Six out of the ten compounds tested were classified as hits (actives) against schistosomula at 50 μ M after 72h of incubation. In conclusion, FRED36/38 are the most promising candidates for further chemical optimization since they affect all three evolutive forms of *S. mansoni* in the human host and have low cytotoxicity.



Acknowledgments

CNPq, FAPERJ, FIOCRUZ, UFRJ

Área: ANA

Nº de Inscrição: 00056

Cela de fluxo com nova geometria para detecção de quimiluminescência empregando uma malha de transdução de sinal com novo design eletrônico

Manoel J.A. Lima (PG),¹ Oziel R. Marinho (PG),^{1,2} Boaventura F. Reis (PQ).^{1*}reis@cena.usp.br¹Centro de Energia Nuclear na Agricultura, Universidade de São Paulo²Departamento de Química, Universidade Federal de São Carlos

Palavras Chave: Quimiluminescência, multicomutação em análise química, instrumentação analítica, automação em química analítica, método limpo.

Highlights

Flow cell with a new geometry for detection of chemiluminescence employing a new electronic design for signal transduction

The flow cell with hollow coin geometry allowed reduction of waste generation and reagent consumption. Coupling two photodiodes to the transducer network allowed simplification with low level of noise.

Resumo/Abstract

A quimiluminescência é uma técnica de detecção fotométrica que não usa fonte de radiação eletromagnética, nem dispositivo de condicionamento de luz como rede de difração e prisma, portanto o detector fotométrico pode ser simples e de menor custo. A quimiluminescência tem sido empregada para fins analíticos, usando sistemas de análise por injeção em fluxo (FIA) desde os anos oitenta, e para isso, celas do fluxo com diferentes geometrias tem sido propostas. As geometrias mais utilizadas são constituídas por um reator espiral, moldado com um tubo de vidro ou Teflon, ou tendo um sulco em espiral, usinado em um bloco de material polimérico. Neste trabalho, foi empregado pela primeira vez, uma cela de fluxo com geometria semelhante a uma moeda oca, tendo volume interno em torno 100 µL. Os dois fotodiodos usados como sensores foram acoplados às faces planas da cela de fluxo, permitindo melhor aproveitamento da radiação eletromagnética emitida pela oxidação do luminol. O circuito de geração de sinal foi projetado para usar uma única malha (network) de transdução de sinal. Usualmente é usada uma malha para cada fotodiodo e um circuito somador de sinais¹. O módulo de análises baseado no processo de multicomutação, empregou três mini-bombas solenoide e uma mini-bomba peristáltica para propulsão de fluídos. O controle da propulsão dos fluídos e a aquisição do sinal analítico foram realizados usando uma plataforma Arduíno Due.

Os testes de viabilidade do protótipo para fins analítico, foram realizados usando soluções de hipoclorito de sódio (2,5 mmol L⁻¹) como oxidante e luminol (10,0 mmol L⁻¹), em meio alcalino (10 mmol L⁻¹ NaOH). Usando ácido gálio como antioxidante, obteve-se resposta linear ($r = 0,995$) na faixa de concentrações de 10,0 a 100,0 mmol L⁻¹. O módulo de análise proposto apresentou boas características analíticas como coeficiente de variação ($n = 12$) de 1,3%, limite de detecção estimado em 0,3 mmol L⁻¹ e frequência de amostragem de 220 determinações h⁻¹. Além disso, o consumo de luminol e a geração de efluentes por determinações foram de 100 µg e 0,5 mL, respectivamente.

¹M.F. Andrade, S.G.F. Assis, A.P.S. Paim, B.F. Reis, Food Anal. Methods, 7, 2014, 967–976.

Agradecimentos/Acknowledgments

CNPQ, FAPEAM, CAPES, FAPESP e INCTAA.

Green alternative for the identification of phenolic compounds in Brazilian red wines by HPLC

João H. Pelissari (PG)^{1*}, Cristiano S. Funari (PQ)²; Renato L. Carneiro(PQ)³; Daniel Rinaldo (PQ)^{1,4}

pelissarijh@gmail.com; daniel.rinaldo@unesp.br

¹Chemistry Graduate, IQ-UNESP; ²Department of Bioprocesses and Biotechnology, FCA-UNESP; ³Department of Chemistry, UFSCar; ⁴Department of Chemistry, FC-UNESP;

Keywords: Wine, Green chromatography, Factorial design, Fingerprint, Green analytical chemistry.

Highlights

- Multivariate and environmental approach for development of HPLC method.
- Replacement of toxic solvents with non-toxic and sustainable solvents for analysis by HPLC.
- Analysis of red wines by HPLC without generating toxic waste.

Analysis of *B. forficata* by HPLC without generating toxic waste. Abstract

HPLC is the most used technique for the identification of phenolic compounds in wines due to their versatility, short run time, high resolution and sensitivity. However, quality control analyzes by HPLC generate large amounts of waste due to solvents used as mobile phase. Therefore, the objective of this work was to develop a new HPLC analysis methodology for the identification of phenolic compounds in Brazilian red wines using EtOH and H₂O as mobile phase, using a multivariate and multiparametric approach in which the efficiency and environmental factors were considered. A screening of variable using fractional factorial design (2_{V-2}^{7-2}) was applied that allowed to identify the most influential variables in the development of the method. Then, a Doehlert design of two variables (or factors) was performed which provided the best chromatographic condition [5:95 to 55:45, EtOH:H₂O, v/v, in 30 min, 51,8°C with 0,75 mL.min⁻¹, Fig. 1]. The response evaluated in the screening step and Doehlert design (DoE) was the number of chromatographic bands. In order to improve the resolution between the chromatographic bands, a *clean-up* was performed and it was possible to identify, through t_R and UV spectra, the compounds gallic acid, caffeic acid, syringic acid, catechin, epicatechin, *p*-coumaric acid, resveratrol and kaempferol.

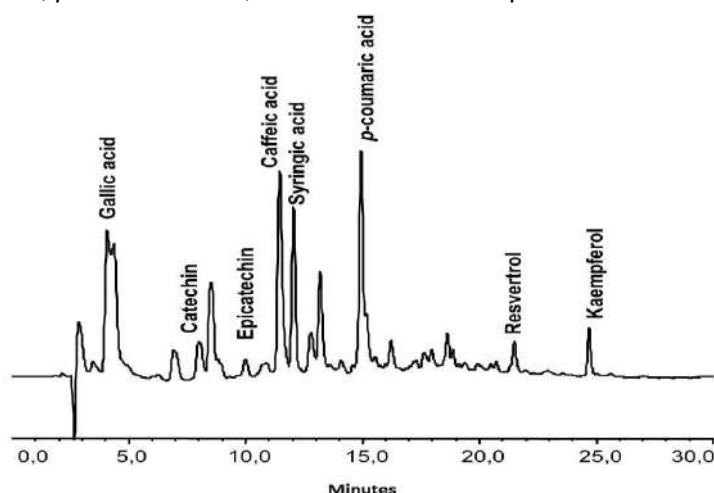


Fig.1. Brazilian Red Wine fingerprint provided by the best chromatographic condition obtained from DoE. [Column: Phenyl-Hexyl 150 x 4,6mm; Mobile Phase: H₂O + 0.1 % acetic acid (A) and EtOH (B); Flow-rate: 0,75mL.min⁻¹; Temperature: 51,8°C; Gradient: 5-55% B (30 min)]

Acknowledgments

Prof. Dr. Valdecir Farias Ximenes (FC-Unesp); Profa. Dra. Fabíola Manhas Verbi Pereira (IQ-Unesp)

Porfirinas de cobre de primeira e segunda gerações como catalisadores na degradação de catecol por H₂O₂

Nathália S. Rabelo (IC),^{1*} Nathany I. D. Vieira (PG),¹ Mirra A. N. Silva (TC),¹ Gilson de F. Silva (PQ),¹ Dayse C. S. Martins (PQ)^{1**}.

**dayseesm@yahoo.com.br; *nathalia-silva-rabelo@hotmail.com

¹Departamento de Química, Instituto de Ciências Exatas, UFMG

Palavras Chave: Poluente emergente, Catálise, Modelo Biomimético, Catalisadores.

Highlights

First- and second-generation copper porphyrins as catalysts for catechol degradation by H₂O₂. Catechol is a toxic pollutant. Its degradation was made by copper porphyrins. It was observed a low degradation of catechol which could be related to a low CuP reactivity and the dismutation of H₂O₂.

Resumo

A ampla ocorrência do catecol (Figura 1a) e seus derivados na natureza impulsionou sua incorporação em uma série de materiais funcionais sintéticos, tornando-o um poluente emergente que precisa ser degradado.¹ Considerando que as catecolases são complexos de cobre, que convertem o catecol em quinonas, sintetizaram-se porfirinas de cobre de primeira {[Cu^{II}(TPP)]} e de segunda {[Cu^{II}(T2PyP)]} gerações (Figura 1b) para mimetizar tal reação em presença de H₂O₂. Reações de degradação do catecol foram realizadas em solução tampão (pH = 8) sob gitação magnética a 30 °C por três horas. A determinação do grau de degradação do catecol (Tabela 1) foi realizada por meio de análise por cromatografia líquida de alta eficiência com detector UV no comprimento de onda de 251 nm, sob fluxo de análise de 1,0 mLmin⁻¹. O volume de injeção foi de 20 µl; empregou-se coluna cromatográfica Supelco ODS (250 mm x 4,6 mm, 5 µm) e teve-se como fase móvel água:acetonitrila (40:60).

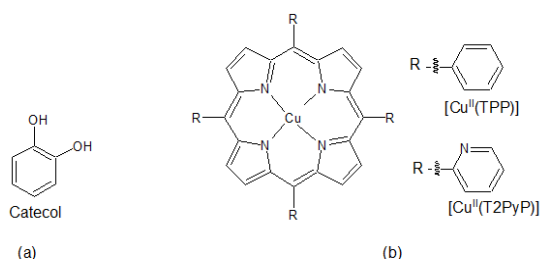


Figura 1. (a) Catecol e (b) Catalisadores de cobre estudados.

Tabela 1. Degradação de catecol mediada por porfirinas de cobre.^a

| Catalisador | Relação molar ^b | Degradação do catecol (%) |
|----------------------------|----------------------------|---------------------------|
| [Cu ^{II} (TPP)] | 1:200:500 | 5,02 |
| | 1:200:1000 | 7,22 |
| [Cu ^{II} (T2PyP)] | 1:200:500 | 6,36 |
| | 1:200:1000 | 2,93 |

^aReações executadas no escuro, sob agitação magnética e temperatura de 30 °C por 3 horas. ^bRelações molares catalisador:catecol:oxidante

Verifica-se que a taxa de degradação do catecol em todos os sistemas é baixa, mas em extensão comparável àquelas de sistemas já descritos na literatura que avaliaram a atividade de outras porfirinas de cobre.² Este trabalho ainda está em desenvolvimento e os resultados são preliminares, mas acredita-se a baixa degradação do catecol pode estar associada à reatividade geral dessas porfirinas de cobre se comparadas às de outras metaloporfirinas, empregadas em outros sistemas catalíticos. Além disso, pode ter ocorrido o desproporcionamento do peróxido de hidrogênio. Esse estudo da degradação do catecol por porfirinas de cobre e de porfirinas com outros íons metálicos está em andamento e os resultados serão posteriormente relatados.

¹Maier, G. P.; Bernt, C. M.; Butler, A., *Biomat. Sci.*, 2018, p.332-339. ²Castro, K. A. D. F. et al., R., *Polyhedron*, 2018, p.478-484.

Agradecimentos

CNPq, CAPES e Fapemig

Influence of Cr on mechanical and optical properties of Cr-modified-TiO₂ thin films prepared by sol-gel method

Juliana C. Neves (PG),^{1*} Marcelo M. Viana (PQ),¹ Nelcy D. S. Mohallem (PQ).¹

juliana.cneves91@gmail.com; marcelomavi@yahoo.com.br

¹Departamento de Química, UFMG

Palavras Chave: *Thin Films, Titanium Dioxide, Nanocomposites, Chromium*

Highlights

Nanocomposite films obtained from modified sol-gel. *Band gap* values closer to the visible radiation range. Promising as self-cleaning surface, using better the solar radiation in photocatalysis.

Resumo/Abstract

Titanium dioxide (TiO₂) has been a promising candidate in the development of self-cleaning coatings, arousing great technological interest. However, this material shows some limitations, such as high recombination time of the electron-hole pairs generated during uv irradiation, and a relatively narrow band gap, which restricts the useful radiation range of the solar spectrum in the photocatalytic process. A promising strategy to reverse these issues has been the doping of TiO₂ with metals and metal oxides. Thus, this study proposes the synthesis and characterization of TiO₂ thin films modified with chromium, aiming at shifting the region of absorption of TiO₂ radiation to smaller energies. Chromium-modified TiO₂ thin films were obtained by the preparation of sol-gel solutions based on titanium isopropoxide and isopropanol, modified with CrCl₃. These solutions had concentrations of 0.5; 1.0; 5.0 or 10 mol% Cr, and were deposited on glass substrates by the dip-coating method and then calcined at 500 °C. The thin films prepared were characterized by X-ray diffraction (XRD), atomic force microscopy (AFM), transmission electronic microscopy (TEM), diffuse reflectance, spectroscopic ellipsometry, nanoindentation and wettability tests. The structural, morphological, optical, mechanical and surface characterization showed that the insertion of chromium in the system caused significant modification in several properties of the final material, such as roughness, hardness optical band gap and wettability. These modifications are related to the formation of chromium oxide, especially for samples containing higher concentrations of chromium. The sample containing 10 mol% of Cr showed two regions of radiation absorption: one in the ultraviolet range, and the other whose band gap reaches values corresponding to the region of visible radiation. This is a very desirable behavior in the preparation of self-cleaning coatings, since the presence of regions of visible radiation absorption in the system allows a better use of solar radiation in the photocatalysis process.

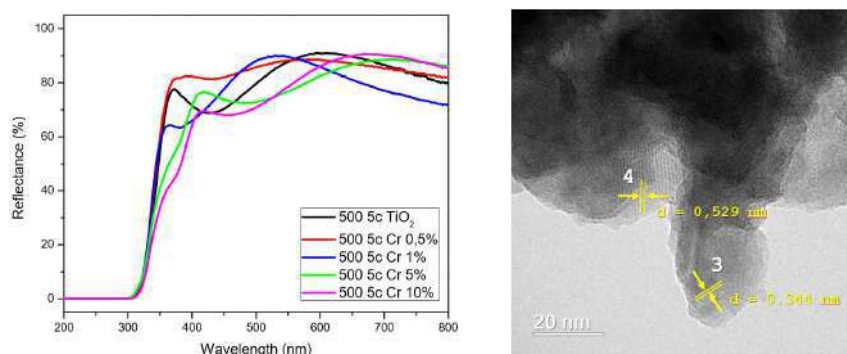


Figure 1. Diffuse reflectance spectra for different thin films modified with chromium (left) and (b) HRTEM image of 500 5c Cr 10% (right).

Agradecimentos/Acknowledgments

This study was financed in part by the Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior – Brasil (CAPES) – 8881.068091/2014-01. It was also supported by CNPq and Fapemig.

Physicochemical properties of the *Avena* spp. biomass pyrolyzed and enriched with magnesium chloride and urea.

Janaina Pontes da Silva (IC), Cristian Pessotto (IC), Jaqueline Nicolini (PQ), Keller Paulo Nicolini (PQ).^{1*}

keller.nicolini@ifpr.edu.br

LACOPPI – Laboratório de Corantes e Processos Pirolíticos, Instituto Federal do Paraná – IFPR, Av. Bento Munhoz da Rocha Neto, PRT 280, Palmas - PR, 85555-000.

Keywords: *physicochemical parameters, adsorption, biomass.*

Highlights

The biomass of *Avena* spp. pyrolyzed has the ability to remove synthetic dyes. Removal of tartrazine yellow dye is higher in char enriched with nitrogen.

Abstract

Synthetic dyes are one of the main groups of the environment pollutants.¹ This work aims to determine the thermodynamic parameters of the adsorption of tartrazine yellow (TY) in pyrolysed biomass of *Avena* spp. The residual biomass of *Avena* spp. was pyrolyzed at 400 °C (± 5) for 30 min, and cooled by the addition of distilled water (0.2 mL g⁻¹). Then, the material was macerated for 5 min with particle size ≤ 10 mesh in the presence of 1 % magnesium (MgCl₂) and 1 % urea (CO(NH₂)₂), and washed with distilled water at 60 °C (± 3), obtaining respectively the materials BA400HMgH and BA400HUH. The adsorption tests was performed in Becker cups containing 50 mL of TY solutions at temperatures of 25, 40 and 55 °C for 60 min. Aliquots were collected every 5 min, centrifuged at 3000 rpm for 2 min and the absorbance was determined in 420 nm. The adsorption isotherms of TY for sample BA400HMgH presented the best fit for the Langmuir isotherm (monolayer). For the sample BA400HUH the best fit were verified for the Freundlich isotherm (Table 1). The sample BA400HUH presented $> q_{e(max)}$, $> K_{ads}$, $< \Delta H^{\circ}_{ads} = -2,9$ kJ mol⁻¹ and $> \Delta S^{\circ}_{ads} = 9,5 \times 10^{-3}$ kJ mol⁻¹ when compared to the sample BA400HMgH. For BA400HMgH, the increase in temperature promotes reduction of K_{ads} which is justified by higher values of ΔG°_{ads} . The relative growth in cultures of *Saccharomyces cerevisiae* for the concentration of 10³ ppm is 140 % for BA400HMgH and 130 % for BA400HUH. The samples BA400HMgH and BA400HUH presented low toxicity, allowing their study in the development of adsorbent materials aiming to minimize environmental impacts.

Table 1. Parameters physicochemical for the adsorption of TY in BA400HMgH and BA400HUH.

| Parameters | BA400HMgH | | | BA400HUH | | |
|---|------------------------|-------------------------|------------------------|------------------------|-------------------------|------------------------|
| | 25 °C | 40 °C | 55 °C | 25 °C | 40 °C | 55 °C |
| $q_{e(max)}$ (mol g ⁻¹) | 5.2×10^{-6} | 4.4×10^{-6} | 2.2×10^{-6} | 9.6×10^{-6} | 6.1×10^{-6} | 1.7×10^{-5} |
| Order of reaction | 0.86 | 1.11 | 0.93 | 0.78 | 1.17 | 0.87 |
| K_{ads} | 1.4×10^{-1} | 1.2×10^{-1} | 7.2×10^{-2} | 2.4×10^{-1} | 1.6×10^{-1} | 1.8×10^{-1} |
| ΔG°_{ads} (kJ mol ⁻¹) | 4.8 | 5.6 | 7.2 | 3.6 | 4.7 | 4.6 |
| ΔH°_{ads} (kJ mol ⁻¹) | | -1.6×10^{-5} a | | | -2.9 ^b | |
| ΔS°_{ads} (kJ mol ⁻¹) | | -4.0×10^{-4} a | | | -9.5×10^{-3} b | |
| <i>Isotherm</i> | | | | | | |
| <i>Langmuir</i> | | | | | | |
| K_L (dm ³ g ⁻¹) ^a | 3.0×10^{-2} c | 5.9×10^{-2} c | 2.9×10^{-2} c | 6.6×10^{-2} | 3.0×10^{-2} | 2.8×10^{-1} |
| R^2 ^a | 0.39 ^c | 0.63 ^c | 0.86 ^c | 0.93 | 0.92 | 0.11 |
| R_L ^a | 0.99 | 0.99 | 0.99 | 0.99 | 0.99 | 0.99 |
| <i>Freundlich</i> | | | | | | |
| K_F (dm ³ g ⁻¹) ^b | 3.6×10^{-3} | 5.8×10^{-4} | - | 3.4×10^{-1} c | 1.4 ^c | 1.9×10^{-4} c |
| R^2 ^b | 0.39 | 0.74 | - | 0.93 ^c | 0.93 ^c | 0.10 ^c |

^aValues relative to K_L ; ^b Values relative to K_F ; ^c Reference value for the calculation of ΔH_{ads} and ΔS_{ads} ; $q_{e(max)}$: concentration of the solid phase at equilibrium; ΔG°_{ads} : energy variation of Gibbs of adsorption; ΔH°_{ads} : variation of adsorption enthalpy; ΔS°_{ads} : variation of the adsorption entropy; K_L : Langmuir constant; K_F : Freundlich constant; R_L : dimensionless constant.

¹ Goscianska J; Ciesielczyk F. *Microporous and Mesoporous Materials*, 280:7-19, 2019

Acknowledgments

LACOPPI, IFPR, PIBIC/CNPQ, PIBIC-Jr/CNPQ, CNPq.

Synthesis and Characterization of a New ionic Chemosensors

Natan M. Uchiyama (IC),¹ Izilda A. Bagatin (PQ),²

Uchiyama1354@gmail.com; ibagatin@gmail.com

¹Instituto de Ciências Ambientais, Químicas e Farmacêuticas UNIFESP - Depto de Química. Laboratório de Química de Calixarenos, Espectroscopia Molecular e Catálise. .

Palavras Chave: (Chemosensor, hydrogen bonding, anionic sensor).

Highlights

The development of chemosensors to detect hazardous ions or species of high added-value products. Modified calixarenes can detect anionic species on the advantage of such systems. Spectroscopy studies are used as good method to measure the sensing ability of chemosensors.

Resumo/Abstract

The sensor is any device that interacts with matter or energy and can transmit a signal that can be measured. Among the various types of sensors, we have the optical chemosensors that signal the presence of interest species via fluorescence or changing color. The planning of this type of molecule occurs across the necessity for a receptor site, which must have the ability to interact with certain species, and one emission site, which must have the capacity to changing some properties when occurs the interaction, as some change on quantum yield or shift on absorbance bands resulting in changing color.[1]

In that context, we have some published works as the chemosensor for fluoride, acetate and phosphate 2-(4-Hydroxyphenylazo)benzoic acid interacting through hydrogen bond which proved to be selective and sensitive for this anions even in the presence of interferents.[2]

A calixarene is a macrocycle with hydrophobic cavities that can hold smaller molecules or various type of ions on the host-guest system. Besides, it can be easily functionalized which allows the addition of substrates that can interact and act as a chemosensor. [3]

The objective of this project is the synthesis of chemosensors that have a calixarene matrix to sensing species that offer some damage due to contamination or excess, enabling its quantification and even naked eye visualization via qualitative spot test.

Our current attempt is the hydrazide ligand at side which was submitted to interaction by UV-vis titration, being observed interaction with fluoride, evidenced by hypsochromic shift of the absorption band at 243 nm to 220 nm and the intensification of the band on 286 nm as consequence of the gradual addition of the anion F⁻.

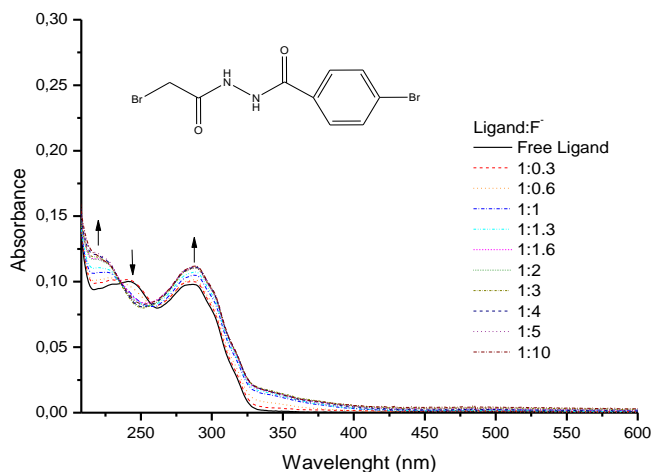


Image 1. UV-vis titration interaction test with fluoride anion

[1] Czarnik, A.W. Supramol. Chem., Fluorescence and Sensing. ACS Symposium Series; American Chemical Society.: Washington, DC, 1993, 01-08.

[2] Bagatin, I.A.; Santos, C.H.; Uchiyama, N.M. Spectrochim. Acta, Part A. 2019, 210, 355-361.

[3] Song, M.; Sun, Z.; Han, C.; Tian, D.; Li, H.; Kim, J.S. Chem. Asian J. 2014, 9, 2344 – 2357

Agradecimentos/Acknowledgments

Thanks to CNPq by the grant PIBIC, to FAPESP by fomentation and to Laboratório de Química de Calixarenos, Espectroscopia molecular e Catálise research group.

Diversified methodologies as a facilitator of chemistry learning

Ricardo M. Miranda* (FM),¹ **Natasha L. T. Souza**² (IC). **Jamily S. Marinho**¹ (TM).
ricardo.miranda@ifpa.edu.br

¹Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia do Pará, Campus Ananindeua. ² Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia do Pará, Campus Belém.

Palavras Chave: *Chemistry Teaching, Diversified Methodologies, Learning facilitator*

Highlights

- ✓ Understanding the chemical concepts requires a lot of effort by the students and also the teachers.
- ✓ The diversification in the methodology has been increasingly applied in the classroom, providing innovation and more success in the teaching-learning process.

Resumo/Abstract

Para Chassot, (2011, p.247) “a química é a ciência que investiga as substâncias e as transformações que nelas ocorrem”, portanto, os elementos, substâncias e moléculas compõe tudo. Para Maldener (2006, p.158) “o pensamento químico se desenvolve de acordo com a necessidade resolver os novos problemas apresentados pelo meio sociocultural em instalação”. Assim, este trabalho objetivou diversificar as metodologias de ensino de química em aulas no 1 ano do ensino médio do IFPA Campus Ananindeua, como emprego de experimentação demonstrativa em sala de aula, já que a escola não tem laboratório, além do uso de recursos virtuais como laboratório virtual, com o programa virtual Lab, plataforma Phet de simulações conceituais e experimentos, uso de aplicativos de smartphone como ácidos inorgânicos e vídeo aulas de revisão, que aliados as aulas teóricas, com exemplificações, contextualização e realização de exercícios contribuíram como facilitadores na construção do conhecimento. Entre os experimentos aplicados para turma, foi realizado a demonstração da formação de precipitado por meio da reação entre sulfato de cobre II pentahidratado ($\text{CuSO}_4(\text{Aq})$) com cloreto de bário ($\text{BaCl}_2(\text{Aq})$), que forma como produtos, sulfato de bário ($\text{BaSO}_4(\text{ppt- branco})$) e cloreto de cobre II ($\text{CuCl}_2(\text{Aq})$), com este experimento o aluno visualizou como se dá a formação de precipitado, permitindo a melhor compreensão das reações químicas, como mostra a Figura 1. Desta forma, obteve-se aproveitamento da turma com índice de aprovação em química de 96,87%, permitindo concluir que a variedades de metodologias contribuíram para alcançar o índice, bem como estimularam os discentes a terem mais interesse pela química.



Figura1: Demonstração experimental da reação química com formação de precipitado.

REFERENCIAS:

CHASSOT, Ático. **Alfabetização Científica: Questões e desafios para a educação**. Ijuí : Editora UNIJUÍ, 2010.

MALDANER, Otavio **Aloisio**. **A formação inicial e continuada de professores de Química professor/pesquisador**, Ijuí, Ed. Unijuí, 2003.

Dynamic kinetic resolution chemoenzymatic of aromatic sec-alcohols by using a heterogeneous vanadium racemization catalyst and lipase.

Laíza A. Almeida (PG), Thayna H. Marcondes (IC) and Humberto M. S. Milagre (PQ)

humberto.milagre@unesp.br; laiza.almeida@unesp.br

Institute of Chemistry, UNESP - Araraquara, SP

Keywords: enzymatic kinetic resolution, vanadium, lipase, sec-alcohols.

Highlights

Chemoenzymatic dynamic kinetic resolution for the synthesis of enantiomerically pure secondary alcohols. Vanadium-lipase system for chemoenzymatic dynamic kinetic resolution.

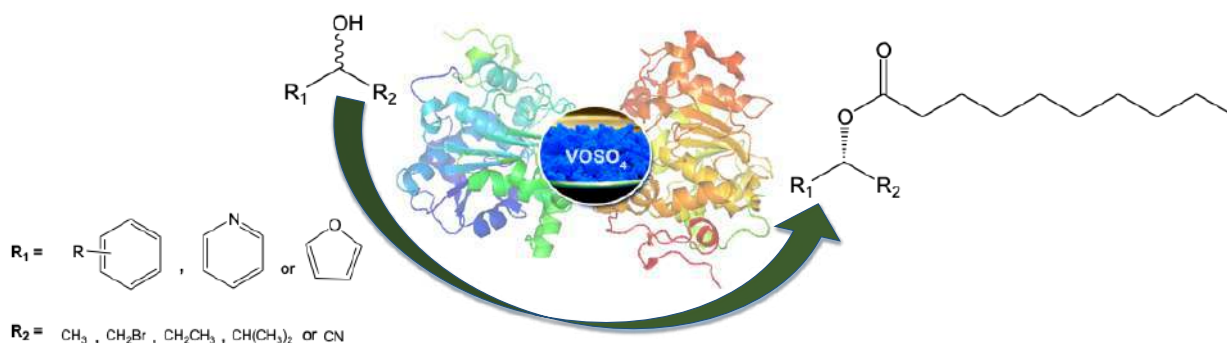
Resumo/Abstract

Optically active secondary alcohols are building blocks for several pharmaceutical, agrochemical and food products. Despite the number of methodologies already described to obtain these compounds, it is still necessary to search for more sustainable and cost-effective methodologies. In this context, this work aimed at the development of a new methodology of chemoenzymatic dynamic kinetic resolution (DKR) for the synthesis of enantiomerically pure secondary alcohols.

For this, the racemization step was evaluated using hydrated vanadyl sulfate ($\text{VO}(\text{SO}_4)_2$) as heterogeneous catalyst, which was very efficient in the racemization of (*S*)-1-phenylethanol ($ee(S) = 1.0\%$ only in 30 minutes, octane, 80°C). Then, reaction conditions of this racemization were optimized by varying solvent, temperature and amount of catalyst, and the reaction in heptane at 50°C ($ee(S) = 4.6\%$) was select as the optimum condition. Furthermore, the recycling of $\text{VO}(\text{SO}_4)_2$ was also evaluated and this catalyst remained extremely active even after 10 racemization cycles.

Then, the DKR reactions were performed in the optimum reaction condition, using rac-1-phenylethanol as substrate, immobilized *Candida antarctica* lipase B (CAL-B) as enantioselective catalyst, $\text{VO}(\text{SO}_4)_2$ as racemization catalyst and evaluating different acyl donors. The reaction with vinyl decanoate was the most efficient, resulting in the product 1-phenylethyl (*R*)-decanoate with 87% conversion and $ee > 99\%$. However, in the recycling of the heterogeneous chemoenzymatic system, there was a significant loss of catalytic activity already in the second cycle.

Finally, in the evaluation of the applicability of the DKR protocol developed for secondary alcohols, high conversions (71 to up to 99%) and excellent enantiomeric excesses (up to 99%) were observed for para-substituted aromatic and heteroatomic sec-alcohols, however for sec-alcohols substituted in the side chain were not observed conversion into the expected esters. The DKR protocol developed in this work can be as a promising alternative for obtaining enantiomerically pure sec-alcohols, having as main advantage the use of eco-friendly and commercially available heterogeneous catalysts ($\text{VO}(\text{SO}_4)_2$ and CAL-B), which make the reaction operational system very easy.



Agradecimentos/Acknowledgments

FAPESP, CNPq and CAPES

Área: FIS

(Inserir a sigla da seção científica para qual o resumo será submetido. Ex: ORG, BEA, CAT)

Nº de Inscrição: 80

(Inserir o número de inscrição do autor que fez a submissão)

Chlorate-iodine-nitrous acid oscillating reaction

João Paulo R. Queiroz (PG), Roberto B. Faria (PQ)*

faria@iq.ufrj.br

Instituto de Química, UFRJ

Palavras Chave: *Oscillating reaction, Chlorate, Nitrous acid, Kinetics*

Highlights

A new chlorate-iodine-nitrous acid oscillating reaction was discovered.

Resumo/Abstract

An oscillating reaction is a very special non-linear dynamical behavior. One of the most studied is the Belousov-Zhabotinsky oscillating reaction (BZ) based on bromate. Many oscillating reactions are known which use bromate as the oxidant species.¹ Recently we discovered the chlorate-iodine-nitrous acid clock reaction,² which indicates that this chemical system has a non-linear kinetic behavior necessary to the oscillating reactions. Starting from the concentrations that produce the clock behavior, we set up the reactant solutions in a continuous stirred tank reactor (CSTR) inserted in the HP8452A spectrophotometer and, after some small modifications in the reactants' concentrations we observed the oscillatory behavior, as shown in the Figure. As can be seen, the oscillations have a frequency of 0.1 Hz, which is significantly higher than other known oscillating reactions.¹ This discovery opens the possibility that a new family of oscillating reactions based on chlorate may exist.

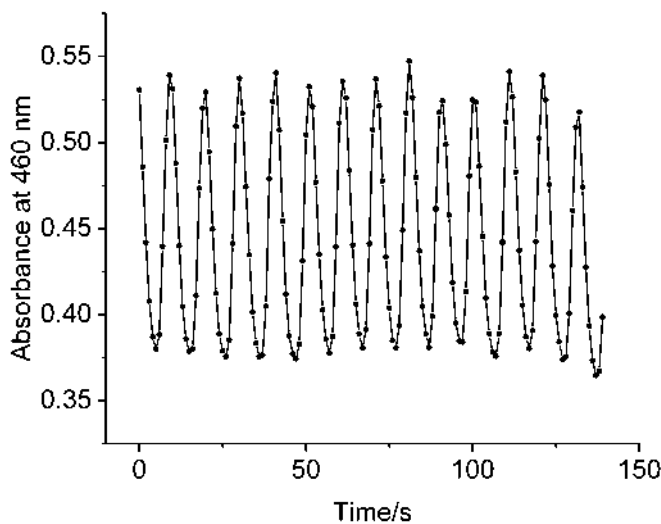


Figure. Oscillating reaction chlorate-iodine-nitrous acid, followed at 460 nm, 24 °C, in a CSTR ($k_0 = 0.005 \text{ s}^{-1}$). Data points were obtained at every 1 s. Other constrains: $[\text{NaClO}_3] = 1.5 \times 10^{-2}$; $[\text{I}_2] = 2.44 \times 10^{-4}$; $[\text{HNO}_2] = 1.5 \times 10^{-3}$; $[\text{HClO}_4] = 0.5$; $[\text{I}^-] = 2.44 \times 10^{-4} \text{ mol L}^{-1}$.

Agradecimentos/Acknowledgments

CNPq, CAPES, FAPERJ. This study was financed in part by the Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior - Brasil (CAPES) - Finance Code 001.

References:

1. Field, R. J.; Burger, M. (eds.), *Oscillations and Traveling Waves in Chemical Systems*, Wiley: New York, 1985.
2. Rafaela T. P. Sant'Anna, Roberto B. Faria, The chlorate-iodine-nitrous acid clock reaction, *PLoS One* 2014, 9, e109899.

Área: MAT

Nº de Inscrição: 00081

Exploring the use of coal fly ash in the synthesis of magnetic zeolites

Armando D.L. Freitas (PG),^{1,*} Adonay R. Loiola (PQ),¹

adiego13.dl@gmail.com; adonay@ufc.br

¹Departamento de Química Orgânica e Inorgânica, UFCPalavras Chave: *Magnetic zeolites, Zeolite composites, Fly ash, Micropores.*

Highlights

Different zeolite and zeolite composite materials were successfully obtained by using coal fly ash as the main silicon and aluminum sources; The use of magnetic portions of fly ash gave rise to zeolite composites with magnetic properties.

Resumo/Abstract

The necessity of “eco-friendly” materials obtained from renewable sources or industrial rejects is of great importance for a society committed to the environment. Coal fly ash (FA) is an important solid waste generated by power electric plants. In this work, we report the synthesis of different zeolites using coal fly ash as an alternative source of silicon and aluminum, as well as the synthesis of magnetic composites of the materials synthesized using magnetic particles extracted from this waste. FA was collected directly from the filters of a thermoelectric plant located at Ceará-Brazil. FA samples were submitted to physical and chemical treatments aiming the removal of interferences in the zeolite synthesis. FA non-magnetic fraction was dissolved in alkaline aqueous solution under heating and mixed with a FA magnetic fraction. Zeolite from the classes LTA, CHA and FAU, with magnetic properties were successfully synthesized via hydrothermal route.

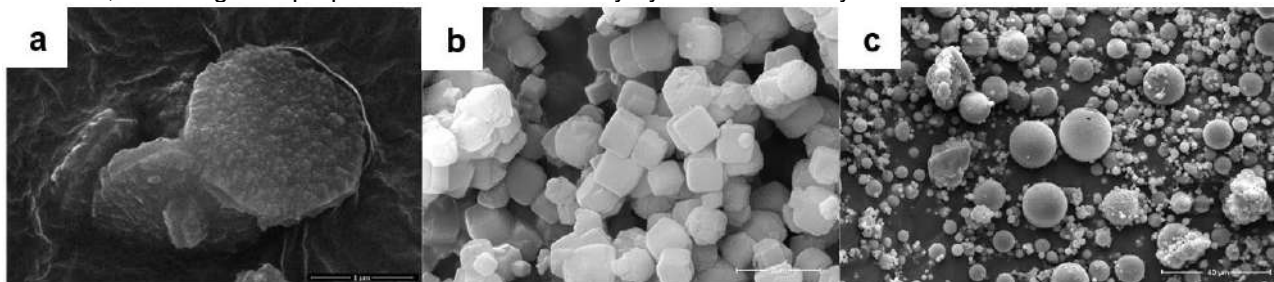


Figure 1. SEM images of (a-b) synthesized zeolite and (c) FA

Combined results of XRD, FTIR and SEM indicate that the sets of treatments applied to FA, can direct to the synthesis of a variety of zeolites and even zeolite composites presenting magnetic properties. Such materials present the advantage of being produced by a cost-effective route combined with the magnetic properties, which can dramatically improve their application in important fields such as adsorption, separation and catalysis.

Agradecimentos/Acknowledgments

The authors would like to thank CAPES for financial support.

Área: BEA

(Inserir a sigla da seção científica para qual o resumo será submetido. Ex: ORG, BEA, CAT)

Nº de Inscrição: 82

(Inserir o número de inscrição do autor que fez a submissão)

Evaluation of the black pepper drying step on the essential oil composition

Matheus B. Rasch (IC),¹ Maria Eduarda M. Juvenato (IC),¹ Otávio A. Heringer (PQ)², Luiza V. Vieira (PG),¹ Geisamanda P. Brandão (PQ),¹ Ricardo M. Kuster (PQ),¹ Maria Tereza W. D. Carneiro (PQ)^{1*}

ipodtheu@hotmail.com; mariacarneiro@hotmail.com

¹Departamento de Química, Universidade Federal do Espírito Santo

²Departamento de Pesquisa e Desenvolvimento – Tommasi Ambiental, Brasil

Palavras Chave: Essential Oil, Black Pepper, GC-MS

Highlights

Essential Oil composition by GC-MS. Evaluation of the different drying methods of black pepper. Mechanical drying determined the greatest loss of essential oil constituents.

Resumo/Abstract

A pimenta-do-reino (*Piper nigrum* L.) é uma das especiarias mais consumidas e comercializadas no mundo.¹ O óleo essencial presente na pimenta é responsável pelas suas propriedades sensoriais e sua quantidade deve ser monitorada para garantir a qualidade do produto.² A qualidade da pimenta está diretamente relacionada à etapa de secagem realizada no beneficiamento, o que pode determinar alterações qualitativas na composição do óleo essencial.³ O objetivo deste trabalho foi avaliar a modificação na composição do óleo essencial de pimenta-do-reino por GC-MS em função de quatro diferentes tipos de secagem: Terreiro (NT), Estufa (NE), Fogo direto (MFD) e Fogo indireto (MFI). O óleo essencial foi obtido pelo método de hidrodestilação com auxílio de um aparelho Clevenger por um período 2,5 h. O material destilado foi analisado por GC-MS, onde foi obtido o perfil cromatográfico.³ Foram observadas modificações significativas tanto na quantidade de compostos evidenciados pela diminuição da quantidade picos quanto na área obtida em cada um deles. Os resultados evidenciam que as secagens por MFD e MFI determinaram a maior perda de constituintes do óleo essencial de pimenta-do-reino.

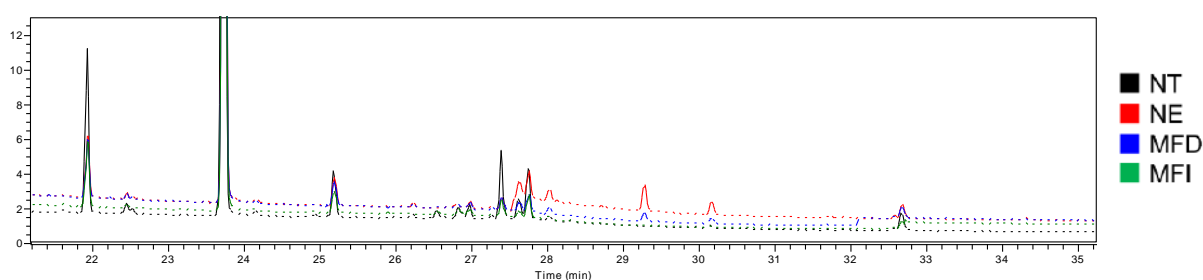


Figura 1: Cromatograma obtido por GC-MS de óleos essenciais de pimenta-do-reino submetidas a quatro diferentes tipos de secagem.

¹NAIR, K. P. P. Agronomy and Economy of Black Pepper and Cardamom: The "King" and "Queen" of Spices. 1. ed. Elsevier, 2011.

²Celestino, S. M. C. Princípios de secagem de Alimentos. Embrapa Cerrados. Planaltina, DF, documento 276, 2010.

³R.P. Adams, Identification of essential oil components by gas chromatography/mass spectrometry, fourth ed., Allured Publishing Corporation, Carol Stream, 2007

Agradecimentos/Acknowledgments

CAPES, FAPES, PPGQUI-UFES, LabPetro/UFES, TOMMASI AMBIENTAL, LEA (Laboratório de Espectrometria Atômica).

Electrochemical studies of phenanthroline derivatives of Ru²⁺ complexes.

Renan Santini Barbosa (IC)¹, Izilda A. Bagatin^{1*}(PQ).

renan.santini@hotmail.com; ibagatin@gmail.com

¹Departamento de Química, ICAQF; Laboratório de Química de Calixarenos, Espectroscopia Molecular e Catálise, UNIFESP, Diadema, SP, Brasil, CEP 09972-230

Palavras Chave:(1,10-phenanthroline-5,6-dione, coordination complexes, cyclic voltammetry, Spectroelectrochemistry, 6-diamino-1,10-phenanthroline).

Highlights

Synthesis of coordination compounds containing 1,10-phenanthroline-5,6-dione, 5,6-diamino-1,10-phenanthroline and transition metals.

Cyclic voltammetry and Spectroelectrochemistry studies of transition metals complexes.

The redox potential of coordination compounds.

Resumo/Abstract

Coordination compounds¹ with luminescent or exciting electrochemical properties² could be formed with phenanthroline derivatives depending on the coordinated transition metal. In this work, we present the electrochemical Ru²⁺ complexes with phenanthroline derivatives. Thus, the following ligands and complexes were synthesized, 1,10-phenanthroline-5,6-dione, 5,6-diamino-1,10-phenanthroline and [Ru(NO)Cl₃(1,10-phen-5,6-dione)]²⁺. The ruthenium complex depicted IR frequency at 1887 cm⁻¹ assigned to $\nu_{\text{N=O}}$, since IR frequency of Ru(NO)Cl₃·5H₂O occurs at 1900 cm⁻¹ showing that the coordination has occurred. The cyclic voltammetry of the ligand in DMF showed $E_{1/2} = -0,337\text{V}$ vs. EPH and $E_{1/2} = -0,017\text{V}$ vs. EPH, characteristic of the reversible pair of 1,10-phenanthroline-5,6-dione ligand. The cyclic voltammetry of ruthenium complex showed $E_{1/2} = -0,00\text{V}$ vs EPH for NO⁺/NO⁰ pair and $E_{\text{pc}} = -0,47\text{V}$ vs EPH for 5,6-phen⁰/5,6-phen⁻ pair. The data of cyclic voltammetry confirm the process is commanded by diffusion as shown in figure 1. Spectroelectrochemical behavior of ruthenium complex (fig. 2) depicted the number of electrons involved in the reversible process ($\cong 1$), which was observed by $E(\text{V}) \times \text{Log}(A_2 - A_1/A_3 - A_2)$ graphic, A = absorbance.

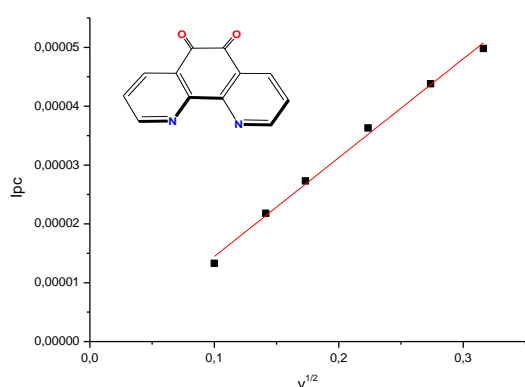


Figure 1: $I_{\text{pc}} \times v^{1/2}$ relation of 1,10-phenanthroline-5,6-dione

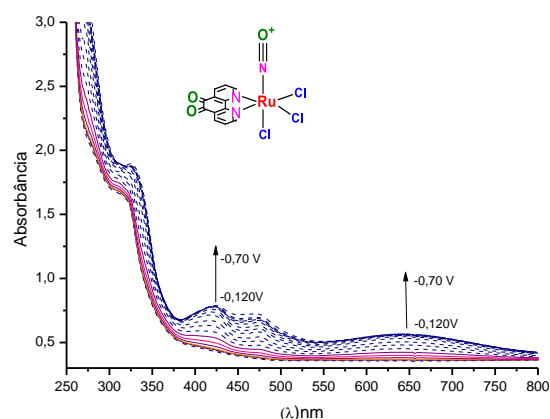


Figure 2: Spectroelectrochemical behavior of ruthenium complex

¹ F. Calderazzo, G. Pampaloni, V. Passarelli, Inorg. Chim. Acta 330, 2002, 136–142.

²T. Lazarides, A. Barbieri, C. Sabatini, F. Barigelletti, H. Adams, M. D. Ward, Inorg. Chim. Acta 360, 2007, 814–824

Análise screening de solos usando imagens digitais e quimiometria

Ana L.P.B. Silva (IC), Leticia M.C. Guimarães (IC), Sabryna E. A. Dantas (IC), Flaubert S.M. Filho (IC), Vanessa S. Dantas (IC), Isabel P. Costa (PG)², Marilene B. Xavier (PQ)¹; Gean B. Costa (PQ)^{1*}

anaurapbs123@gmail.com; geanbc_@hotmail.com

¹Departamento de Química, UFRN; ²Departamento de Química UEPB;^b

Palavras Chave: *Classificação de Solos, Histograma de Cores, Quimiometria*

Highlights

Soil screening analysis using digital images and chemometrics

Development of a methodology based on the use of digital images and chemometric techniques, for the classification of four soil types.

Resumo/Abstract

No Brasil os diferentes solos encontrados são classificados de acordo com os critérios propostos pelo Manual de Classificação de solos da EMBRAPA, onde são citadas 13 classes distintas de solos, classificadas segundo os parâmetros: material mineral, material orgânico, coloração, textura, cerosidade, entre outros¹. Levando em consideração a importância do solo bem como dos parâmetros que inferem sobre a sua classificação, este trabalho apresenta uma metodologia simples, rápida, de baixo custo baseada na utilização de imagens digitais e técnicas quimiométricas para a classificação de quatro tipos de solo: Argissolo, Cambissolo, Gleissolo e Planossolo. Foram analisadas 120 amostras sendo 30 amostras para cada uma das classes. Imagens das amostras de solo foram obtidas a partir de uma webcam e decompostas em histogramas contendo as distribuições de frequência dos níveis de cores RGB, HSI, escala de cinza e suas combinações. Foi realizada uma análise exploratória dos dados utilizando a PCA para avaliar se é possível identificar similaridades e diferenças entre as amostras do conjunto de dados utilizadas na construção dos modelos de classificação. Os dados obtidos a partir de cada histograma foram particionados em conjuntos de treinamento e teste usando o algoritmo KS. Em seguida, foram construídos modelos de classificação SIMCA, PLS-DA e LDA associado ao algoritmo de seleção de variáveis SPA. Para a classificação dos solos o modelo SPA-LDA se destacou por apresentar como resultado 100% das amostras de solos classificadas corretamente. Estes resultados sugerem que o modelo proposto é uma alternativa promissora para classificação de amostras de solos.

Tabela 1 - Matriz de confusão da classificação SPA-LDA para as amostras de solo usando o histograma RGB.

| Classe Verdadeira | | Conjunto de Treinamento | | | | TCC |
|-----------------------|-----------|---------------------------|-----------|------------|-----|------|
| | | SPA-LDA - Classe Prevista | | | | |
| N | Argissolo | Cambissolo | Gleissolo | Planossolo | | |
| 1 | 20 | 20 | - | - | - | 100% |
| 2 | 20 | - | 20 | - | - | |
| 3 | 20 | - | - | 20 | - | |
| 4 | 20 | - | - | - | 20 | |
| Seletividade | | 100 | 100 | 100 | 100 | |
| Especificidade | | 100 | 100 | 100 | 100 | |

| Classe Verdadeira | | Conjunto de Teste | | | | TCC |
|-----------------------|-----------|---------------------------|-----------|------------|-----|------|
| | | SPA-LDA - Classe Prevista | | | | |
| N | Argissolo | Cambissolo | Gleissolo | Planossolo | | |
| 1 | 10 | 10 | - | - | - | 100% |
| 2 | 10 | - | 10 | - | - | |
| 3 | 10 | - | - | 10 | - | |
| 4 | 10 | - | - | - | 10 | |
| Seletividade | | 100 | 100 | 100 | 100 | |
| Especificidade | | 100 | 100 | 100 | 100 | |

TCC = taxa de classificação correta; N = Número de amostras.

Referências

- EMPRESA BRASILEIRA DE PESQUISA AGROPECUÁRIA (2006) Sistema Brasileiro de Classificação de Solos. 286 p.
- Costa, G.B. (2015). Talanta, 139, 50–55.

Agradecimentos/Acknowledgments

UFRN/UEPB

Área: ANA

Nº de Inscrição: 00085

Autenticação de óleos vegetais de soja transgênico e não transgênico utilizando imagens digitais e técnicas de reconhecimento de padrões.

Leticia M.C. Guimarães (IC), Sabryna E. A. Dantas (IC), Ana L.P.B. Silva (IC), Flaubert S.M. Filho (IC), Vanessa S. Dantas (IC), Mateus M. Basílio (IC), Isabel P. Costa (PG)², Marilene B. Xavier (PQ)¹; Gean B. Costa (PQ)^{1*} José G. V. Neto (PQ)²

leticia.medeiros@hotmail.com ; geanbc@hotmail.com

¹Departamento de Química, UFRN; ²Departamento de Química, UEPB

Palavras Chave: Identificação, Óleos Vegetais, Histograma de cores, Quimiometria.

Highlights

Authentication of transgenic and non-transgenic soybean oils using digital images and pattern recognition techniques.

Development of an analytical methodology to authenticate samples of transgenic and non-transgenic soybean oil using digital images and supervised pattern recognition techniques.

Resumo/Abstract

Os óleos vegetais são um dos principais produtos extraídos de plantas e, devido às suas propriedades benéficas, foram incorporados à dieta humana, sendo atualmente um dos produtos mais utilizados no preparo de alimentos¹. Portanto, a verificação de autenticidade dos mesmos torna-se uma tarefa imprescindível. Assim, este trabalho objetivou o desenvolvimento de uma metodologia analítica para autenticar amostras de óleo de soja transgênica e não transgênica, empregando imagens digitais e técnicas de reconhecimento de padrões supervisionadas (SIMCA, PLS-DA e SPA-LDA)². Foram utilizadas 60 amostras de óleos vegetais de soja, sendo 30 amostras de óleos de soja transgênica e 30 amostras não transgênica. Para isso, imagens das amostras foram obtidas a partir de uma webcam e, em seguida, foram decompostas em histogramas contendo as distribuições de frequência dos níveis de cores RGB, HSI, escala de cinza. Na construção dos modelos quimiométricos as amostras foram divididas em conjuntos treinamento (45; 75%) e teste (15; 25%) utilizando o algoritmo Kennard-Stone. Os Modelos SIMCA, PLS-DA e SPA-LDA foram então construídos com validação cruzada. O melhor resultado foi para o modelo PLS-DA com uma taxa de classificação correta de 87,25% e 97,50% para os conjuntos de treinamento e teste respectivamente. Este resultado sugere que o modelo proposto é uma alternativa promissora para autenticação de óleo de soja transgênica e não transgênica. Como vantagem, a análise é rápida, não utiliza reagente.

Tabela – TCC obtida com os modelos SIMCA, PLS-DA e SPA-LDA para a autenticação das amostras de óleo de soja transgênico e não transgênico.

| Histogramas | Classificação Correta (%) | | | | | |
|--------------------------|---------------------------|-------|--------------------------|-------|--------------------------|-------|
| | SIMCA | | PLS-DA | | SPA-LDA | |
| | Treinamento | Teste | Treinamento ^a | Teste | Treinamento ^a | Teste |
| Escala de Cinza | 77.75 | 92.00 | (3) 83.75 | 95.00 | (6) 81.25 | 94.50 |
| RGB | 79.25 | 87.50 | (4) 85.25 | 97.50 | (5) 84.50 | 95.50 |
| HSI | 85.50 | 90.00 | (4) 80.75 | 90.00 | (6) 81.50 | 93.00 |
| Escala de Cinza +RGB | 86.75 | 92.00 | (4) 87.25 | 97.00 | (7) 84.25 | 94.50 |
| Escala de Cinza +HSI | 84.50 | 90.00 | (4) 82.00 | 89.00 | (4) 83.00 | 95.50 |
| RGB + HSI | 80.75 | 92.00 | (4) 87.25 | 97.50 | (6) 80.50 | 94.75 |
| Escala de Cinza +RGB+HSI | 80.00 | 92.00 | (4) 86.50 | 93.00 | (5) 82.75 | 93.75 |

^a O número de variáveis / variáveis latentes selecionados é indicada entre parêntesis

Referencias

- [1] Reda, S.Y.; Carneiro. (2007). Revista Analytica, 27, 60.
 [2] Costa, G.B. (2015). Talanta, 139, 50–55.

Characterization of volatile organic compounds in the city of Nilópolis (Rio de Janeiro) and the protected neighboring area of Gericinó

Graciela Arbilla (PQ),¹ Michelle André (PG),^{1*} Cleiton M. da Silva (PQ).^{1,2}

gracielaiq@gmail.com; michelle.andre.t@gmail.com

¹Instituto de Química, UFRJ; ²Universidade Veiga de Almeida, Campus de Maracanã

Key Words: Volatile Organic Compounds, Ozone Precursors, Urban Emissions.

neighboringHighlights

Air quality in Gericinó Natural Park (Nilópolis, Rio de Janeiro).

Characterization of ozone precursors using Methods TO-11A and TO-15 from US EPA.

Transport of urban emissions to protected areas.

Impact of local vehicular emissions on the protected area air quality.

Resumo/Abstract

Clean air is considered to be a basic requirement for human health and wellbeing. In urban areas, pollutants are mainly due to energy production and vehicular emissions. Air pollutants are transported and eventually impact parks and protected areas, placing visitors and other species at risk of exposure. Volatile organic compounds (VOCs) are important ozone precursors and many of them also represent health risks. In this study VOCs concentrations were determined in two locations of the city of Nilópolis (Rio de Janeiro Metropolitan Region): Gericinó Natural Park (GNP) and Manoel Reis Square (MRS). Carbonylic compounds (CC) and hydrocarbons were determined using Method TO-11A and Method TO-15 from US EPA, respectively.¹ Sampling was conducted in the wet and dry seasons. Experimental results are shown in Figures 1 and 2. In Figure 1, total CC concentrations for GNP and MRS are shown in the wet (GNP1 and MRS1) and dry (GNP2 and MRS2) sampling campaigns. In Figure 2 speciated non-oxygenated VOCs are shown for the two locations during the dry station.

Figure 1. CC concentrations

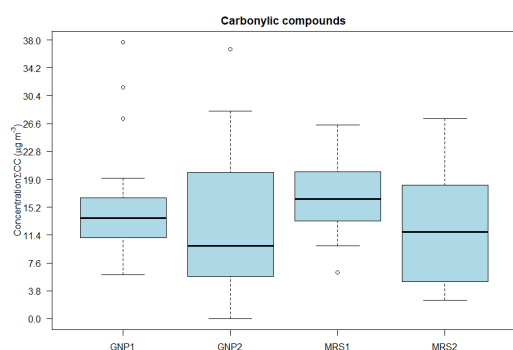
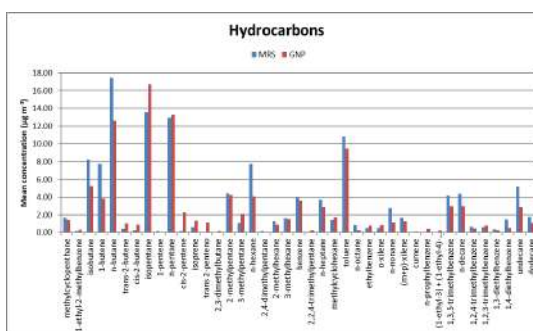


Figure 2. Speciated hydrocarbons



Total mean CC concentrations in the urban and protected area differ in <10%. Total mean hydrocarbon concentrations were approximately 15% higher in the urbanized area. Anyway, statistical analyses showed that the results were not statistically different indicating that the protected area of Gericinó is highly impacted by urban emissions. The local emissions, due to vehicles used to the maintenance of the park and military exercises, may also contribute to air pollution in the GNP.

References:

1. US EPA, 1999. Environmental Protection Agency. Compendium of Methods for the Determination of Toxic Organic Compounds in Ambient Air - Second Edition, Center for Environmental Research Information. <<https://www3.epa.gov/ttnamti1/files/ambient/airtox/tocomp99.pdf>>.

Synthesis and structural, morphological and textural characterization of Iron Zero Valence Nanoparticles

João Roberto Fernandes (PQ)¹, Karen Cristina Inácio (IC),^{1*} Sandra Regina Rissato (PQ),¹ Mário Sérgio Galhiane (PQ),¹ Alberto Gonçalves Vieira de Carvalho Neto (PD)¹.

joao.roberto@unesp.br; karencinacio@gmail.com

¹Departamento de Química, Universidade Estadual Paulista "Julio de Mesquita Filho" – Campus Bauru;

Keywords: nanostructured iron, reduction by borohydride, characterization, synthesis.

Highlights

Obtaining and characterization of Fe⁰ nanoparticles by borohydride for future application in the degradation of recalcitrant substances, through Advanced Oxidative Processes.

Resumo/Abstract

Studies have shown the advantages of using nanoparticles for treatment of chemical pollutants in water resources, given that nanometric materials present higher contact surface, high reactivity and need less quantity of material. These studies state that zero valence iron has great potential for degradation of organochlorine and nitrogenous compounds, which are not treated in an effective way by the traditional methods of effluent treatment due to their high resistance to degradation¹.

This work is justified by the need of a better characterization of the material contributing with the knowledge of removal methods of iron nanoparticles in contact with organic pollutants.

The Fe⁰ nanoparticles were synthesized by the liquid phase reduction method, in alcoholic medium, based on reductive precipitation, using an iron salt and a reducing agent (sodium borohydride - NaBH₄). The obtained samples were characterized as powder to verify the possible crystallization of the material and which crystalline phases are present in the samples, as shown in the diffractogram in Figure 1.

The synthesis in alcoholic medium results in only one diffraction halo at 2θ 45,14 which is characteristic of iron's body-centered cubic structural phase, where the crystallite estimated size through Scherrer's equation is 8.3 nm. The diffractogram shows that the applied methodology prevented the oxidation of Fe⁰, as halos were not detected at 2θ 62,1°, typical of iron oxides².

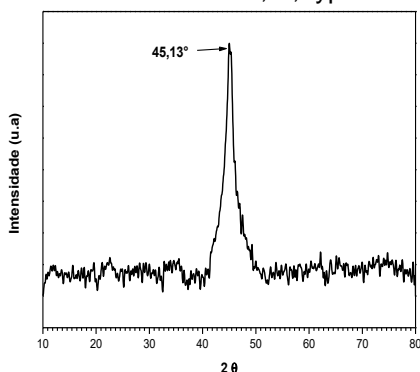


Fig. 1 X-ray Diffractogram in Fe⁰

It was observed that the ethanol not only prevented the oxidation, but also had the ability to stabilize the nanoparticles during the synthesis due to its reduced polarity in comparison to water.

The synthesized particles presented spherical morphology, low agglomeration, homogeneous granulometry and mean diameter of approximately 25 nm. The surface area and the mean diameter of the pores were measured through the BET method, based on the N₂ adsorption desorption. As expected, the nanoparticles presented with surface area (91.48 m²/g) with absorption and desorption isotherms typical of mesoporous solids to which most of the pores had mean diameter of 8.5 nm.

With the given characteristics, allied to the success of the used synthesis method, this nanostructured material shows great potential for environmental remediation processes of effluent contaminated with organic pollutants.

1-MAGALHÃES, L.M.S.; CAMPOS, A.F.C. Aplicação da nanotecnologia como técnica e controle, monitoramento e remediação da poluição química da água. Programa de Pós-Graduação em Biociências Forenses, PUC, Goiás, 2012.

2-SUN, Y. P., LI, X. Q., Zhang, W. X., Wang, H. P. A method for the preparation of table disperdion of zero-valente iron nanoparticles, Colloids and Surfaces A:Physicochem. EngAspects. Vol. 308, p. 60-66,2007.

Área: EDU

Nº de Inscrição: 00088

A presença e inserção da mulher cientista em um Programa de Pós-Graduação em Química: reflexões sobre as questões de gênero

Leice Milla R. Novais (PG),^{1*} Iohana P. Prado (IC),¹ Camila Silveira (PQ).¹ *leicenovais@gmail.com

¹Departamento de Química, UFPR

Palavras-chave: Gênero, Ciência, Mulheres, Pós-Graduação.

Highlights

The presence and insertion of female scientists in a Postgraduate Program in Chemistry: reflections on gender issues. Analysis of the presence and insertion of women in a postgraduate program in the state of Paraná through quantitative data of the students and professors linked to it since its creation.

Resumo/Abstract

As discussões sobre Gênero e Ciência necessitam de ampliação e aprofundamento teórico que possam subsidiar ações para a equidade entre mulheres e homens no campo científico¹. De maneira geral, existem dois tipos de exclusão das mulheres na ciência: a vertical, devido à sub-representação feminina nos cargos de maior prestígio e poder, e, a horizontal, referente ao menor número de mulheres em determinadas áreas do conhecimento². Este trabalho analisa a presença e inserção das mulheres ao longo de 25 anos de um Programa de Pós-Graduação em Química (PPGQ) do Estado do Paraná, por meio de dados quantitativos das(os) discentes e docentes vinculadas(os) a este desde a sua criação. Na Tabela 1, temos o número de discentes e docentes do gênero feminino e masculino organizado por períodos de cinco anos.

Tabela 1. Dados quantitativos de discentes e docentes vinculadas(os) ao PPGQ em 25 anos.

| Período | 1992-1996 | | 1997-2001 | | | | 2002-2006 | | | | 2007-2011 | | | | 2012-2017 | | | | | |
|----------------------|-----------|---|-----------|---|----|----|-----------|---|----|----|-----------|----|----|----|-----------|----|----|----|----|----|
| | Ms | | Dr | | Ms | | Dr | | Ms | | Dr | | Ms | | Dr | | Ms | | Dr | |
| | F | M | F | M | F | M | F | M | F | M | F | M | F | M | F | M | F | M | F | M |
| Ingresso (Di) | 6 | 9 | - | - | 25 | 25 | 12 | 5 | 44 | 68 | 31 | 23 | 67 | 48 | 41 | 40 | 91 | 67 | 90 | 45 |
| Egresso (Di) | 1 | 2 | - | - | 12 | 13 | - | - | 43 | 47 | 18 | 8 | 44 | 49 | 29 | 16 | 88 | 51 | 51 | 46 |
| Docentes | 1 | 8 | - | - | 8 | 16 | 6 | 8 | 16 | 23 | 13 | 15 | 15 | 23 | 14 | 20 | 16 | 22 | 15 | 24 |

Di: Discente; Dr: Doutorado; F: Feminino; M: Masculino; Ms: Mestrado

No período de 1992-1996, 40% das(os) ingressantes eram mulheres; 33,3% se formaram e 11,1% eram docentes orientadoras no Programa. Em 1997-2001, aparecem os primeiros dados sobre o Doutorado, e, assim, temos: i) para o Mestrado: 50% de mulheres ingressantes, 48% egressas, e 33,3% orientadoras; ii) para o Doutorado: 70,6% do total eram mulheres ingressantes, não havia egressas(os), e 42,8% eram orientadoras. De 2002-2006, no Mestrado tivemos: 39,3% de mulheres ingressantes, 47,7% de egressas e 41,0% de professoras; e no Doutorado: 57,4% de ingressantes do gênero feminino, 69,2% egressas, e 46,4% de orientadoras. Na faixa de 2007-2011, no Mestrado foram: 58,3% ingressantes, 47,3% egressas e 39,5% orientadoras; e para o Doutorado: 50,6% ingressantes, 64,4% egressas, e 41,2% orientadoras. De 2012-2017, para o Mestrado: 57,6% ingressantes, 66,3% egressas, e 42,1% orientadoras; para o Doutorado: 66,6%, 52,6% e 38,5%, respectivamente. Apesar dos avanços em relação ao número de mulheres como estudantes no PPGQ ao longo do tempo, não podemos mencionar o mesmo sobre as orientadoras, pois em nenhum dos períodos analisados elas chegaram a ser metade do corpo docente. Este cenário se repete em outras instituições científicas levando à proposição do conceito “labirinto de cristal”, que considera “a representação social de quem faz ciência e do que é ciência, a divisão sexual do trabalho, o conflito entre as culturas científicas e femininas, a hostilização do feminino e suas consequentes violências, o androcentrismo na construção de saberes científicos, a produção e divulgação de conhecimento científico sexista”³ como obstáculos para a participação e ascensão feminina na Ciência.

1 Reznik, G. *et al.* Estudos Feministas 25 (2), 2017.

2 Lima, B. S. Estudos Feministas 21 (3), 2013.

3 Leta, J. Estudos Avançados 17 (49), 2003.

Agradecimentos/Acknowledgments

CAPES, CNPq, Fundação Araucária, FINEP e UFPR pela bolsa e apoio financeiro.

INTERAÇÃO ENTRE HISTIDINA E MONTMORILONITA EM CONDIÇÕES PREBIÓTICAS

Adriana Clara da Silva (IC),^{1*} Cristine E. A. Carneiro (PQ).²

adriana.clara65@gmail.com

^{1,2} Centro de Ciências Exatas e das Tecnologias, Universidade Federal do Oeste da Bahia – UFOB.

Palavras Chave: Química Prebiótica, Origem da Vida, Histidina, Montmorillonita, Adsorção, Água do mar.

HIGHLIGHTS

Interaction between histidine and montmorillonite under prebiotic conditions.

Prebiotic chemistry studies the reactions that may have contributed to the emergence of life on Earth. The adsorption of histidine in montmorillonite in presence of ultrapure water artificial sea water are the focus of this work.

RESUMO/ABSTRACT

A química prebiótica é uma ciência interdisciplinar, voltada para o estudo das reações e processos que podem ter contribuído para o surgimento da vida na Terra. Conjunta-se que minerais podem ter desempenhado um importante papel em reações químicas prebióticas através da proteção de biomoléculas contra a degradação e catalisando a formação de biopolímeros. A fim de avaliar essa hipótese, o objetivo desse trabalho foi avaliar a interação do aminoácido histidina (His) com o mineral montmorillonita em (1) água ultrapura e (2) água do mar artificial de 4.0 bilhões de anos proposta Silva (2019) cuja composição está descrita na Tabela 1. Os testes de adsorção foram realizados adicionando em tubos de 15 mL 500 mg do mineral + 9 mL de solução de His ($720 \mu\text{g mL}^{-1}$) prepara através da dissolução do aminoácido em (1) e (2). As amostras foram agitadas por 24 h e em seguida centrifugadas durante 15 minutos a 3000 rpm. O sobrenadante foi utilizado para quantificação do aminoácido por espectrofotometria no UV em 215 nm.

TABELA 1: Composição da água do mar artificial de 4.0 Ga

| Sal | Concentração (g L^{-1}) |
|---|------------------------------------|
| NaCl | 46,09 |
| MgSO ₄ | 12,54 |
| KCl | 1,41 |
| CaCl ₂ | 3,04 |
| Na ₂ SiO ₃ ·5H ₂ O | $3,78 \times 10^{-3}$ |
| H ₃ BO ₃ | $4,50 \times 10^{-3}$ |
| ZnSO ₄ ·5H ₂ O | $2,41 \times 10^{-6}$ |
| NaH ₂ PO ₄ | $4,40 \times 10^{-4}$ |
| MnSO ₄ | $1,70 \times 10^{-7}$ |
| FeSO ₄ ·7H ₂ O | $2,76 \times 10^{-4}$ |

A histidina adsorveu em maior quantidade sobre o mineral ($11,23 \pm 0,21$ mg de His em 1 g do mineral) quando solubilizada em água ultrapura. Entretanto, houve um decréscimo considerável ($6,28 \pm 0,20$ mg de His em 1 g do mineral) quando o meio foi a água do mar artificial que contém aproximadamente duas vezes mais NaCl que a água do mar atual (Tabela 1). O comportamento observado pode estar relacionado com a presença dos íons na água do mar, que competem pelos sítios de adsorção do mineral. Em água ultrapura essa competição não ocorre. Le Son e colaboradores (1998) estudaram a formação de peptídeos induzida por sal a partir de aminoácidos na presença de montmorillonita e constataram a formação de dipeptídeos mesmo na ausência do mineral. Farias e colaboradores (2014) por sua vez, relataram que a adsorção de aminoácidos em minerais é comumente reduzida em ambientes com concentrações salinas elevadas, constataram ainda que os aminoácidos formam complexos com metais da água do mar, dessa forma, a menor quantidade de histidina livre em solução no sistema pode ter ocorrido em decorrência desse fenômeno.

Como visto, a adsorção de histidina em montmorillonita é reduzida em ambientes com concentrações salinas elevadas. Como os oceanos da Terra prebiótica podem ter sido 1,5 a 2,0 vezes mais salinas do que os oceanos modernos é provável que a adsorção de histidina em montmorillonita não tenha sido decisiva para as reações que levaram ao surgimento da vida.

FARIAS, A. P. S. F. et al. Salinity and pH affect Na⁺-montmorillonite dissolution and amino acid adsorption: A prebiotic chemistry study. *International Journal of Astrobiology*, v. 13, n. 3, 2014.

LE SON, H. et al. Salt-induced peptide formation from amino acids in the presence of clays and related catalysts. *Inorganica Chimica Acta*, v. 272, n. 1–2, p. 89–94, 1998.

SILVA, A. C. et al. Proposição de água do mar artificial e estudo da interação entre aminoácidos e mineral: contribuições para a química prebiótica, Dissertação de mestrado. 95 f. 2019.

AGRADECIMENTOS/ACKNOWLEDGMENTS

À Universidade Federal do Oeste da Bahia – UFOB,

Functionalization of substituted quinoxaline with TMPLi in the presence of ZnCl₂

Victor Hugo Catricala Fernandes¹ (PG), Samuel Remotto Alves Ferreira¹ (PG), Giuliano Cesar Clososki¹ (PQ)*.

catricala@usp.br; gclososki@fcfrp.usp.br

¹Núcleo de Pesquisas em Produtos Naturais e Sintéticos, Universidade de São Paulo, Ribeirão Preto – SP, Brasil

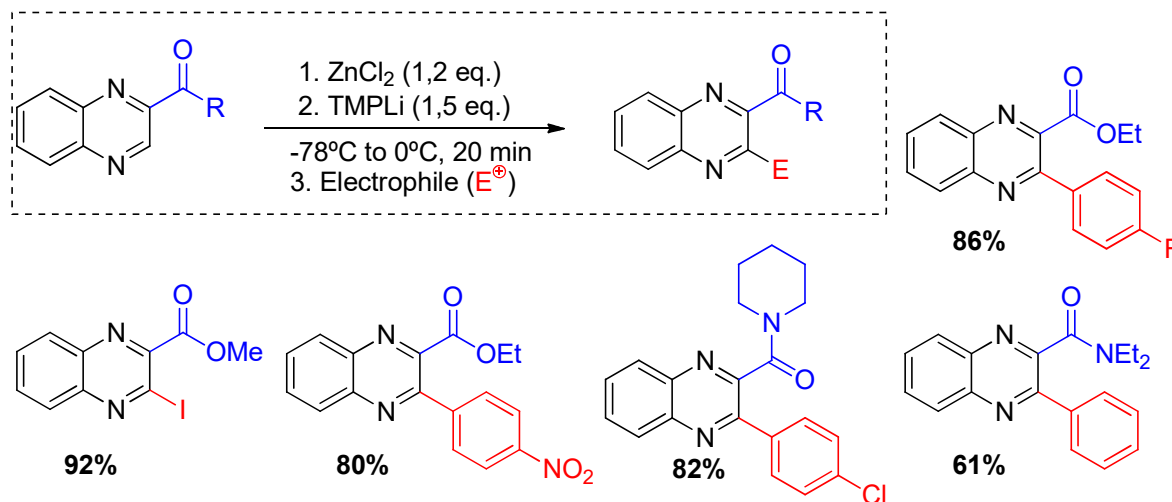
Keywords: Quinoxaline, Functionalization, Metalation, Organozinc compounds.

Highlights

Functionalization of substituted quinoxaline with TMPLi in the presence of ZnCl₂, Negishi coupling evaluated, Synthesis of novel quinoxalines.

Resumo/Abstract

US Food and Drug Administration agency describes that 59% of the approved drugs contain a nitrogen heterocycle, and one of them is the quinoxaline ring that shows different applications.¹ An important synthetic tool, the use of lithium amides, make possible the functionalization of N-heterocycles, but for some substrates bearing sensitive functional groups, undesired products towards the low selectivity of those bases are furnished. To overcome this problem, the precomplexation of ZnCl₂ with the substrate before adding lithium amides is a satisfactory strategy for functionalization methods.² Given the stability of the organozinc compound and our interest in the functionalization of heterocycles,³ we report the selective metalation of 2-substituted quinoxaline with TMPLi (TMP = 2,2,6,6-Tetramethylpiperidine) in the presence of ZnCl₂. Upon varied electrophiles and coupling via Negishi conditions, the organozinc intermediates led to functionalized quinoxalines, including new ones, in reasonable yields (**Scheme 1**).



Scheme 1

References:

1. a) Vitaku, E.; Smith, D. T.; Njardarson, J. T. *J. Med. Chem.* **2014**, 57, 737, 10257. b) Tariq, S.; Somakala, K.; Amir, M., *Eur. Jour. Of. Med. Chem.* **2018**, 143, 542-557.
2. dos Santos, F.; Batista, J.; Vessecchi, R.; Clososki, G. C., *Synlett* **2015**, 26, 2795.
3. a) Bozzini, L. A.; Batista, J. H. C.; de Mello, M. B. M.; Vessecchi, R.; Clososki, G. C. *Tetrahedron Lett.* **2017**, 58, 4186. b) Murie, V. E.; Nishimura, R. H. V.; Rolim, L. A.; Vessecchi, R.; Lopes, N. P.; Clososki, G. C., *J. Org. Chem.* **2018**, 83, 871.

Agradecimentos/Acknowledgments

This work was partially supported by FAPESP, CAPES, CNPq and the FINEP.

Synthesis of new 3-((1*H*-tetrazol-5-yl)thio)-1-indoles against the ESKAPE pathogens.

Edilma E. Silva (PG)¹, Denis D. Viana (IC)¹, Gustavo P. Silveira (PQ)¹

edilmaelayne@gmail.com; gustavo.silveira@iq.ufrgs.br

¹Departamento de Química Orgânica - Instituto de Química - Universidade Federal do Rio Grande do Sul
Palavras Chave: (Indol, Tetrazol, Atividade Antimicrobiana, ESKAPE).

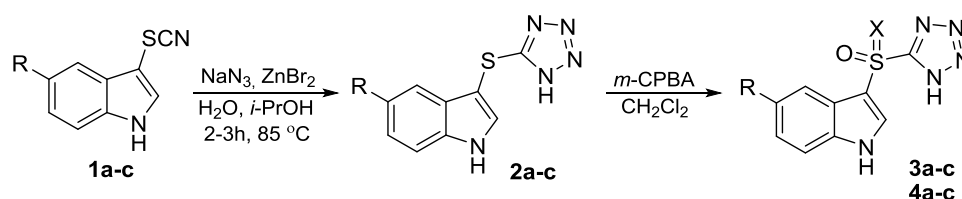
Highlights

Nova geração de indol-tetrazóis foi sintetizada. Estes apresentaram atividade antimicrobiana frente Gram-positivas do painel ESKAPE e *E. coli* contribuindo para melhorar estudos de relação estrutura/atividade de seus análogos indólicos contendo enxofre.

Resumo/Abstract

Recentemente, reportamos a atividade antimicrobiana de uma série de sulfóxi- e sulfonas-indol (MIC 4-32 µg/ml) frente a patógenos do painel ESKAPE¹. Visando o aumento da potência desta classe de compostos sem perder os parâmetros físico-químicos já aprimorados, realizamos a síntese de uma nova biblioteca. Reação entre tiocianatos-indol **1a-c** e azoteto de sódio, na presença de brometo de zinco levou ao indol-tetrazol **2a-c** em 93–97% rendimento². Subsequente oxidação de **3a-c** com *m*-CPBA gerou os sulfóxidos **3a-c** (1 eq.) ou sulfonas **4a-c** (2 eq.), respectivos.

Tabela: CIM (µg/mL) da biblioteca prospectada frente às bactérias Gram-positivas e *E. coli*.



| | R | X | Mssa Molecular | Clog P ⁺ | <i>S. aureus</i> ATCC 33591 | <i>S. aureus</i> ATCC 25923 | <i>E. coli</i> ATCC 25922 |
|-----------|-----|----|----------------|---------------------|-----------------------------|-----------------------------|---------------------------|
| 2a | H | – | 217 | 1,86 | 64 | 64 | >128 |
| 2b | Br | – | 294 | 2,90 | 32 | 64 | 128 |
| 2c | OBn | – | 323 | 3,66 | 64 | 128 | >128 |
| 3a | H | .. | 233 | -0,05 | 128 | >128 | 64 |
| 3b | Br | .. | 310 | 0,94 | 32 | 32 | 16 |
| 3c | OBn | .. | 339 | 1,80 | 32 | 64 | >128 |
| 4a | H | O | 249 | 0,37 | 64 | 64 | 64 |
| 4b | Br | O | 326 | 1,23 | 8 | 8 | 16 |
| 4c | OBn | O | 355 | 2,19 | 64 | 64 | >128 |

Calculado Chemdraw

Os sulfetos **2a-c** apresentam baixa atividade frente a bactérias Gram-positivas. Oxidação de **2a** e **2c** não resultou em melhoria das CIMs, Tabela. Porém, conforme observado em estudos anteriores¹, presença de bromo na posição 5- do anel indólico mostrou mais uma vez ser importante para o aumento da atividade dos compostos (**3b** e **4b**, CIM 8-16 µg/mL). Devido aos resultados promissores obtidos para **3b** e **4b** frente à *E. coli* (CMI 16 µg/ml) empregada como modelo, estes derivados indólicos serão prospectados frente aos patógenos Gram-negativos do painel ESKAPE. Finalmente, baixa hidrofobicidade calculada para **3b** (Clog P 0,94) e **4b** (Clog P 1,23), além de massa molecular < 400 g/mol apontam para *Hits* com características adequadas para o desenvolvimento de antimicrobianos que possam ser utilizados por via oral.

¹ Silva, E.E.; Silveira, G.P. *RASBQ* 2018, MED 052.

² Kuhn, B. L.; Kaufman, T.S.; Silveira, C.C. *Tetrahedron Lett.* 2014, 55, 1648–1652.

Área: INO

Nº de Inscrição: 00093

Síntese e Caracterização de um Sistema Molecular a partir de Cobre(II) e um Ligante Derivado Carboxílico de Oxima Fenólica

Pedro Martins Santucci (IC),^{1*} Raphael Capruni Andrade Vaz (PG),¹ Wdeson Pereira Barros (PQ).¹wdeson@unicamp.br; p204704@dac.unicamp.br¹Instituto de Química, Unicamp

Palavras Chave: (Magnetismo Molecular, Redes Metalorgânicas, Compostos de Coordenação).

Highlights

Synthesis and characterization of a molecular system from copper(II) and a carboxylic phenolic oxime derivative as ligand. A systematic study of crystallization of a complex containing Cu(II) and the 3-formyl-4-hydroxybenzoic acid oxime as ligand was carried out to obtain a MOF since the ligand can act as a bridge.

Resumo/Abstract

O uso de ligantes como as oximas fenólicas possibilitam o preparo de sistemas magnéticos moleculares com diversos tipos de estrutura uma vez que apresentam diversos modos de coordenação.¹ Aliado a isso, a adição de um grupo carboxílico possibilita a extensão do sistema em uma, duas ou três dimensões, já que o ligante pode apresentar os sítios de coordenação orientados em várias direções, podendo atuar como ponte. Dessa forma o uso desse ligante na preparação de sistemas contendo metais de transição pode ser explorado a fim de obter complexos metálicos polinucleares, na forma de redes metalorgânicas (Molecular Organic Frameworks – MOF's)^[2,3], com diferentes propriedades magnéticas. É possível ainda obter diferentes estruturas moleculares ao variar condições reacionais como proporção metal-ligante e controle de solvente, contra-íon, temperatura e pH do meio. Por esta razão, são apresentados os resultados da preparação do sistema contendo o ligante oxima do ácido 3-formil-4-hidroxibenzoico (H₃fhbo) e Cu(II) (composto 1).

O pré-ligante H₃fhbo foi sintetizado e caracterizado por espectroscopia na região do infravermelho e de RMN (¹H, 500 MHz, DMSO-d₆), que apontou sinais referentes ao produto esperado (singleto em 8,37 ppm; duplete em 8,15 ppm; duplo duplete em 7,8 ppm, singleto em 2,5 ppm e duplete em 6,97). O composto 1 foi preparado a partir da reação entre H₃fhbo (1,4 mmol) e perclorato de cobre(II) (1,4 mmol) em dmsO, na presença de trietilamina (4,2 mmol). A solução resultante foi colocada para difundir lentamente com acetonitrila, levando à formação de um sólido cristalino de coloração marrom. Algumas variações das condições de síntese do composto 1 como uso de etanol no lugar de acetonitrila ou variação da proporção entre a solução de 1 e etanol/acetonitrila não alteraram as características do sólido marrom, como observado nos resultados de espectroscopia de absorção na região do infravermelho (IV) e difração de raios X de policristais (DRX). Os dados de espectroscopia IV indicaram coordenação do íon metálico ao ligante já que algumas das bandas características do ligante livre desaparecem (O-H da oxima) e outras foram deslocadas em função da mudança na vibração pela presença do íon Cu(II). Dados de espectroscopia de absorção na região do UV-Vis da solução do complexo em dmsO mostraram bandas características de transferência de carga metal-ligante na região abaixo de 400 nm e uma banda larga entre 500 e 800 nm (máximo em 614) compatível com uma transição d-d, o que está de acordo com o espectro de um complexo metálico de Cu (II). Os dados de DRX de policristais mostram que o sistema preparado é cristalino e análise em microscópio ótico indicaram a presença de monocristais. Entretanto, estes cristais não apresentaram padrão de difração ao serem submetidos a DRX de monocristal, provavelmente devido às suas dimensões reduzidas. Dessa forma, futuras otimizações das condições de cristalização podem contribuir para a obtenção de cristais adequados para DRX de monocristal.

Referências:

[1] Smith, A.G.; Tasker, P.A.; White, D.J. *Coord. Chem. Rev.* **2003**, 241, 61.[2] S. Lee, T. Ogawa, *Chem. Lett.* **2017**, 46, 10–18.[3] S. Dhers, H. L. C. Feltham, S. Brooker, *Coord. Chem. Rev.* **2015**, 296, 24–44.

Agradecimentos/Acknowledgments



Polycyclic Aromatic Hydrocarbons (PAHs) in soils of Awotan-Asunle (Nigeria) and São Paulo (Brazil): concentrations, sources and toxicity.

¹Yendry J. Parra (PG), ²Paulo H. A. A. Lima (IC), ¹Sofia E. Caumo (PG), ³Oyedibu O. Oyebayo (PG), ³Olajumoke A. Morinikeji (PQ), ¹Pérola C. Vasconcellos (PQ).

yjomolcaparra@gmail.com; perola@iq.usp.br

¹Institute of Chemistry, University of São Paulo, IQUSP; ²Institute of Geosciences, University of São Paulo, IGcUSP;

³Ecology and Environmental Biology Unit, Zoology Department, University of Ibadan, Nigeria.

Keywords: (PAH in soils, Carcinogenic compounds, Soil pollution, Benzo(a)pyrene equivalent).

Highlights

PAHs are persistent organic contaminants, some are toxic and carcinogenic. The African and Brazilian soils presented pollutants coming from different sources. Nigerian samples presented higher PAH concentrations, TEQ_{BaP} and TEQ_{car} than the Brazilian soil.

Abstract

PAHs are compounds that are strongly related to anthropogenic activities, such as residential, industrial and transport and some present mutagenic and carcinogenic properties. This study aimed the determination of PAHs to assess the sources and the carcinogenicity potential of soils collected in Awotan-Asunle (landfill area, the Southwestern Nigeria) and in São Paulo (campus of the University of São Paulo). Samples collected at different sites were analyzed for 15 PAHs using chromatography (GC/MS). Σ PAH ranged from 489 to 5617 $\mu\text{g kg}^{-1}$ for Nigerian soils and 2527 $\mu\text{g kg}^{-1}$ for soil collected in Brazil (one sample collected for comparison). The highest values were observed for phenantrene (PHE), fluoranthene (FLN), pyrene (PYR), benzo(a)pyrene (BaP), indenopyrene (Ind) and coronene (COR), varying between 40-70% for African samples (Figure 1). For Brazilian sample, Ind, Benzo(b)fluoranthene (BbF), FLN, benzo(ghi)perilene (Bper) and BaP, representing 50% of the pollutants studied. The diagnostic ratios of low molecular weight/high molecular weight and fluoranthene/fluoranthene+pyrene showed that the PAHs came mainly from petrogenic sources and are emitted during the combustion of gasoline, coal, wood and other biomasses (Figure 2). The average concentration of benzo(a)pyrene equivalent (TEQ_{BaP}) and the coefficient of carcinogenic toxicity (TEQ_{car}) were 144 and 172 $\mu\text{g kg}^{-1}$ for Nigerian soil samples, and 151 and 217 $\mu\text{g kg}^{-1}$ for the Brazilian sample. Considering individual samples, African ones presented higher values (1681 $\mu\text{g kg}^{-1}$ and 1759 $\mu\text{g kg}^{-1}$) than the Brazilian soil.

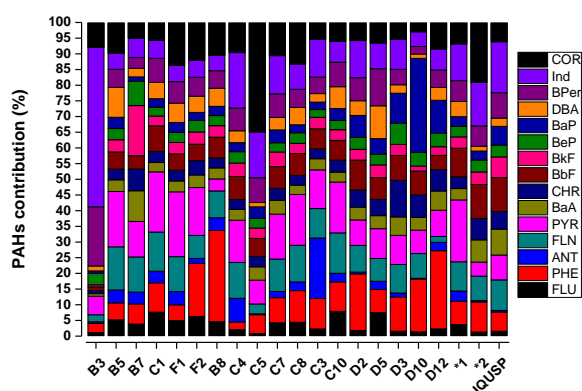


Figure 1. PAH contribution for the soil samples

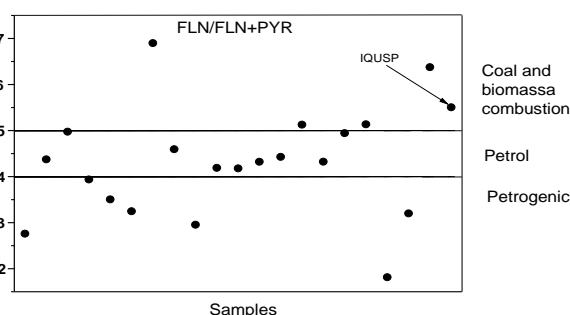


Figure 2. Diagnostic ratios for source determination.

Área: QPN

Nº de Inscrição: 00096

Volatile constituents from the leaves of two Myrtaceae species

Víctor de C. Martins (PG)^{1*}, Mario Geraldo de Carvalho (PQ)¹, Ronoel L. de O. Godoy (PQ)², Liliana P. França (IC)¹, Yasmim da S. Ferreira (IC)¹, Sidney Pacheco (PQ)², Marcelo da C. Souza (PQ)³.

mgeraldo@ufrj.br; victor.dcmartins@gmail.com

¹Departamento de Química Orgânica, UFRRJ; ²Laboratório de Cromatografia Líquida, Embrapa Agroindústria de Alimentos; ³Departamento de Botânica, UFRRJ.

Keywords: Myrtaceae, volatile, *Eugenia copacabanensis*, *Myrciaria tenella*, hydrodistillation.

Highlights

- The volatile extract of *Myrciaria tenella* leaves presented mostly non-oxygenated terpenes (66.85%).
- For the extract of *Eugenia copacabanensis*, the values of caryophyllene oxide (43.79%) and oxygenated sesquiterpenes (66.96%) were highlighted.

Abstract

The Myrtaceae family presents great importance in Brazilian biodiversity for its high rate of endemism and great cultural and economic importance.¹ In Rio de Janeiro, some species are present in areas of restingas, which has been endangered due to the expansion of real estate, such as *Myrciaria tenella* (DC.) O.Berg, popularly known as "murta-do-campo" or "cambuí", and *Eugenia copacabanensis* Kiaersk., known as "princesinha-de-Copacabana". The objective of this work was to determine the profile of the volatile constituents of leaves of these two Myrtaceae species.

The leaves were collected in March 2018 at Marambaia restinga (Rio de Janeiro - RJ), with confirmation of the taxonomic identifications by the botanist Marcelo da C. Souza (ICBS-UFRRJ). The leaves were dried for 7 days at room temperature and protected from sunlight and then ground in a blender. The extraction was carried out in triplicate by hydrodistillation using Clevenger apparatus for 4 h, using 25 g of dry leaves and 300 ml of distilled water. Due to the emulsified product, 5 partitions were made with 6 mL of dichloromethane. The new product was concentrated in a rotary evaporator under vacuum (without heating) to similar viscosity to that of an essential oil. Drying with sodium sulfate was performed to remove excess water. The substances were identified by gas chromatography (stationary phase of medium polarity - 5% phenyl and 95% dimethylpolysiloxane) with flame ionization detector and mass spectrometry and comparison of the obtained data (linear retention index and spectra of mass) with literature.

The yield of the volatile fractions of *M. tenella* and *E. copacabanensis* leaves were respectively $1.58 \pm 0.67\%$ and $1.93 \pm 0.58\%$. In volatile fraction of *M. tenella*, 30 terpenes of 39 detected components were identified: 8 hydrocarbon monoterpenes (total relative percentage of 33.98%), 4 oxygenated monoterpenes (4.10%), 13 hydrocarbon sesquiterpenes (32.87%) and 5 oxygenated sesquiterpenes (12.65%). The major compounds were α -pinene (16.95%) and β -pinene (14.71%), similar to the result of Schneider et al.²; and *E*-caryophyllene (12.60%), also present mainly in studies by Andrade et al. and Apel et al.^{3,4}, and aromadendrene (10.43%). For *E. copacabanensis*, 40 terpenes were identified from a total of 43 components detected. 4 hydrocarbon monoterpenes (total relative percentage of 5.99%), 8 oxygenated monoterpenes (4.08%), 19 hydrocarbon sesquiterpenes (15.80%), 8 oxygenated sesquiterpenes (66.96%) and 1 hydrocarbon diterpene (0.53%) were identified, with caryophyllene oxide was the major constituent (43.79%). This result differs from that found by Arruda & Victório⁵, in which hydrocarbon monoterpenes were predominated in leaves collected in the Marambaia restinga, but using solid-liquid extraction with dichloromethane for 90 min. Analysis of the extracts of the dried leaves of *M. tenella* and *E. copacabanensis* allowed determining their volatile constituents, favoring the study of the application in biological tests.

Acknowledgments

This study was financed in part by the Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior - Brasil (CAPES) - Finance Code 001.

¹FORZZA, R. C. et al. INSTITUTO DE PESQUISAS JARDIM BOTÂNICO DO RIO DE JANEIRO. Catálogo de plantas e fungos do Brasil [online]. Rio de Janeiro: Andrea Jakobsson.

²SCHNEIDER, N. F. Z. et al. Revista Brasileira de Farmácia, **2008**, 89, 131.

³ANDRADE, E. H. A. et al. Journal of Essential Oil Research, **2006**, 18, 93.

⁴APEL, M. A. et al. Pharmaceutical Biology, **2010**, 48, 433.

⁵ARRUDA, R. C. O.; VICTÓRIO, C. P. Journal of Essential Oil Research, **2011**, 23, 1.

Síntese e avaliação farmacológica de novas 3-(1,2,3-triazol)-cumarinas planejadas para o tratamento da Doença de Alzheimer

Nathalia Fonseca Nadur (PG)^{1*}, Daiana de Fatima Portella Franco (PG)¹, Gabriela Alves de Souza (PG)¹, Luciana Luiz de Azevedo (PG)¹, Arthur Eugen Kümmerle (PQ)¹.

nathaliafn18@gmail.com

¹ Departamento de Química Orgânica, Instituto de Química, UFRRJ

Palavras Chave: Cumarina, triazol, Acetilcolinesterase, Agregação de placas β -Amiloide, Doença de Alzheimer

Highlights

Synthesis and pharmacological evaluation of new 3-(1,2,3-triazole)-coumarins planned for the treatment of Alzheimer's Disease. The compounds were designed as possible inhibitors of the AChE enzymes and the aggregation of β -amyloid plaques ($A\beta$). The inhibitory activity of the compounds obtained was determined against AChE.

Resumo/Abstract

A Doença de Alzheimer (DA) é uma afecção neurodegenerativa progressiva e irreversível de aparecimento insidioso, que acarreta perda da memória e diversos distúrbios cognitivos¹. O uso de compostos híbridos com potencial inibidor para mais de um alvo, como a enzima acetilcolinesterase (AChE) e a agregação de placas β -Amiloides ($A\beta$), vem sendo apontado como de grande valia para o tratamento da DA devido a possibilidade de inibir simultaneamente alvos que contribuem para a instalação e manutenção da doença. Desta forma, objetivo geral deste trabalho é a síntese e a avaliação farmacológica das novas cumarinas-triazolicas planejadas como possíveis inibidores das enzimas AChE e da agregação placas β -Amiloides ($A\beta$) para o tratamento da DA. A etapa sintética inicia-se pela síntese da 7-hidroxicumarina através de uma condensação de Pechmann, com rendimento de 70%. Posteriormente, realizou-se uma reação de O-alkilação com uma série de dibrometos com diferentes tamanhos de cadeia, com rendimento entre 46 e 71%. Em seguida foi realizado a bromação da posição 3 do núcleo cumarínico via reação de bromação, com rendimentos entre 77 e 88%. Na etapa seguinte foi realizado a reação de acoplamento cruzado de Sonogashira obtendo-se rendimentos entre 38 e 54%. Posteriormente, o alcino formado foi submetido a uma reação de desproteção com rendimentos entre 76 e 94%. Paralelamente, as azidas foram sintetizadas através da reação de diazotação entre aminas aromáticas e a azida de sódio. Em seguida foi então realizado uma reação de "Click Chemistry" entre os alcinos e as azidas, levando a formação do heterociclo 1,2,3-triazol, com rendimentos entre 61 e 79%. Por fim, foi realizada uma reação de aminação na cadeia alquímica, levando aos compostos finais com rendimento variando entre 52 e 86%. Afim de determinar a atividade inibitória dos compostos obtidos frente à AChE, os compostos foram ensaiados e apresentaram valores de CI_{50} variando de 1,31 a 2,94 μ M. A síntese dos compostos planejados está sendo executada de forma satisfatória e os resultados farmacológicos estão de acordo com o planejamento dos compostos.

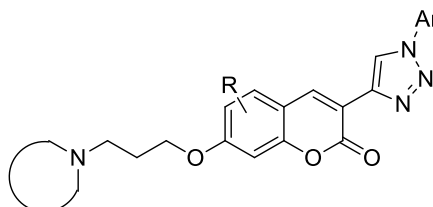


Figura 1: Estrutura das novas 3-(1,2,3-triazol)-cumarinas planejadas

¹LIU, Zhidong et al. Two decades of new drug discovery and development for Alzheimer's disease. RSC Advances, v. 7, n. 10, p. 6046-6058, 2017.

Agradecimentos/Acknowledgments

O presente trabalho foi realizado com apoio da Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior - Brasil (CAPES) - Código de Financiamento 001, CNPq, FAPERJ e UFRRJ.

Área: EDUNº de Inscrição:
ID: 00098

Corrosion and Environment – Active Methodology in Chemistry Laboratory

Mariana S. N. Vargas (IC),¹ Cristiane M. Hottz (IC),¹ Vitor E. M. Maciel (IC),¹ Viviane Amorim (TC),² Mateus C. Amaral (PQ),¹ Vanessa E. de Oliveira (PQ)^{2*}

vanessaend@id.uff.br

¹Departamento de Engenharia de Produção, UFF, Campus Universitário de Rio das Ostras; ²Departamento de Ciências da Natureza, UFF, Campus Universitário de Rio das Ostras.

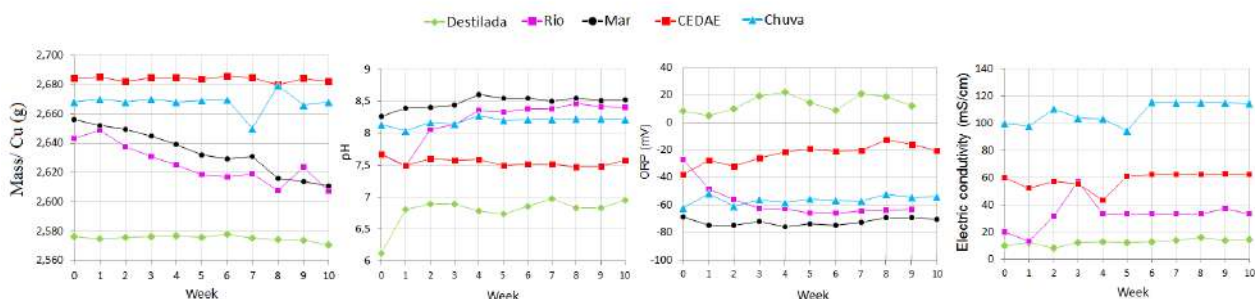
Palavras Chave: *Active methodology, Corrosion, Copper, Potability.*

Highlights

Corrosion and Environment – Active Methodology in Chemistry Laboratory. In this work, was monitored the copper corrosion rate in different water samples. Laboratory techniques and appropriate science were employing to teach chemistry to engineering students. Active methodology has been used, in this case, the students were responsible for weekly measures, its treatment and analysis, as well its social and industrial implications. To achieve this goal were performed several physical chemistry measurements, e.g. pH, ORP, and electric conductivity. Over ten weeks were collected data of five replicates of each water sample considered, totaling 25 systems. Each system is formed by the respective water sample and 15 cm cable of copper inside a PET bottle. Besides provide an increment in the students' knowledge, such arrangement of work allows them to speculate about their environment in several perspectives.

Resumo/Abstract

Corrosion is a spontaneous chemical or electrochemical process of environmental elements, mainly metals. Besides metallic losses, has to be considered such impact on the water environments, through some potability parameters (pH, ORP, and conductivity). Laboratory techniques, pertinent theory were employing to teach science using active methodology to reach it. Engineering students were responsible for the following measures, its treatment, analysis, social implications etc. This work reports the data of 2.5 months week-long measurements of 4 types of water, e.g., sea, river, CEDAE, rain, and copper metal as test specimen (cables of 10.40 mm). It was observed mass losses for all systems analyzed, it was higher after the sixth week and more visible for the metal on the sea sample (-1.69 %), the smaller loss was observed for the CEDAE samples (-0.0745 %). The pH data shows noteworthy variation of +31 % for the river water and, the smallest result was observed for the rain samples (-0.37 %); highlighting the pH decrease of CEDAE samples (-1.2 %). The electric conductivity values present an increment in its amounts, it was more substantial in the first 4 weeks; such behavior has been observed for ORP and pH data. The oxidation-reduction potential (ORP) of the river water was the most weighty among all samples; it presents an increase of 372.9 %. The river samples shows a higher corrosive capacity, an ionizing alkaline feature (\downarrow ORP, \uparrow pH), this was already expected due its residual character.



Total and partial oxidation of agarose using TEMPO/TCCA

Janaina Gomes Heuko (PG)^{1*}, Maria Eugênia Duarte Nosedá (PQ)¹, Alan Guilherme Gonçalves (PQ)², Miguel Daniel Nosedá (PQ)¹, Diogo Ricardo Bazan Ducatti (PQ)¹

ducatti@ufpr.br; janaina.gheuko@gmail.com

¹Departamento de Bioquímica e Biologia Molecular, UFPR; ²Departamento de Farmácia, UFPR

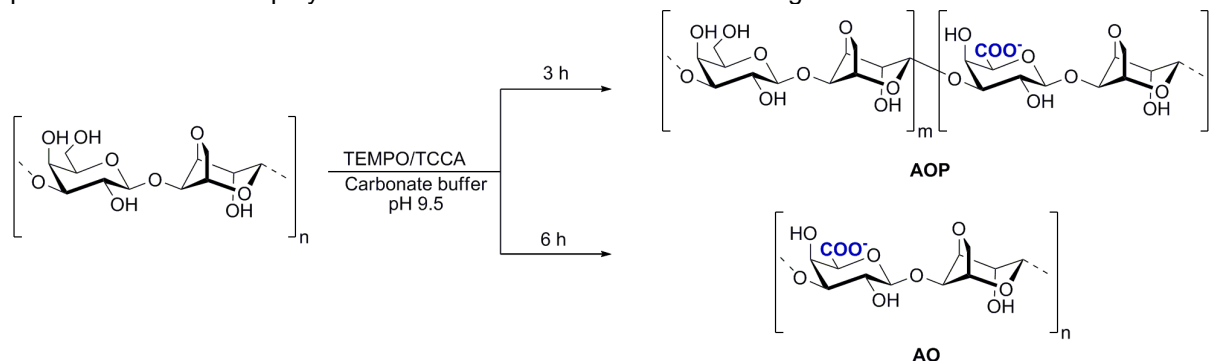
Keywords: agarose, polysaccharide modification, TEMPO oxidation, TCCA.

Highlights

Agarose was fully or partially C6 oxidized at β -D-Galp units using TEMPO/TCCA. The oxidized agarose derivatives were characterized by FT-IR, 1D and 2D ¹H and ¹³C NMR.

Abstract

Chemical modification of biopolymers is used to produce functionalized molecules with broad applications. Novel chemical functionalities added in the polysaccharide backbone can serve as reactive groups to link bioactive molecules or increase biological properties. In addition, regioselective modification of polysaccharide is important for the design of new biomaterials in order to associate biologically relevant properties within the polymer structure. Agarose is an interesting polysaccharide for chemical modification due to its great production worldwide and potential application in regenerative medicine. The aim of this work was the synthesis of fully and partially oxidized agarose derivatives using 2,2,6,6-tetramethylpiperidine-1-oxyl (TEMPO) and trichloroisocyanuric acid (TCCA) as oxidants. Agarose was dispersed in water at 90 °C and cooled to room temperature. Afterwards, it was added a 100 mM carbonate buffer solution (pH 9.5), TEMPO and TCCA at 0 °C. In order to produce oxidized derivatives with different oxidation degrees, two different reactions were performed. The first one was stirred at room temperature for 6 hours to produce the fully oxidized agarose (AO), while the second reaction was performed for 3 hours to give the partially oxidized polysaccharide (AOP) (Scheme 1). The oxidized products were precipitated with ethanol, dialyzed against water, concentrated under reduced vacuum and lyophilized. FT-IR spectra of oxidized agarose derivatives showed a band at 1600 cm⁻¹, which was attributed to the symmetrical stretching of -COO⁻ groups. Also, the colorimetric assays showed 43% and 21% (w/w) of galacturonic acid for AO and AOP polysaccharides, respectively. Together, these results confirmed the oxidation of agarose. It was observed in the ¹H-¹³C HSQC spectra of AO and AOP the decrease of the correlation at 63.3/3.75 ppm correspondent to C6/H6 of β -D-Galp units. A new correlation at 77.2/4.16 ppm was observed, which was attributed to C5/H5 of β -D-Galp units. The degree of oxidation was calculated by integrating the correlation area of C5/H5 of oxidized (β -D-Galp) and non-oxidized (β -D-Galp) units. The results indicated 97% and 51% of oxidation for AO and AOP, respectively. In conclusion, agarose was fully and partially C6 oxidized. The biological properties of these novel polysaccharide derivatives are under investigation in our laboratories.



Scheme 1. Synthesis of oxidized agarose derivatives.

Acknowledgments

This work was supported by PRONEX-Carboidratos - Fundação Araucária, CAPES (Finance code 001) and CNPQ (Universal 14/2013).

Área: ELE

(Inserir a sigla da seção científica para qual o resumo será submetido. Ex: ORG, BEA, CAT)

Nº de Inscrição: 00100

(Inserir o número de inscrição do autor que fez a submissão)

Tailoring of New Electrosynthesized copolymeric Near-Infrared Emitters Based on Donor-Acceptor (D-A) Molecular Hybrid Systems

Claudio L. Donnici(PQ)*,¹ Hállen D.R. Calado(PQ),² Marina Á.-Costa (PG),¹ Alexandre B.-Barbosa (IC)¹cdonnici@terra.com.br¹LABSTOP – LABoratory of Synthesis&Tailoring OPtoelectrochemical molecular devices, Departamento de Química, UFMG;

Palavras Chave: Molecular Tailored Design, Donor-Acceptor Systems, electropolymerization, copolymers with EDOT, beta-carboxamide thiophenes. NIR emitters.

Highlights

Development of novel directly electrosynthesized metal-free copolymeric materials based on EDOT-[beta-thiophene-carboxamide]-fluorene like Donor-Acceptor (D-A) systems with NIR emission

Resumo/Abstract

Near-Infrared (red edge of the visible spectrum at 700–2500 nm) emissive organic materials and near-infrared fluorescence (NIRF) have attracted great attention for potential applications, such as in organic light emitting diodes (OLEDs), light emitting electrochemical cells, photovoltaic cells, chemical sensors, night-vision target identification telecommunications, and in biological optical imaging. More recently, one of the most important approach for the development of new high efficient NIRF agents is the use of molecular hybrids with conjugated electron-donating (D) and electron-acceptor (A) subunits, referred as donor-acceptor (D-A) molecular systems. Polythiophenes and other thiophene-based molecules are among the most used organic semiconductor materials in organic electronics, due to their versatility and easiness of functionalization for tailoring of the polymer backbone. Besides, the electrocopolymerization with EDOT (3,4-ethylenedioxy thiophene), which is one of the most useful electron-donor (D) polythiophenes, is a very promising technique to achieve advanced photometric and electrochromic properties. Herein, we report the new synthesis and the NIR-emission of three copolymers as a molecular hybrid system D-A obtained through simple, easy and direct electropolymerization between EDOT, the electron-donor subunit (D), and an acceptor beta-carboxamide-thiophene unit (TPhCO₂A) also functionalized with fluorescent amino-aromatic moiety ((TPhCONHAr, Ar = naphthyl, fluorene, dibenzofuran, A). First of all, three novel 3-carboxamide-thiophene monomer derivatives (TPhCONAr₁, TPhCONAr₂, and TPhCONAr₃) were prepared by reaction of the acid chloride (TPhCOCl), obtained from the reaction between the analogous carboxylic acid (TPhCO₂H) and thionyl chloride, with the corresponding aromatic amines (65-72 %). All compounds, starting reagents, intermediates and final products were well-characterized by ¹H and ¹³C-NMR, infrared spectroscopy, thermogravimetry, ultraviolet-visible absorption, photoluminescence, cyclic voltammetry, photophysical, electrochemical, spectroelectrochemical techniques, and scanning electron microscopy. Then each of the three monomers were electropolymerized in the presence of EDOT (PalmSens equipment, room temperature, one-compartment-cell, Pt electrodes, Ag/AgCl; film generation made by CV using 0-2V, 20 cycles at scan rate of 50 mV.s⁻¹ in 4 mL, nitrobenzene solution, 0.1 M Bu₄NBF₄). This way, the corresponding copolymers PEDOT-co-TPhCONAr₁, PEDOT-co-TPhCONAr₂ and PEDOT-co-TPhCONAr₃ with the more suitable and suggested general structure [(EDOT)_n-(ThCO-NHAr)_m] were obtained. In fact, all copolymeric materials present high thermal stability (≅ 500-510 °C) and remarkable intense NIR emissions (660-710 nm). The proposed D-A rational planning was successful and indeed the thermal, optical and electrochemical properties of the directly electrosynthesized copolymers were better when compared to the homopolymer PEDOT film and, additionally, they showed a possible yet unknown applicability for polythiophenes: novel fluorophores for devices using deep-red/NIR emitters.

Agradecimentos/Acknowledgments

CNPq, FAPEMIG (CEX PPM 281-17 and APQ-02715-14), CAPES (Finance Code 001, INCT-MIDAS) and Rede Mineira de Química (RQ-MG)

A new and other antitrypanosomal neolignans from twigs of *Nectandra leucantha* (Lauraceae).

Poliana dos S. Mendonça (PG),¹ Leticia R. C. Hernandez (PG),¹ Fernanda S. de Souza (PQ),² Patricia Sartorelli (PQ),² Livia S. Medeiros (PQ),² Thais A. Costa-Silva (PG),¹ André G. Tempone (PQ),³ João Henrique G. Lago (PQ).¹ email: poliana01.mendonca@gmail.com

¹Center of Natural Sciences and Humanities, UFABC, Santo André/SP; ²Institute of Environmental, Chemical and Pharmaceutical Sciences, UNIFESP, Diadema/SP; ³Center for Parasitology, Institute Adolfo Lutz, São Paulo/SP.

Keywords: *Trypanosoma cruzi*, Antitrypanosomal, neolignans, *Nectandra leucantha*.

Highlights

The therapeutic arsenal for the treatment of Chagas disease is limited and includes toxic compounds such as benznidazole and nifurtimox. Therefore, the search for new compounds based on floristic biodiversity is crucial. In the present work, we report the characterization and anti-*T. cruzi* activity of three related neolignans (**1 – 3**), including a new derivative (**3**) from *Nectandra leucantha* (Lauraceae) twigs.

Abstract

Natural products isolated from plants could be important sources of new prototypes for the development of new drugs against tropical neglected protozoan disease, including Chagas disease.¹ As previously reported,² four related neolignans were isolated of *n*-hexane extract from *N. leucantha* twigs and shown potential against trypomastigote and amastigote forms of the parasite with EC₅₀ ranging from 15.2 to 86.5 μM and reduced toxicity. In continuation to this work, another active fraction was purified allowing the isolation of three additional compounds (**1 – 3** – figure 1). Structures of known compounds **1** and **2** were defined by analysis of NMR and HRESIMS spectra and comparison with data described in the literature.² HRESIMS spectrum of compound **3** displayed the [M + H]⁺ ion peak at *m/z* 315.1221 corresponding to molecular formula C₁₈H₁₈O₅ with ten unsaturations. ¹H NMR spectrum showed the same profile of compounds **1** and **2** including signals of hydrogens from aromatic rings at δ 7.01 (d, *J* = 8.1 Hz, H-5'), 6.78 (d, *J* = 2.0 Hz, H-2'), 6.76 (dd, *J* = 8.1 and 2.0 Hz, H-6'), 7.23 (*J* = 1.8 Hz, H-2) and 7.00 (d, *J* = 1.8 Hz, H-6), to saturated carbon aliphatic hydrogens at δ 3.39 (d, *J* = 6.6 Hz, H-7') as well as to hydrogens linked to sp² carbons at δ 5.10 – 5.97 (m, H-8' and H-9'). Additionally, this spectrum showed three intense singlets at δ 3.89 (3H) and 3.86 (3H) attributable to methoxyl groups at C-5 and C-3', and at δ 9.70 (1H), corresponding to aldehyde hydrogen. ¹³C NMR spectrum displayed eight signals at range of δ 105–153, which revealed the presence of two aromatic rings linked by an oxygen bond. Additional sp² carbon atoms at δ 116–140 (C-8' and C-9'), associated with the presence of methylene carbon atoms at δ 40 (C-7') indicated the presence of one allyl side chain. Finally, the presence of aldehyde was confirmed by the observance of a peak at δ 190.5 (CH). Therefore, the structure of new neolignan derivative **3** was determined as showed in figure 1.

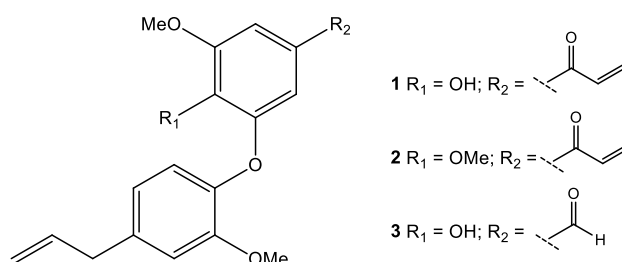


Figure 1. Structures of bioactive neolignans **1 – 3** isolated from twigs of *N. leucantha*.

Compounds **1 – 3** displayed activity against trypomastigote forms of *T. cruzi* with EC₅₀ values of 32.9 ± 3.2, 67.9 ± 9.5 and 23.7 ± 6.7 μM, respectively (benznidazole EC₅₀ = 5.5 ± 2.1 μM). Furthermore, these compounds did not displayed cytotoxicity against NCTC cells (CC₅₀ > 200 μM). Considering the promising properties compounds **1 – 3** could be used as starting points to develop new lead compounds for treatment of Chagas disease.

References: ¹Pecoul, B. et al., *PLoS Negl. Trop. Dis.* **2016**, 10, e0004343. ²Grecco, S.S. et al. *Chem.Biol. Interact.*, **2017**, 277, 55 – 61.

Acknowledgments: CAPES, CNPq and FAPESP.

Stability of sulfur-containing drugs using the reduction of Fe(III) in buffered aqueous solution containing 2,2'-bipyridine

Maria Eduarda G. Marques (IC), Waila Evelyn L. Santana (PG), Horacio D. Moya (PQ)*
maria.gomesmarques@hotmail.com; horacio.moya@fmabc.br.

Faculdade de Medicina da Fundação do ABC – CEPES (Centro de Estudos, Pesquisa, Prevenção e Tratamento em Saúde) – CEP – 09060-650 – Santo André – SP – Brazil.

Key words: Sulfur-containing drugs, stability, 2,2'-Bipyridine, Fe(III), spectrophotometry, shelf life.

Highlights

A spectrophotometric assay to verify the stability of four sulfur-containing drugs based on the reduction reaction of Fe(III) to Fe(II) in aqueous solution containing 2,2'-bipyridine is reported.

Abstract

Apart from hydrolysis the redox process may be cited as the major cause of drug instability¹. As a consequence, oxidation with the same oxidizing agent can be used as a guide of assessing *in vitro* stability of drugs. In the present study the oxidation of some drugs by Fe(III) in aqueous solution containing 2,2'-bipyridine (*bipy*), was used to evaluate the stability of four sulfur-containing drugs (levomepromazine (LV), piroxicam (PX), acetylcysteine (AC) and promethazine (PR)) and also thioglycolic acid (TA). Reduced Fe(II) formed from the redox reactions (Fe(III) 1.0 mM + 3.3 mM *bipy* + HAc/KAc buffer pH 4.6 + drug) reacted with *bipy* giving the $Fe(bipy)_3^{2+}$ complex (λ_{max} 521 nm)², according to equation 1.

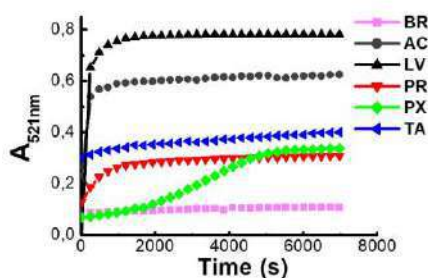
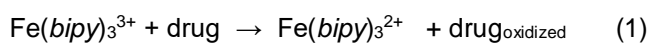


Figure 1

Curvas de A_{521nm} vs t (s). \square = Fe^{3+} 1.0 mM + *bipy* 3.3 mM + tampão HAc/KAc; \bullet = AC 1,0 mM; \blacktriangle = LV 0,1 mM; \blacktriangledown = PR 0,08 mM; \blacklozenge = PX 0,4 mM and \blacktriangleleft = TA 1,0 mM. Water as reference solution; b = 1.0 cm. T = (25 ± 1)^o C.

Absorbance measurements at 521 nm (A_{521nm}) after 30 min. (Fig. 1) gave calibration curves (CC) which were used to calculate the Reduction Power of these drugs expressed as equivalents of ascorbic acid (AA), a reducing agent and also a drug. RP_{AAE} values were obtained taking the slope of each CC with drugs and dividing by the slope of the CC with AA. Considering the RP_{AAE} values the stability of the drugs analyzed follows the order (LV > PX > AC > PR) which seems to be related with the position and type sulfur bonding in the molecule. In fact, TA (which is not a drug) has RP_{AAE} value similar to AC, both having a -SH group. From Fig. 1 it was noted that LV and PR (both phenothiazine derivatives with an S atom in a heterocyclic ring) and AC (with a thiol group) rapidly reduce Fe(III) in containing *bipy* (pH 4.6). PX, with -N-S(=O)2-C- group, is the most stable drug analysed under the experimental

conditions described above. Although the RP_{AAE} values obtained with the Fe(III)/*bipy* complex do not show a close relationship with the stability of the drugs analyzed, the presence of S atom in the molecule seems to be responsible for this reductive power. Thus, assays with other samples should be performed to better understand and apply the proposed reaction in the evaluation of the stability of sulfur-containing drugs.

Table I. Parameters of the linear regression of calibration curves and reduction power values of some drugs obtained with the $Fe(bipy)_3^{2+}$ complex.

| Drug | LR/10 ⁻⁵ | a | b/10 ³ | r | RP_{AAE} |
|------|---------------------|--------|-------------------|-------|------------|
| LV | 2.2-26 | 0.004 | 1.08 | 0.998 | 0.059 |
| PX | 2-18 | -0.097 | 3.23 | 0.997 | 0.175 |
| TA | 20-140 | 0.019 | 8.82 | 0.999 | 0.478 |
| AC | 20-70 | 0.015 | 9.02 | 0.999 | 0.488- |
| PR | 1.6-6 | 0.239 | 13.4 | 0.997 | 0.724 |
| AA | 4-28 | 0.013 | 18.5 | 0.999 | 1.000 |

LR: linear range (mol L⁻¹); a, b and r: linear, angular and correlation coefficients of calibration graphs; RP_{AAE} : reduction power expressed as ascorbic acid equivalent.

1 Betigeri, S.; Thakur, A. and Raghavan, K. 2005. *Pharmaceutical Research*, 22 (2), 310-317.

2 Santana WEL.; Nunez CV.; Moya HD. 2015. *Natural Product Communications*. 10 (11), 1821-1824

Synthesis of β -Zeolite with different Si/Al molar ratio for heavy metal removal.

Livia M. Pratti (PG)¹, Gabrielle M. Reis (IC)¹, Fabiana S. dos Santos (PQ)², Mendelssolm K. Pietre (PQ)^{1*}. Email: mkpietre@yahoo.com.br

¹Departamento de Química-ICEx, UFF-Aterrado-Volta Redonda-RJ; ²Departamento de Engenharia de Agronegócios-UFF-EEIMVR-Vila Santa Cecília -Volta Redonda-RJ.

Keywords: β -Zeolite, Metal Removal, ion Exchange, Kinetics and Isotherms

Highlights

- β -Zeolite with different chemical and textural properties were synthesized for Zn^{2+} , Cd^{2+} and Cu^{2+} removal.
- The selectivity order of the metals adsorbed was influenced by textural and chemical properties of zeolites.
- It was found that the uptake depend on hydration energy, hydrated ion diameter and electronegativity.
- Kinetic studies followed the pseudo-second order equation suggesting an ion exchange process.
- Adsorption isotherms well fitted to Langmuir model indicating an adsorption on monolayer surface.

Resumo/Abstract

In this study, the adsorption behavior of β -Zeolite prepared with different Si/Al molar ratio from synthesis gel (Beta 44 and Beta 60) and the effect of their chemical and textural properties have been studied with respect to zinc, copper and cadmium ions removal from aqueous solutions. The samples were characterized by XRD, FRX, MEV, N_2 physisorption and ^{27}Al MAS NMR. Highly crystalline solids were satisfactorily obtained without any impurities (Fig 1A) [1]. Also, the intense diffraction lines observed for Beta 44 indicate a more crystalline sample than Beta 60. It means that initial Al content directly impacts on the nucleation kinetics of β -structure. As expected, Beta 44 presented higher Al content than beta 60, which should results in different availability of active sites on metal uptake. The presence of much larger total surface area (S_{BET}) and micropore volume (V_{MICRO}) found for Beta 44 suggest that this solid is more crystalline than Beta 60 in agreement with XRD results. According to ^{27}Al MAS NMR practically all Al atoms are inserted into β -structures, which may ensure maximum efficiency on metallic ions uptake. Kinetic studies followed the pseudo-second order equation while adsorption isotherms well fitted to Langmuir model, suggesting that the adsorption process took place by ion exchange on zeolite monolayer surface (Figs 1 B-C). Regarding the selectivity order of adsorbed metals, hydration energy, metal electronegativity and hydrated ions size as well as the zeolitic textural and chemical properties played important role on adsorption process.

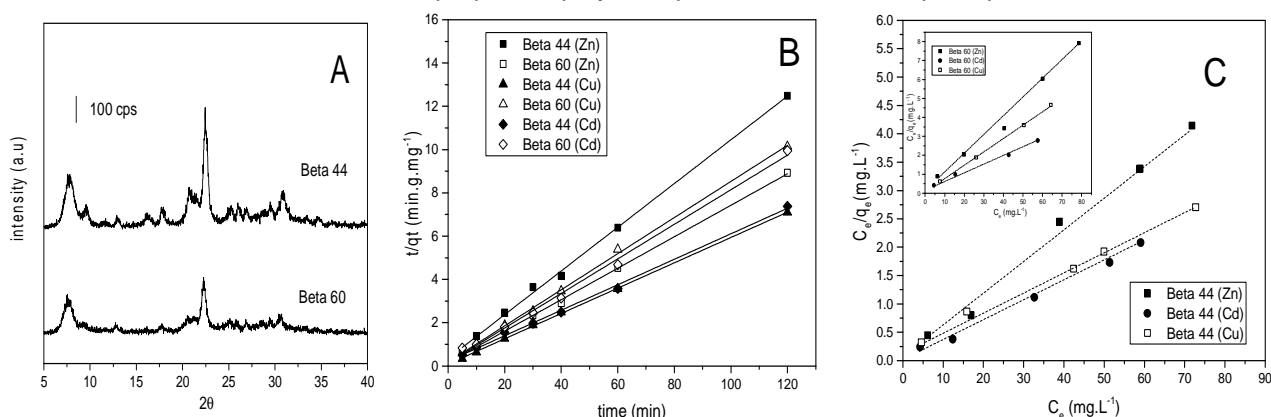


Figure 1: XRD patterns of β -zeolites (A), pseudo second order equation (B) and Langmuir isotherm (C).

Acknowledgments/ References

The authors acknowledge the FAPERJ for financial support to this work and to UFES for the samples characterization.

[1] Oliveira D. S. *et al.* Synthesis of zeolites with different chemical and textural properties for metal ions removal from aqueous solutions. *Water science and technology*, 2017, **76** (12), 3441-3451.

Área: MAT

(Inserir a sigla da seção científica para qual o resumo será submetido. Ex: ORG, BEA, CAT)

Nº de Inscrição: 00113

(Inserir o número de inscrição do autor que fez a submissão)

Development of functionalized gold nanoparticles for the DNA delivery in Gene therapy studies.

Layane S. Rego (PG)*, Adriano R. Azzoni (PQ) e Marcelo M. Seckler (PQ).

layane.rego@usp.br.

Chemical Engineering Department of the Polytechnic School – University of São Paulo.

Key Words: *Nanotechnology, Gold nanoparticles, Gene therapy.*

Highlights

This work aims to contribute to the development of a DNA delivery device in gene therapy studies analyzing physicochemical aspects that govern the efficiency of gene delivery.

Abstract

Nanotechnology is a transdisciplinary technology that is being developed and applied in several areas, among which it is important to emphasize that of health, especially about therapeutics and diagnosis. These technological innovations, referred to as nanomedicines by the National Institutes of Health (Bethesda, MD, USA), have the potential to turn molecular discoveries arising from genomics and proteomics into widespread benefit for patients. In this new technology, metallic nanoparticles have attracted much attention due to their special physicochemical properties, which are mainly due to the increase in the surface area / volume ratio and the effect of Surface Resonance Plasmon (SPR, joint electron oscillation of surface of the nanoparticle).

Because of its many diverse applications and the growing concern with waste generation (sustainability), the development of synthetic alternatives that are less and less harmful to the environment, which meet Green Chemistry's precepts, is essential.

Thus, in this work, the study of the main variables (temperature, molar ratio between reactants and different reducing agents) in the synthesis of gold nanoparticles (AuNp's) and how they can affect the surface area / volume ratio is reported. This study is carried out using the classical method proposed by Sivaraman, Kumar and Santhanam¹ to create spherical gold nanoparticles. No additives, such as organic solvents, or surfactants were used in this procedure, characterizing the process as a "green" synthesis.

In this study were synthesized AuNp's, whose surface is functionalized with a biocompatible functionalization group (amino acids) and citrate. The techniques of Dynamic Light Scattering (DLS), zeta potential (transmission electron microscopy (TEM) and UV-Visible absorption spectroscopy were employed to characterization of the size and geometry of the nanoparticles, in addition to confirming its binding to functionalization group. The results of UV-Visible showed the formation of dispersed AuNp's ranging in size from 8-10 nm with a strong absorption around 520 nm, relating to a maximum of surface plasmon resonance. DLS results showed a hydrodynamic diameter of 10 and 14 nm. The (pH ~ 5.0 to 8.0) ranged potential values of the dispersions prepared between -40.0 mV, indicating stable colloidal suspensions.

[1] S.K. Sivaraman, S. Kumar, V. Santhanam. Monodisperse sub-10 nm gold nanoparticles by reversing the order of addition in turkevich method-the role of chloroauric acid. *J. Colloid Interface Sci.*, 361 (2011), pp. 543-547, 10.1016/j.jcis.2011.06.015.

Área: AMB

(Inserir a sigla da seção científica para qual o resumo será submetido. Ex: ORG, BEA, CAT)

Nº de Inscrição: 00116

(Inserir o número de inscrição do autor que fez a submissão)

Evaluation of the degradation of cephalexin using UV/H₂O₂ concentrations in flow type reactor.

Lucélia Hoehne (PQ),^{1*} Taciélen Altmayer (IC),¹ Gustavo Reisdorfer (PQ),¹ Daniel Kuhn (PG),¹ Ytan Andreine Schweizer (IC),¹ Sabrina Grando Cordeiro (IC),¹ Eduardo Miranda Ethur (PQ),¹ Elisete Maria de Freitas (PQ),¹ Clarice Steffens (PQ)².

luceliah@univates.br

¹ Universidade do Vale do Taquari - Univates. Programa de Pós-Graduação em Biotecnologia (PPGBiotec), Address: Rua Avelino Tallini, 171 sala 406-8 Bairro Universitário. Lajeado, RS, ZIP CODE: 95914-014 Brazil.

² Universidade Regional Integrada do Alto Uruguai e das Missões. Programa de Pós-Graduação em Engenharia de Alimentos. Address: Avenida Sete de Setembro, 1621 - Fátima, Erechim, RS, ZIP CODE: 99709-910 Brazil.

Keywords: Micro Pollutant, Water Treatment, Drug, Decomposition.

Highlights

Degradation of micro pollutant from water supply.

Study of degradation of emerging pollutant using a kind of Advanced Oxidative Processes.

Use of flow reactor with UV/H₂O₂ for degradation of micro pollutants in waters.

Abstract

Drugs have gained prominence as emerging pollutants, as even at relatively low concentrations they can cause harm to the environment. Among the drugs studied, antibiotics are one of the most worrisome because they can cause bacterial resistance. Cephalexin is one of the most commonly used antibiotics in the US, and in Brazil, in addition to human use, it is also a veterinary drug. There are studies evidencing the presence of these drugs in water supply, which deserves special attention, necessitating the development of effective treatments that guarantee the quality of water for its consumers. In this segment, the Advanced Oxidative Processes (AOPs) stand out, which can be considered complementary treatments to the conventional ones. There are many kinds of AOPs, and the most used is combination of Ultraviolet (UV) radiation and hydrogen peroxide (H₂O₂). Thus, the objective of this work was to evaluate the degradation of the antibiotic cephalexin in aqueous solution based on the combination of mercury light bulb of UV radiation and H₂O₂. For this purpose, a glass flow reactor was used in combination with three light bulb with UV radiation of 125 W each. The workflow was 6 L/h. For each test, 10 L of solution were fed to the reactor, 2 L being used only to fill the reactor, which had a diameter of 4 cm. Different pH conditions (4, 7 and 10) and H₂O₂ concentrations (0, 45 and 70 mg/L) were evaluated. For initial tests, 30 mg/L cephalexin solutions were analyzed. For evaluation of drug degradation, solutions containing cephalexin standards, after passing through the reactor, were collected and determined using molecular absorption spectrophotometry in the ultraviolet-visible region, using a calibration curve of 5 to 50 mg/L of the drug. Further, the samples were recycled. As preliminary results, it has been found that the best condition for degradation was using the concentration of 70 mg/L H₂O₂ at pH 10 and considering a single recycle of 100% of the sample. In this condition, the degradation was 26.14%. Thus, further testing will still be done using more recycles and switching from the reactor to a quartz.

Acknowledgments

This study was financed in part by the Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior - Brasil (CAPES) - Finance Code 001. Financiadora de Estudos e Projetos (FINEP). Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq) and Univates.

Área: QPNNº de Inscrição: 00118

Evaluation of polar solvents on yield, phenolic composition and antioxidant activity of a green propolis type from northern Ceara state (Brazil).

Vanessa Moreira Frota (IC),¹ Emanuella Cristina dos Santos Moita (IC),¹ Lavosyer da Silva Mendonça (IC),¹ Yasmim Sabino Nepomuceno Barrozo (IC),² Jorge Alberto Bezerra Fernandes (PQ),² Geovany Amorim Gomes (PQ)¹, Jean Parcelli C. do Vale (PQ)¹, Paulo Nogueira Bandeira (PQ),¹ Hécio Silva dos Santos (PQ),¹ Tigressa Helena S. Rodrigues (PQ)^{1*}.

Categorias: Pesquisador (PQ) e Estudante de graduação (IC).

vanessa-frota1@hotmail.com; thelenasr@yahoo.com.br

¹Curso de Química, Universidade Estadual Vale do Acaraú (UEVA);²Curso de Irrigação e Drenagem, Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia do Ceará (IFCE) – Campus Sobral

Palavras Chave: *Green propolis, Phenolic compounds, Antioxidant activity, Extraction solvent.*

Highlights

- Evaluation of green propolis extraction solvents (ethanol, ethanol/H₂O (7:3) and H₂O).
- Phenolic composition of a green propolis type from Caatinga biome at northern Ceara-Brazil.

Resumo/Abstract

Propolis is a resinous substance collected by honeybees from selective exudates of various plant species. Since propolis is a natural product with therapeutic properties, it has attracted interest of researchers and pharmaceutical industries. Due to the large Brazilian biodiversity, the chemical composition of propolis and its properties varies according to the geographic region, climate and environmental conditions. The objectives of this work were to determine the effect of different solvents (ethanol, ethanol/water 70:30 and H₂O) extraction in green propolis (*Apis mellifera*) type properties from Caatinga bioma at northern Ceara state in Brazil. It was determined the yield, antioxidant potential (DPPH method) and phenolics contents on different extracts obtained by maceration at room temperature. According to the results, the higher yield (45.70 ± 12.24%) was obtained in ethanolic extract, followed by the hydroalcoholic (36.08 ± 3.03%), while the aqueous extract showed a lower yield, 7.37 ± 0.20%. It was obtained 212.80 ± 56.82; 133.39 ± 32.63 and 126.61 ± 14.23 mg/g of total phenolics from hydroalcoholic, ethanolic and aqueous extracts, respectively. On the other hand, all the extracts exhibited a higher antiradical action against 1,1-diphenyl-2-picrylhydrazyl (DPPH) radicals. The antioxidant activity (IC₅₀) was 1.10 µg/mL for aqueous extract, similar results (1.35 µg/mL) were obtained for hydroalcoholic and ethanolic extracts (1.80 µg/mL). Based on this study, it was verified that solvent extraction influences expressively on yields and phenolic content in green propolis extracts although no relevant effect was observed in antioxidant properties.

Agradecimentos/Acknowledgments



Área: ELE

Nº de Inscrição: 00120

Tratamento de efluente de esgoto municipal pela técnica de coagulação química com coagulante natural (*Moringa Oleífera*)

Larissa C.P. Barreto (IC),^{1*} Larissa F. Silva (PG)¹, Leonardo S. Andrade (PQ).¹

larissacpb97@gmail.com;

¹Departamento de Química, UFG-RC

Palavras Chave: Efluente real, Coagulação, Esgoto, *Moringa oleífera*

Highlights

Treatment of municipal sewage by chemical coagulation technique with natural coagulant (*Moringa Oleífera*)
Best coagulation parameter, *Moringa* use for turbidity removal, Salt in effect with calcium chloride.

Resumo/Abstract

Nos últimos anos, uma maior atenção em relação ao tratamento de rejeitos tem sido dada em função da escassez de água, que é um problema que afeta a todos os seres vivos. Com o aumento demográfico, aumenta-se também a quantidade de esgoto que é descartada clandestinamente em rios, mares, etc., visto que segundo o Instituto Trata Brasil (2015), somente 44,92% do esgoto gerado no país é tratado. Assim, o estudo de novas tecnologias para tratamento de efluentes tem se tornado cada vez mais necessário. O presente trabalho propõe um método para o tratamento de efluente de uma estação de esgoto localizada na cidade de Catalão-GO, envolvendo coagulação utilizando um extrato aquoso de sementes da *Moringa Oleífera* coletadas na mesma cidade. O efluente utilizado possui muitas substâncias químicas, odor muito forte, e turbidez e concentração de matéria orgânica medianas (Tabela 1). Para a obtenção das melhores condições para o tratamento, foram realizadas 60 análises variando-se os parâmetros de interesse. Para isso, os valores de pH (6-8), dosagem de extrato (5 mL/L a 50 mL/L) e a presença ou não de 0,10 mol/L de Ca²⁺ (na forma de CaCl₂) no extrato da *Moringa* foram investigados. Os ensaios foram realizados em um Jar-Test com cubas de capacidade de 2,0 L e as análises de turbidez e demanda química de oxigênio (DQO) foram feitos em um colorímetro HACH®. A turbidez, a qual representa o quanto as partículas em suspensão ou coloidais de uma amostra estão interferindo no espalhamento da luz, apresentou um valor inicial de 93,8 UNT, tendo sido reduzida a 13,6 UNT após o tratamento realizado sob as melhores condições (dosagem de extrato 40 mL/L na presença de Ca²⁺ e pH 7,0). Outro parâmetro extremamente expressivo é o da DQO, o qual indica a quantidade de oxigênio necessário para oxidar a matéria orgânica a um composto orgânico estável. De acordo com a Tabela 1, uma redução de ~72% da carga orgânica (de 324 mg/L para 60 mg/L) foi observada somente com o tratamento por coagulação. Observou-se durante os experimentos que todos os ensaios realizados com a presença do cloreto de cálcio eram mais eficientes, pois na sua ausência os valores obtidos de turbidez chegaram a ser quatro vezes maiores. O sal bivalente auxilia na coagulação formando uma estrutura de rede com a proteína da *moringa*, a qual é mantida pela presença de íon Ca²⁺. Com isso, pode-se afirmar que o processo de coagulação foi bastante efetivo nas melhores condições obtidas para o processo uma vez que houve redução significativa nos valores de parâmetros importantes para a qualidade de água. A continuidade do trabalho será realizada a partir da conjugação desta técnica com tratamento eletroquímico/fotocatálise para obtenção de melhor qualidade da água tratada.

Tabela 1 Resultado obtido na melhor condição de coagulação

| Tratamento | Turbidez (NTU) | DQO (mgO ₂ /L) | pH | [Ca ²⁺] mol/L |
|-------------------|----------------|---------------------------|-----|---------------------------|
| Esgoto Bruto | 93,8 | 324 | 6,8 | 0 |
| Após a coagulação | 13,6 | 60 | 7,6 | 0,1 |

Referência: Instituto Trata Brasil. ESGOTO. 2015. Disponível em: <<http://www.tratabrasil.org.br/saneamento/principais-estatisticas/no-brasil/esgoto>>. Acesso em: 31 jan. 2019.

Agradecimentos/Acknowledgments

CAPES, CNPq, Universidade Federal de Goiás, regional Catalão, SAE.

Identification of flavonoids in *Lomatozona artemisiifolia* using LC-HRMS/MS and molecular networking as dereplication strategies

¹Lucília Kato* (PQ),¹ Vinícius Galvão Wakui (PG),¹ Lorrant M. Abreu (IC), ² Marlene Pires Moreira (PG),² Sérgio Tadeu Sibov (PQ), ² Francis Júlio Fagundes Lopes (PQ)^{1,3} Ana Paula Terezan (PQ),^{1,3} Cecília Maria Alves de Oliveira (PQ).

lucilia@ufg.br

¹Instituto de Química, Laboratório de Produtos Naturais e Síntese, UFG; ²Escola de Agronomia, LabCultive - Laboratório de Cultura de Tecidos Vegetais, UFG;³Centro Regional para o Desenvolvimento Tecnológico e Inovação, UFG.

Keywords: *Lomatozona artemisiifolia*, Asteraceae, flavonoids, methoxyl flavones, molecular networking.

Highlights

L. artemisiifolia is an endangered endemic specie from the Cerrado of Goiás. We report a phytochemical study of *L. artemisiifolia* using LC-HRMS/MS and molecular networking as dereplication strategies, which conducted to the identification of nine flavonoids, reported for the first time in this genus and specie.

Abstract

Lomatozona artemisiifolia Baker belongs to Asteraceae family and is an endemic specie found in the Cerrado of Goiás state. Recently extracts of *L. artemisiifolia* had been evaluated against *Bemisia tabaci*, an important plague which has caused serious damage to cultures as tomatoes and soy. Furthermore, *L. artemisiifolia* is an endangered specie included in the red list of Brazilian flora.

The aerial parts of *L. artemisiifolia* were collected in the Prof. José Ângelo Rizzo Biological Reserve in Mossâmedes-GO, on February and May, 2016, dry and wet seasons, respectively. Fresh aerial parts were submitted to extraction with ethyl acetate maceration for 5 min, to afford ethyl acetate extract for leaves collected in dry (EA1) and wet (EA2) seasons, respectively. The same procedure was adopted for plants obtained by in vitro propagation (EA3).

An aliquote of EA1 was submitted to successive chromatographic columns affording four methoxyl flavones (1-4) (figure 1), which were elucidated by NMR techniques. In addition, EA1, EA2 and EA3 were analysed through LC-HRMS/MS using a high resolution orbitrap instrument coupled with a Dionex, Ultimate 3000. An overview of the chromatograms of these extracts shows a similar chromatographic profile, mainly in the flavonoid content, in retention time between 7.0-14.0 min. Furthermore, EA1 and EA2 shows the same peaks in retention time between 19.0-23.0 min, which doesn't appear in the chromatogram of EA3. Four methoxyl flavones (1-4), were identified along with another flavone (5). A molecular networking analysis, using GNPS platform were conducted with the LC-MS/MS data from EA1, EA2 and EA3. The molecular network created allowed the identification of other four flavonoids (6-9), by GNPS annotation (figure 1).

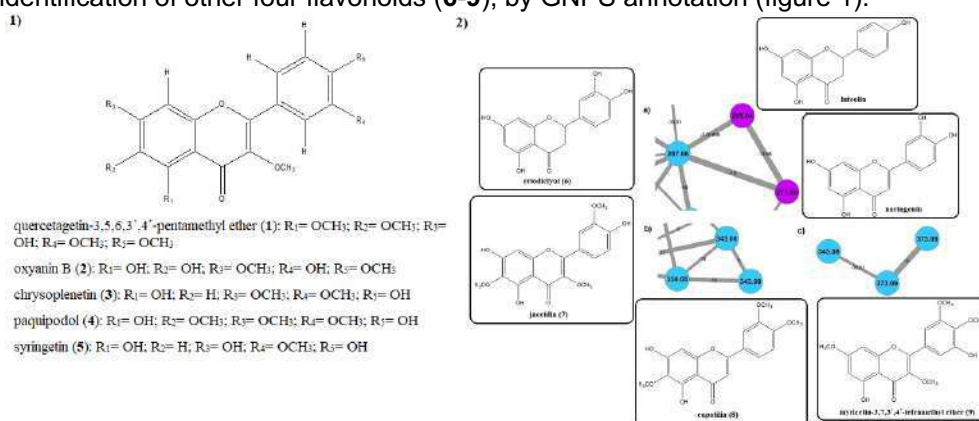


Figure 1. 1) Chemical structure of the isolated compounds 1-4; 2) Partial molecular network analysis and flavonoids (6-9) identified. This study led to the identification of nine flavonoids of *L. artemisiifolia*, reported for the first time in this specie and genus, and further studies will show the difference of metabolites produced from plants obtained in nature and by in vitro propagation.

Acknowledgments

Authors acknowledge to the financial support from CNPq, CAPES and FAPEG.

42ª Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química: Eixos Mobilizadores em Química

Accurate quantum mechanical simulation of bulk water.

Macon P. Lourenço (PQ)¹, Egon C. dos Santos (PG)², Lars G. M. Pettersson (PQ)³, Hélio A. Duarte (PQ)².

maiconpl01@gmail.com; egoncs@gmail.com; helioaduarte@gmail.com

¹Departamento de Química e Física – Centro de Ciências Exatas, Naturais e da Saúde – CCENS – Universidade Federal do Espírito Santo. ²Departamento de Química, Universidade Federal de Minas Gerais, 31270-901, Belo Horizonte, MG, Brasil. ³Department of Physics, AlbaNova University Center, Stockholm University, S-10691 Stockholm, Sweden.

Palavras Chave: water; DFTB2; SCC-DFTB2; Iterative Boltzman Inversion; self-diffusion coefficient; parametrization.

Highlights

The O/H SCC-DFTB2/*matsci* parameters were reparameterized using the Iterative Boltzman Inversion for describing the structural e dynamic properties of bulk water.

Resumo/Abstract

The water chemical properties can be described reasonably well with force fields, however its role as a reactant in their specific interactions with solutes, interfaces and aggregates requires a quantum mechanical treatment. The SCC-DFTB repulsion parameters based on the Material Science set (*matsci*) were redesigned to describe the structural and dynamic properties of bulk liquid water. The Iterative Boltzman Inversion (IBI) approach was applied by simultaneously correcting the O-H and O-O SCC-DFTB repulsion energy (*E_{rep}*) contribution to develop the new *water-matsci* and *water-matsci-UFF* set of parameters. The *water-matsci* parameters permit to calculated the g_{O-O} and g_{O-H} radial distribution function which is in excellent agreement with the state-of-the-art of the experimental data available (Figure 1). The tetrahedrality and the self-diffusion coefficients of the water at room temperature and at the supercooled regime (254 K) have been estimated and compared to other SCC-DFTB calculated values and experiment. The new *water-matsci* parameters is able to describe correctly both g_{O-O} and g_{O-H} RDFs and it is the best water parameters to be used together with the *matsci* parameters set to investigate materials and phenomena of increasing complexity involving water as solvent or reactant.

Table 1. Self-diffusion and tetrahedrality parameter calculated using different SCC-DFTB parameters.

| Method | D (Å ² /ps) | $\langle q \rangle$ |
|------------------|------------------------|---------------------|
| Exp. | 0.19 ¹ | 0.499 |
| water-matsci | 0.08 | 0.495 |
| water-matsci-UFF | 0.08 | 0.492 |
| matsci | 0.10 | 0.425 |
| matsci-UFF | 0.11 | 0.450 |

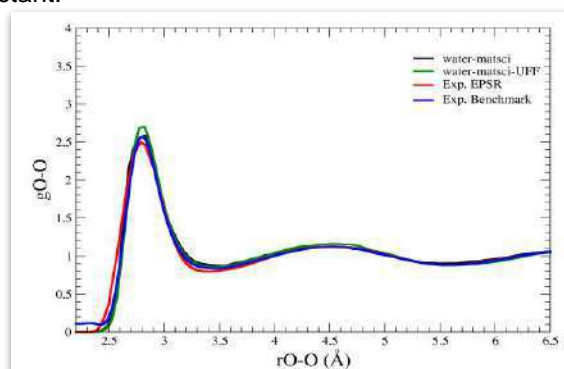


Figure 1. O-O radial distribution function for bulk water

References:

1. Mills, R., Self-Diffusion in Normal and Heavy Water in the Range 1-45°. *J. Phys. Chem. B*, 1973. 77(5): p. 685–688
2. Wikfeldt, K.T., *et al.*, On the range of water structure models compatible with X-ray and neutron diffraction data. *J. Phys. Chem. B*, 2009. 113(18): p. 6246-55.

Agradecimentos/Acknowledgments

The Brazilian Agencies CNPq, CAPES, FAPEMIG and FAPES are gratefully acknowledged. The Based Mineral High Performance Materials and Processes Network–RENOVAMin (Proc. RED-00102-16) is also acknowledged.

Área: EDU

Nº de Inscrição: 00130

Percepções dos professores de Química sobre a inclusão digital nas escolas do sertão pernambucano: um estudo de caso

Bruna R.F. da Silva (IC)*,¹ Sebastião L. da Silva Neto (IC),¹ Bruno Silva Leite (PQ),¹brunoleite@ufrpe.br; bruna_gglm@outlook.com.¹Universidade Federal Rural de Pernambuco – Unidade Acadêmica de Serra Talhada.Palavras Chave: *Inclusão Digital; Tecnologias no Ensino; Ensino de Química.*

Highlights

Perceptions of Chemistry teachers on digital inclusion in schools in the backlands of Pernambuco: a case study. An investigation was carried out on the understanding of digital inclusion by chemistry teachers in public schools in the interior of the state of Pernambuco.

Resumo/Abstract

Nas escolas, as formas utilizadas para criar, analisar, interpretar e ressignificar a informação têm se multiplicado amplamente. As tecnologias digitais têm sido consideradas como importantes recursos para a democratização da educação e são parte essencial da cultura escolar, pois permeiam a vida dos professores, gestores, estudantes, pais, entre outros envolvidos. Nesse sentido, analisar o processo de democratização do acesso às tecnologias da informação (inclusão digital) nas escolas tem permitido compreender como as tecnologias digitais são utilizadas no processo de ensino e aprendizagem da Química. Entende-se que os estudantes devem ser incluídos em todos os âmbitos educacionais, e não seria diferente com relação às tecnologias. Estas estão presentes no cotidiano de boa parte da população que dispõe tanto de dispositivos tecnológicos quanto acesso à internet. Assim, este trabalho teve como objetivo investigar as percepções dos professores de Química sobre a inclusão digital de seus estudantes nas escolas públicas do município de Serra Talhada-PE. Para isso a abordagem metodológica adotada foi de natureza qualitativa e a estratégia empregada foi o estudo de caso, na qual 50 professores de 5 escolas públicas responderam a uma entrevista semiestruturada. Os resultados mostram que 74% dos professores consideram que a inclusão digital consiste no fato do estudante ter acesso à tecnologia. Já 32% acreditam que a inclusão digital ocorre quando o estudante tem acesso à tecnologia, independente de possuir conexão com a internet. A pesquisa revelou que poucos professores (12%) se preocupam em avaliar se a partir do uso das tecnologias o estudante reflete sobre sua utilização. Evidenciamos que para alguns professores (27%) a inclusão digital está acontecendo nas escolas em que trabalham e alguns de seus argumentos são que sua escola oferta ferramentas tecnológicas para que os estudantes sejam incluídos digitalmente. Outro dado importante obtido durante a pesquisa reside no fato de que cerca de 75% dos professores não sabem o que é inclusão digital e como ela ocorre. Tal afirmação foi constada nas falas dos professores quando diziam que apenas ter aparelhos tecnológicos disponíveis para os estudantes é uma forma efetiva para se incluir todos em sala de aula. Nesse sentido, observamos que 85% dos professores associam a inclusão digital à aquisição de aparelhos tecnológicos na escola. Sabe-se que a inclusão digital não está atrelada somente a ter acesso ao aparato tecnológico, e sim como os estudantes usam essas tecnologias e como isso pode contribuir em suas vidas, de modo a construir senso crítico com essa utilização. Embora os professores tenham destacado que as escolas dispõem de diversos recursos tecnológicos, alguns inferiram que apenas o uso destes recursos não fazem com que os estudantes estejam incluídos digitalmente, como observado na fala de um dos professores “[...] nós vivemos em uma sociedade em que os alunos vivem conectados e tem acesso a informação, mas que não sabem transformar essa informação em conhecimento”. Consideramos que a inclusão digital não é apenas fazer com que os estudantes estejam conectados virtualmente, mas sim que haja uma preocupação em desenvolver um senso crítico nos estudantes com relação ao seu uso e que contribua para a construção de seu conhecimento, combatendo a exclusão digital. Por fim, acreditamos que esta investigação contribuiu para identificar se nas escolas públicas de Serra Talhada ocorre a inclusão digital (tão discutida pela sociedade da informação), possibilitando traçar caminhos para que de fato, professores, gestores, estudantes, estejam incluídos digitalmente.

Agradecimentos/Acknowledgments

Ao CNPq, LEUTEQ, UFRPE.

42ª Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química: Eixos Mobilizadores em Química

Área: **ANA**Inscrição: **00132**

Evaluation of the peroxymonosulfate decomposition reaction in alkaline medium for application in determining the polyphenol content in teas.

Waila Evelyn L. Santana (PG), Cícera Pimenta Marcelino (PG), Horacio D. Moya (PQ)*

waila.evelyn@gmail.com; horacio.moya@fmabc.br

Faculdade de Medicina da Fundação do ABC – CEPES (Centro de Estudos, Pesquisa, Prevenção e Tratamento em Saúde) – Santo André – SP – Brazil.

Key words: Potassium peroxymonosulfate, Oxone®, chemiluminescence, polyphenol content, teas.

Highlights

Peroxymonosulfate is a strong oxidizing agent which in the presence of Co(II) in alkaline solution produces free radicals that oxidize antioxidants compounds present in teas generating chemiluminescence.

Abstract

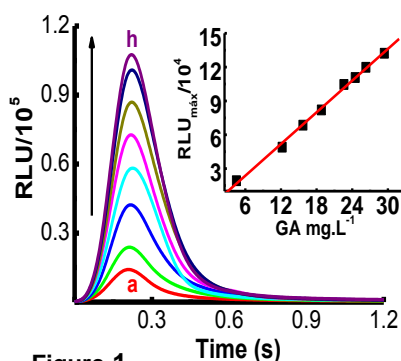


Figure 1

Peroxymonosulfate (PMS) in presence of Co(II) generate free radicals ($\text{SO}_5^{\cdot-}$, $\text{SO}_4^{\cdot-}$ and HO^{\cdot}) that has been used to degrade contaminants (e.g. phenols) in wastewater¹. As polyphenols (PF) are antioxidant compounds potentially beneficial to human health there is an increasing interest in their quantification in different kind of samples. In the present study a chemiluminescent (CL) reaction for the quantification of the polyphenol content in teas based on the oxidation by PMS, provided by Oxone® ($2 \text{KHSO}_5 \cdot \text{KHSO}_4 \cdot \text{K}_2\text{SO}_4$), in alkaline medium and in presence of Co(II) is reported. The sequence (mandatory order)² for adding the solutions in luminometer (Berthold Lumat Lb 9507) is: (10-80) μL 94.1 mg L^{-1} gallic acid (GA) or (10-80) μL tea in polystyrene tube containing 10 μL 1.5 g L^{-1} Co(II) + jet-injection of 100 μL of 184.4 g L^{-1} PMS + 100 μL of 40 g L^{-1} NaOH (after 0.7 s).

Relative luminescence unit (RLU) measurements generated the calibration curve (CC) with GA (mg L^{-1}) solution ($\text{RLU} = -4418 + 4687 \times \text{GA}$, $n = 8$, $r = 0.998$, for linear range of (4.5-30.3) mg L^{-1} GA (a to h in Fig. 1) with limit of detection (2.5 ± 0.2) mg L^{-1} . RLU measurements with tea samples (aqueous extract)⁴ also generate a CC (multiple standard addition method with GA) providing an average recovery rate ($90.1 \pm 8.7\%$).

The results obtained with the reaction used (CL) showed strong correlation ($r^2 = 0.937$) when compared with the Folin Ciocalteu Reagent³ (FCR) commonly used to quantify total polyphenol content (TPC) in teas (Table I) suggesting that both reactions can be used for this purpose. Also, the TPC values obtained with CL and FCR showed good agreement with total antioxidant capacity (TAC) values obtained with ABTS⁴ reagent ($r^2 = 0.977$ and $r^2 = 0.953$, respectively), which indicates that polyphenols might be responsible for this TAC.

Table 1 –Total polyphenol content values (CL and FCR) and total antioxidant capacity of six tea samples.

| Teas | | <i>Camelia sinensis</i> L. | <i>Mentha piperita</i> L. | <i>Mentha piperita</i> L. | <i>Camelia sinensis</i> L. | <i>Ilex paraguariensis</i> St. Hil. | <i>Camelia sinensis</i> L. |
|-----------------------|----------------------|----------------------------|---------------------------|---------------------------|----------------------------|-------------------------------------|----------------------------|
| | | White | Mentha | Mentha | Black | Matte | Green |
| TPC mg GA/ g DM | CL | 182 ± 8 | 645 ± 48 | 551 ± 14 | 442 ± 56 | 506 ± 58 | 139 ± 10 |
| | FCR | 133 ± 6 | 65.4 ± 2.2 | 74.3 ± 1.4 | 69.5 ± 1.4 | 73.4 ± 1.4 | 139 ± 1 |
| TAC mM trolox/g DM | ABTS/10 ⁴ | 25.9 ± 1.5 | 6.15 ± 0.37 | 10.8 ± 1.1 | 12.3 ± 0.4 | 10.8 ± 0.7 | 25.8 ± 0.3 |

ABTS is 2,2'-Azino-bis(3-ethylbenzothiazoline-6-sulfonic acid) diammonium salt. Trolox® is (\pm)-6-Hydroxy-2,5,7,8-tetramethylchromane-2-carboxylic acid. DM is dry material.

1 Anipsitakis G.P., Dionysiou D.D., *Environ. Sci. Technol.* 37 (2003) 4790.

2 Magdaleno G.B., Coichev N. *Analytica Chimica Acta* 552 (2005) 141–146.

3 ANVISA. Agência Nacional de Vigilância Sanitária. *Brazilian Pharmacopoeia*, p. 204-2 06, Vol. 1, 5th Ed. Brasília, 2010.

4 Nenadis, N.; Wang, L. F.; Tsinidou, M.; Zhang, H. Y. *J. Agric. Food Chem.* 52 (2004) 4669 – 4674.

Sequential determination of calcium and magnesium in water and milk using flow batch system and detection by webcam.

Eduarda A. Severo (IC)¹, Marcos Yuri Rosa Junior (IC)¹, Sandro L.G. Santa Cruz (IC)¹, Pedro Luiz de Paula (PQ)¹, Eder L. de Moraes Flores(PQ)¹, Jorge L. O. Santos (PQ)², Oldair D. Leite (PQ)^{1*}

eduardaaguitasevero@gmail.com; oldair.leite@gmail.com

¹Universidade Tecnológica Federal do Paraná, UTFPR – Campus Medianeira;

²Universidade Federal do Oeste da Bahia, UFOB – Campus Bom Jesus da Lapa.

Keywords: *Mineral in foods and beverages, Webcam detector, Flow batch analysis.*

Highlights

- Sequential determination of calcium and magnesium;
- Webcam detection in flow analysis;
- Calcium and magnesium contents in water and milk samples.

Abstract

The quantification of the mineral content in foods and beverages is related to their nutritional importance and/or toxic effects that they can confer. Metals such as Cd, Pb, Hg and Al, for example, are monitored for toxicity, ppb levels, and accumulation capacity in the body. Others, such as Na, K, Ca, and Mg, are necessary in an amount close to 100 mg / day and play essential functions in the human organism, such as: constituent of essential molecules in the regulation of enzymes, transport of nutrients by membranes acid-base balance, osmotic pressure, and in some cases as structural constituents of extracellular tissues, such as bones and teeth. Therefore, the concentration of these elements is constantly monitored. The use of webcams, associated with automated and or semi automated systems, has a high potential for analysis in the visible region of the electromagnetic spectrum, and constitutes a promising alternative to traditional absorbance measurements that depend on conventional equipment. In the present work, a semi automated analytical procedure was proposed for the sequential determination of Calcium and Magnesium in water and milk samples. The flow-batch system was mounted with peristaltic pump (Ismatec, IPC-4), three-way solenoid valves (NResearch, 161T031), polyethylene tube (0.8 mm di), an acrylic cell of 2.0 mL adapted for flow batch reaction and detection by webcam. System control and data acquisition (webcam) were performed using a Pentium® 2.1 GHz microcomputer, using software developed in Labview® 7.0 (National Instruments) and PdiPROJ10.0®, respectively. The reagents used in the determination of Ca and Mg were the same as those used in titrimetric complexation reactions, AOAC (2016). After optimization of the chemical parametric analysis, the response linearity in the flow batch procedure was 0.1 to 1.0 mg L⁻¹ for calcium and magnesium, with RSD <5%, for the concentration of 0.5 mg L⁻¹. Calcium and magnesium analyzes were performed in 3 water and milk samples (after convenient opening of the samples) and the results obtained with the proposed system were concordant with the classical complexation titration procedure, which showed no significant difference at a confidence level of 95 % (Paired t-test). However, the small volumes of samples and reagents used in the flow-batch system for the determination of species are: 1)- Determination of Ca and Mg, total reaction volume of 1110 µL, 560 µL of sample, 110 µL of indicator (Eryochrome Black T), 220 µL of buffer and 220 µL of EDTA; 2)-Determination of Ca, total reaction volume of 1070 µL, 560 µL of sample, 170 µL of indicator (Murexide), 170 µL of buffer and 170 µL of EDTA. The use of the flow batch system associated with webcam detection (digital images) was shown to be a promising alternative for traditional measurements using conventional equipment in the determination of calcium and magnesium in water and milk samples.

Szefer, P.; Nriagu, J. O.; "Mineral Components in Foods", CRC Press, 2006.
AOAC. Official methods of analysis of AOAC international. 20 th Edition, 2016.

Acknowledgments

Recognition to the support to this work: Araucária Foundation, CAPES, CNPQ, FINEP, UTFPR/Medianeira, and to the research group LAITEC.

Chalcones Cyclopropanation by Corey-Chaykovsky reaction.

Natália da Silva Álvaro (IC),^{1*} Bruno Almeida Cotrim (PQ)¹ e Daniel Pais Pires Vieira (PQ)¹

daniel.vieira@ifrj.edu.br; natalvaroo@gmail.com*

¹ IFRJ campus Rio de Janeiro (Maracanã).

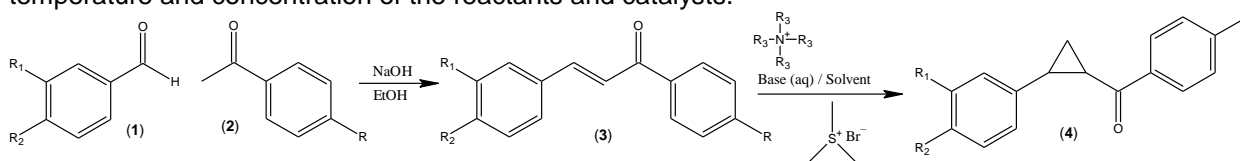
Keywords: Chalcones, trimethylsulfonium, aryl ketones, cyclopropane, enones, sulfur ylide.

Highlights

The Corey-Chaykovsky reaction can be used to obtain epoxides, aziridines and cyclopropanes is being studied on chalcones under different reaction conditions in biphasic media (organic solvent / water), avoiding the use of strong bases.

Resumo/Abstract

The Corey-Chaykovsky reaction is an important methodology to produce epoxides, aziridines and cyclopropane derivatives [1]. Particularly, the Corey-Chaykovsky cyclopropanation reaction is represented in the literature commonly through the reaction of the sulfur ylide with a chalcone [2]. The cyclopropane nucleus is an important substituent group in several compounds with biological activity and, for this reason, the development of new synthetic routes and methodologies to obtain compounds with this nucleus is justified. The Corey-Chaykovsky cyclopropanation reaction, in general, uses strong bases as catalysts that are difficult to handle, the present work aims to study the realization of Corey-Chaykovsky cyclopropanation reactions in biphasic media (organic solvent / water) avoiding the use of bases such as NaH and BuLi. For this purpose, Corey-Chaykovsky's cyclopropanation reactions will be tested on aromatic chalcones with different substituents and under different reaction conditions varying parameters such as solvent, temperature and concentration of the reactants and catalysts.



The reactions studied, until now, of chalcone formation (3) used the condensation between acetophenone (2) (R = H) and benzaldehyde (R₁ = R₂ = H) and m-NO₂-benzaldehyde (R₁ = NO₂, R₂ = H). The reactions were initially studied under different conditions in order to establish the best reaction conditions (base, excess of ylide, temperature and time) to provide the best results.

In order to use milder and lower cost reaction conditions the reaction was tested using aq KOH in r.t. and CH₂Cl₂ as solvent, there was no reagent consumption until the third day when refluxing was used, at which point the formation of a complex mixture of products occurred (69% crude yield). The use of a phase transfer catalyst (Tetracylmethylammonium bromide) to improve the contact between reagents of immiscible phases, promoted the consumption of the substrate in one day, but also forming a complex mixture of products (54% crude yield).

Reaction of chalcone derived from benzaldehyde (R₁ = R₂ = H) and m-NO₂-benzaldehyde (R₁ = NO₂; R₂ = H) using t-BuOK as a base in CH₂Cl₂ led to high conversions (89% and 99%, respectively) and moderate purified yields (44% and 49%, respectively), the reaction media were purified on an automatized chromatograph and the purified products analyzed by IR and H¹ and C¹³ NMR indicating the formation of the desired derivatives (4).

The preliminary results are promising, the reaction conditions will be optimized to improve the chemical yields and sequentially other arylketones and aldehydes, with different substitution patterns, will be used to obtain structural variety and to map their potential biological activities, seeking the understanding of the structure-activity relationship (SAR) and orienting molecular modifications in order to optimize the applications of the synthesized molecules.

REFERENCES: [1] MCGARRIGLE, E. et al; *Chem. Rev.* **2007**, 107, 5841-5883. AGGARWAL, V. K.; WINN, C. L. *Acc. Chem. Res.* **2004**, 37, 611-620. SONE, T. et al. *Molecules* **2012**, 17, 1617-1634. [2] ZHANG, Y; WU, W.; *Tetrahedron: Asymetry* **1997**, 8, 16, 2723.

Agradecimentos/Acknowledgments

IFRJ campus Rio de Janeiro ; CTEEx – Exército Brasileiro - Ministério da Defesa.

Área: QPN

Nº de Inscrição: 135

Evaluation of the antioxidant potential of *Croton antisyphiliticus* guided by bibliometric analysis

Stéphanie V. Prado* (IC),¹ Marco T. F. Martins (IC),¹ Vanessa G. P. Severino (PQ).¹

stephanievprado@gmail.com*; vanessa.pasqualotto@gmail.com

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

Palavras Chave: *Croton antisyphiliticus*, antioxidant potential, bibliometrics.

Highlights

Evaluation of the antioxidant potential of *Croton antisyphiliticus* guided by bibliometrics. The genus *Croton* is rich in natural products with biological activities. Natural antioxidant molecule models are very important because they can be used to fight free radicals and prevent diseases.

Resumo/Abstract

The genus *Croton* (Euphorbiaceae) contains about 1,300 species distributed in the tropical regions of the world. In Brazil, of the 350 species found, 252 are endemic. The species *C. antisyphiliticus*, popularly known as “pé-de-perdiz”, belongs to the Cerrado biome and is used in folk medicine because of its therapeutic properties. In an ethnobotanical survey conducted previously by these authors in the Coqueiros Community, in the municipality of Catalão-Goiás, the roots and leaves of *C. antisyphiliticus* were indicated for the treatment of influenza and as anti-inflammatory, which promoted the interest in carrying out scientific studies of this species. Thus, a systematic study of the literature, called bibliometric analysis, on the antioxidant activity of the *Croton* was developed in order to evaluate current trends in quantitative and qualitative research on this topic. From the data, and using the VOSviewer tool, a correlation was observed between the class of flavonoids, Euphorbiaceae and antioxidant activity, which is represented in figure 1 by circles of the same colour, which demonstrate proximity to their studies and results. It was also noted that several species of *Croton* have antioxidant potential reported and there is no data regarding *C. antisyphiliticus*. Thus, the leaves, stem and roots of this species were collected in the Coqueiros Community (registration number A11AE20 - *Sistema Nacional de Gestão do Patrimônio Genético e do Conhecimento Tradicional Associado*), dried, ground and extracted with ethanol for nine days, with a solvent change every three days, to obtain the following extracts: leaves (LE), stem (SE) and roots (RE), which had the antioxidant potential evaluated against the radical 2,2-diphenyl-1-picrylhydrazyl (DPPH), using gallic acid as standard. Significant values of DPPH radical inhibition were obtained for LE and SE (EC_{50} of 35.53 and 47.14 $\mu\text{g mL}^{-1}$, respectively) when compared to the galic acid (EC_{50} 32.17 $\mu\text{g mL}^{-1}$). The ethanolic extract of the roots presented a low antioxidant potential (EC_{50} 468.03 $\mu\text{g mL}^{-1}$). This fact could be explained by the content of flavonoids and phenolic compounds present in these extracts. Therefore, this study is still underway, and the anti-inflammatory potential has been evaluated for their, as well as the identification and isolation of their chemical constituents.

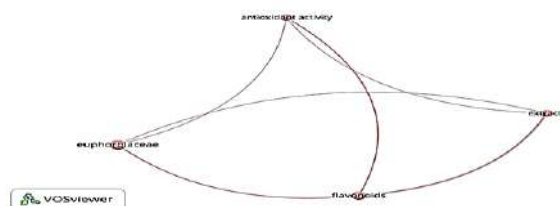


Figure 1- Some correlations observed in the bibliometric analysis of the genus *Croton*.

Agradecimentos/Acknowledgments

The authors gratefully thank to the Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de Goiás (FAPEG), Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq) e à Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior (CAPES) for the financial support for this research.

Área: QPN

Inscrição: 00140

Antitrypanosomal alkaloids from *Ocotea puberula* (Rich.) Nees.

Henrique Barbosa¹ (PG), Geanne A. A. Conserva¹ (PG), Thaís A. da Costa-Silva¹ (PQ), André G. Tempone² (PQ), João Henrique G. Lago¹ (PQ). Email: barbosa.h@ufabc.edu.br.

¹Center for Natural and Human Sciences, Federal University of ABC (UFABC), Sao Paulo, SP; ²Department of Parasitology, Adolfo Lutz Institute, Sao Paulo, SP.

Palavras Chave: *Ocotea puberula*, Aporphine Alkaloids, *Trypanosoma cruzi*.

Highlights

The American trypanosomiasis is a disease that infects millions of people in the world and which treatment is poorly effective. Based in a continuous study concerning the prospection of bioactive metabolites from plant species, this work reports the evaluation of antitrypanosomal activity of alkaloid fraction from *Ocotea puberula*. Bioactivity-guided fractionation afforded five aporphine alkaloids (**1** – **5**) which were characterized by analysis of NMR spectra. This is the first occurrence of alkaloids **1**, **3** – **5** in *O. puberula*.

Abstract

The American trypanosomiasis is a tropical disease caused by the *Trypanosoma cruzi*. It was estimated that around 6 million people are infected in Latin America, with about 30,000 new cases and a mortality rate of about 14,000 people per year. The treatment of this disease is done by only two drugs discovered about 50 years ago – benznidazol and nifurtimox – that have low efficacy and strong side effects.¹ In this context, the search for new chemotherapeutic alternatives to CD is crucial and natural products are a promising toll approach to identify new compounds, providing prototypes and related active derivatives. As part of our continuous study concerning the prospection of bioactive metabolites from plant species, the leaves of *O. puberula* was subjected to acid/base extraction procedure to afford an alkaloid fraction. This fraction displayed activity against trypomastigote forms of *T. cruzi* (100% of parasite death at 300 µg/mL) and was subjected to a bioactivity-guided fractionation. After successive chromatographic procedures using silica-gel and Sephadex LH-20, three pure (**1**, **2** and **5**) and one mixture (**3** and **4**) of alkaloids were obtained. Analysis of NMR spectra and comparison with literature data²⁻⁵ allowed the identification of dehydrodicentrine (**1**), dicentrine (**2**), dicentrinone (**5**), glaucine (**3**), and norglaucine (**4**) as showed in figure 1. This is the first occurrence of alkaloids **1**, **3** – **5** in *O. puberula*.

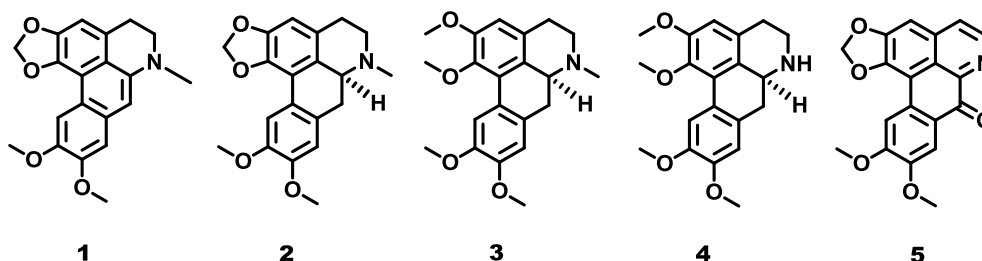


Figura 1. Alkaloids **1** – **5**, isolated from *O. puberula*.

Previous report described the effects of compounds **3** and **5** against epimastigote and trypomastigote forms of *T. cruzi*, respectively.^{6,7} Therefore, the antitrypanosomal effect of alkaloids **2** – **4** has been described at first time. Sequentially, the effects of alkaloids **1** – **5** against intracellular amastigotes will be evaluated *in vitro*.

References: ¹Pan-American Health Organization. Neglected Infectious Diseases: Chagas Disease. **2017**. ²Dong, J.W. et al. *Fitoterapia*. **2015**, 104, 102-107. ³Peng, Y., et al. *Bioph. Rep.* **2018**, 4, 50-61. ⁴Nantapap, S., et al. *Int. J. Chem. Sci.* **2015**, 13, 1705-1712. ⁵da Silva, F.M.A. et al. *Phytochem. Anal.* **2014**, 25,45-49. ⁶Morello, A. et al. *Comp. Biochem. Physiol.* **1994**, 107C, 367-371. ⁷da Silva, D.B. et al. *Phytochemistry*. **2009**, 16, 1059–1063.

Acknowledgements: FAPESP, CAPES and CNPq.

42ª Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química: Construindo o Amanhã

Synthesis, characterization and optical activity of Ag- doped ZnWO₄ by hydrothermal

Camila dos Santos de Jesus (IC),¹ Kellen Cristina M. Borges (PG),^{1*} Rosana de Fátima Gonçalves (PQ),^{1,2} Murillo H. de Matos Rodrigues (PG),¹ Maria Rita de Cassia Santos (PQ),¹ Mario Godinho Júnior (PQ).¹

camilasanje.sj@gmail.com; kellenquim@gmail.com

¹Unidade Acadêmica Especial de Química, Universidade Federal de Goiás, Catalão - GO, Brasil; ²ICAQF, Universidade Federal de São Paulo, Diadema- SP, Brasil.

Palavras Chave: *nanomaterials, microwave- hydrothermal method, wolframite.*

Highlights

Ag- doped ZnWO₄ samples containing 1 and 2 mol% Ag⁺ have been successfully synthesized using a microwave-assisted hydrothermal method. In this research, the products are wolframite- type monoclinic structure with nanometric size. The phase, size and optical property were dependent on the Ag⁺ doping concentration into the ZnWO₄ host lattice. IR spectra confirm the crystals structure, with a vibration of Zn–O, W–O and Zn–O–W. Ultraviolet– Visible diffuse reflectance spectra indicated that the optical band gap increases with increasing replacement of Zn²⁺ by Ag⁺ ions, and was characteristic of semiconductor materials. Therefore, the insertion and variation of the dopant concentration was of great importance, because improve pure ZnWO₄ properties, as it resulted in the formation of new compounds with a consequent decrease in crystallite size and the creation of intermediate electronic levels that enabled the variation of E_{gap}. These nanomaterials can be applied in photoluminescence, photocatalysis, antimicrobial activity, and others.

Resumo/Abstract

In this research was investigated the effect of Ag- doped ZnWO₄ (ZnWO₄: Ag) on phase and optical property of ZnWO₄.¹ ZnWO₄: Ag containing 1 and 2 mol % Ag were successfully synthesized by coprecipitation method followed by microwave-assisted hydrothermal system at 140 °C/1 h. The nanostructures were characterized by X-ray diffraction (XRD), IR spectra and UV visible spectroscopy. XRD (Fig. 1a) indicated that the crystals had a wolframite- type monoclinic structure and by the Scherrer equation, based on the diffraction peaks (111), it was verified that with the addition of dopant the crystallite size decreased, with 12,22, 8,78 and 7,67 nm for pure ZnWO₄, ZnWO₄: 1.0 mol % Ag and ZnWO₄: 2.0 mol % Ag, respectively. IR spectra (Fig. 1b) confirm the crystals structure, with a vibration of Zn–O (symmetric and asymmetric deformation modes: 424 cm⁻¹), W–O (bending vibrations at 460 and 668 cm⁻¹, stretching vibration at 700 and 815 cm⁻¹ and symmetric and asymmetric deformation modes: 538 cm⁻¹) and Zn–O–W (bending and stretching deformations at 880 cm⁻¹) in WO₆ and ZnO₆ octahedra. Ultraviolet– Visible diffuse reflectance spectra (Fig. 1c) indicated that the optical band gap varies with increasing replacement of Zn²⁺ by Ag ions, E_{gap} was characteristic of semiconductor materials and E_{gap} increases with increasing of dopant concentration. The nanomaterials synthesized in this work presented good properties and can be used in different applications in the field of materials science, such as photocatalysis,¹ photoluminescence,² etc.

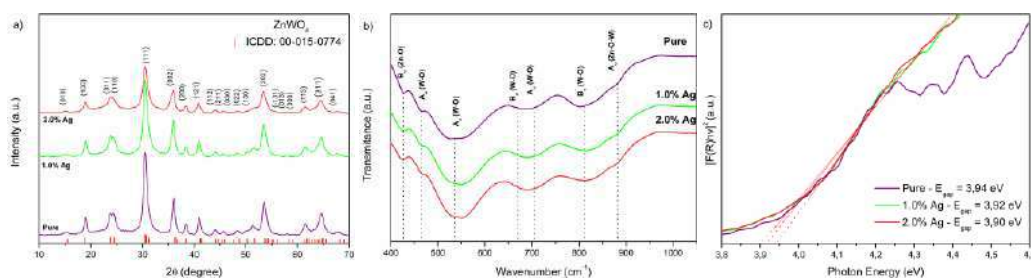


Figure 1. Ag⁺- doped ZnWO₄ samples: a) XRD patterns; b) IR spectra; c) UV–Vis spectra.

¹ Z. Xia, et al., Optics Communications. 2017, 387, 357–360.

² X. Chai, et al., Royal Society of Chemistry Advances. 2017, 7, 40046–4005.

Fitorremediação: um estudo da potencialidade da *Canavalia ensiformis* na descontaminação de solos com chumbo

Jaqueline M. G. da Silva (IC)¹, Ariane C. F. Beltrame (IC)¹, Janksyn Bertozzi (PQ)¹ e Alessandra Stevanato (PQ)¹

jaque19343@gmail.com, stevanato@utfpr.edu.br

¹Departamento de Química, Universidade Tecnológica Federal do Paraná (UTFPR) – Câmpus Londrina

Palavras Chave: *Canavalia ensiformis*, Chumbo; Fitorremediação, Fitoextração.

Highlights

Fitoredmediation: a study of the potentiality of *Canavalia ensiformis* in the decontamination of soils with lead. The percentages of lead obtained in the three plots were 0,485%, 0,377% and 0,470%, respectively. In this way, the potentiality of the *Canavalia ensiformis* legume has a phytoextractive capacity.

Resumo/Abstract

Com o aumento da urbanização, industrialização e descartes incorretos, os ecossistemas e o ambiente sofreram alterações que interferiram na composição do ar, solo, água e outros sistemas, sendo que em alguns casos houve a poluição dos mesmos, fato que ainda é presente na atualidade (BHARGAVA et al., 2012). O maior estimulante da exploração dos sistemas ecológicos e acréscimo expressivo de resíduos nestes ambientes, é um aumento na escala de produção sem o devido tratamento de resíduos. Sendo assim, o presente trabalho verificou a potencialidade da leguminosa *Canavalia ensiformis* (conhecida também como feijão-de-porco ou feijão bravo) na descontaminação de solos contendo chumbo, visto que a presença deste metal em determinadas concentrações pode trazer danos ao homem, animais e demais seres (ALMEIDA, 2008). Estudos apontam a partir de 70 mg kg⁻¹ o solo já passa a apresentar complicações (CONCEIÇÃO, 2007). A metodologia empregada teve caráter quantitativo, na qual foram mensuradas as quantidades de chumbo fitoextraído pela planta. Esta foi dividida nas seguintes etapas: A parte experimental foi dividida em quatro etapas: 1. Verificação prévia da presença de Pb(II) nos solos (antes do cultivo); 2. Preparação da curva de calibração e análise quantitativa do solo sem Pb (II); 3. Cultivo da *Canavalia ensiformis* e adição de Pb(II); 4. Determinação de Pb(II) na planta *Canavalia ensiformis*. Inicialmente verificou-se se haveria chumbo no solo utilizado para o cultivo da planta. Em seguida, foram cultivadas 12 amostras da leguminosa, sendo estas divididas em três parcelas e cada parcela foi composta por um branco e três replicações de uma mesma concentração. Na primeira parcela adicionou-se como fonte de contaminação 5 g de acetato de chumbo(II). Nas segunda e terceira parcelas, foram adicionados 10 e 15 g do acetato de chumbo(II), estas massas foram dissolvidas em 1 L de água Milli-Q. O tempo de exposição da planta contaminada com o metal teve duração de 20 dias e ao final deste tempo, as partes aéreas das plantas cultivadas em todas as parcelas foram removidas e submetidas à preparação da amostra. Estas foram secas, trituradas, digeridas e analisadas quantitativamente por espectroscopia de absorção atômica. As porcentagens de chumbo obtidas nas três parcelas foram de 0,485%, 0,377% e 0,470%, respectivamente. Desta forma verificou-se que a leguminosa *Canavalia ensiformis* apresentou capacidade fitoextratora.

Referências

- ALMEIDA, E. L.; et al. Crescimento de feijão-de-porco na presença de chumbo. *Bragantia*, v.67, p. 569-576, 2008.
- BHARGAVA, A. et al. Approaches for enhanced phytoextraction of heavy metals. *Journal of Environmental Management*, v. 105, n. 20, p. 103-120, 2012.
- CONCEIÇÃO, D. et al. Redução de cromo hexavalente por bactérias isoladas de solos contaminados com cromo. *Ciência Rural*. n.6, v. 37. p. 1661-1667, 2007.

Agradecimentos/Acknowledgments

A Universidade Tecnológica Federal de Paraná, câmpus Londrina.

Área: **MED**

(Inserir a sigla da seção científica para qual o resumo será submetido. Ex: ORG, BEA, CAT)

Nº de Inscrição:
00143

(Inserir o número de inscrição do autor que fez a submissão)

Papain bioreactors as tool for screening cysteine protease ligands

Cleiton S. Leandro (PG)¹, Bianca R. Lopes (PG)¹, Paulo Cezar Viera (PQ)¹, Arlene G. Corrêa (PQ)¹, Carlos A. Montanari (PQ)², Quezia B. Cass* (PQ)¹

*qcass@ufscar.br

¹Departamento de Química, UFSCar, Rodovia Washington Luis s/n, km 235, Caixa postal 676, 13565-905, São Carlos/SP. ²Departamento de Física e Química, FCFRP, USP, Av. do Café s/no., 14040-903, Ribeirão Preto/SP.

³Instituto de Química, Departamento de Química e Física Molecular, USP, Avenida Trabalhador São Carlense, Parque Arnold Shimidt, Caixa postal 780, 13566-590, São Carlos/SP.

Palavras Chave: *Human Cathepsins, immobilized enzymes, Ligand Fishing, Inhibitors*

Highlights

This work presents a new LC-MS assay for measuring papain activity either in solution or immobilized in magnetic beads, and demonstrates that papain can be used as a model for screening some cysteine protease ligands.

Resumo/Abstract

Cathepsins play a key role in various disease states such as Alzheimer, schizophrenia and cancer¹, while cruzain is involved with Chagas disease². For these reasons, they are important targets in searching for new ligands that may act as inhibitors. A drawback in this search is that micrograms of these enzymes are very expensive or difficult to obtain as heterologous purified enzymes. The classical assays in solution require large quantities of reagents and enzymes that cannot be reused among other experimental problems. Thus, papain, a commercial cheap and stable enzyme, was herein used as a model for screening cysteine-proteases' ligands. For the assay, Z-Phe-Arg-7-amido-4-methylcoumarin hydrochloride (Z-FR-AMC · HCl) was used as substrate. This is the same fluorogenic substrate classically used for cysteine-proteases that yields 7-Amino-4-methylcoumarin, AMC, under hydrolysis. To avoid false-positives, the method herein described was carried out using LC-MS. The separation of Z-Phe-Arg and AMC was achieved using reverse-phase elution mode under isocratic conditions with a Poroshell HPH-C18 column (50 x 2.1 mm, 2.7- μ m), and ACN:H₂O 0.1% formic acid (32.5:67.5 v/v) as mobile-phase at a flow rate of 0.10 mL min⁻¹. The MS parameters optimized for the AMC ion [M-H]⁺ at 176 m/z were: capillary voltage of 4500 V; skimmer voltage: 63.8 V; nebulizer gas (N₂) 20 psi; dry gas (N₂) 6 L min⁻¹ and the source temperature set at 325 °C. The papain activity assay in solution showed a K_M of 52.9 \pm 3.12 μ M. Immobilized enzymes show advantages over classical assays in solution such as little sample volumes, increased lifetime and reuse yielding reproducible data. Moreover, it can be used in a much easier way for prospecting ligands from natural or synthetic library collections. To meet this end, papain was covalently linked onto the surface of modified magnetic beads using glutaraldehyde as a linker to produce P-MBs³. The P-MB has shown a K_M of 34.9 \pm 3.59 μ M. Studies on stability of the produced P-MBs showed, so far, that they are active for over six months. As a proof of concept, 10 known cysteine protease inhibitors including acridones, quinolinones, flavonoids^{4,5,6}, and dipeptidyl nitriles⁷ were screened as inhibitors of papain. The assays were carried out using the enzyme in solution and also as P-MBs. In solution, the percentage of inhibition ranged from 13 to 100% while with P-MBs the inhibition range was from 34 to 85%. In developing the screening assay for mixtures⁴, the 10 cysteine-protease inhibitors were submitted to a fishing assay with the P-MBs produced. The immobilized papain showed affinity for the 10 inhibitors tested and the results will be fully discussed in this paper.

1 Biom. Pharmac. **2018**. 105, 526-532;

2 Drug Discov. Today. **2015**. 20, 890-898;

3 Microchim. Acta. **2015**. 182, 2209-2213;

4 Eur. Jour. Med. Chem. **2012**. 54, 10-21;

5 Bioorg. Med Chem. **2011**. 19, 1477-1481;

6 Chem. Biodiv. **2014**. 11, 1-11;

7 Phys. Chem. Chem. Phys. **2018**. 37, 24317-24328

Área: ELE

(Inserir a sigla da seção científica para qual o resumo será submetido. Ex: ORG, BEA, CAT)

Nº de Inscrição: 00144

(Inserir o número de inscrição do autor que fez a submissão)

Remoção eletroquímica de Phenonip™ usando ânodo de mistura de óxidos metálicos comercial

Renan Nakamura (PG),^{1*} Artur J. Motheo (PQ).¹

artur@iqsc.usp.br; renan_nakamura@usp.br

¹Instituto de Química de São Paulo, USP.

Palavras-chave: Phenonip™; Parabens; Fenoxietanol; Tratamento Eletroquímico; Ânodo Dimensionalmente Estável;

Highlights

Electrochemical removal of Phenonip™ using commercial mixed metal oxide anode

Degradation of industrial preservative formulated with a mixture of parabens and phenoxyethanol; The degradations are performed in chloride medium; Degradations followed pseudo-first-order kinetics.

Resumo/Abstract

A contaminação do meio ambiente relacionada a substâncias farmacêuticas, cosméticos e produtos de cuidados pessoais está cada vez mais preocupante devido ao seu impacto ambiental e na saúde pública. Esta preocupação advém dos problemas ambientais causados pelo mau uso dos recursos hídricos, pelo descarte de efluentes sem tratamento prévio ou por tratamentos ineficazes e, pelos atuais sistemas de tratamento de efluentes que não eliminam com eficácia esses contaminantes.¹ O Phenonip™ é um conservante industrial muito utilizado na formulação de cosméticos e produtos de cuidado pessoa, o qual apresenta em sua formulação uma mistura de parabens (metil-, etil-, propil- e butil-parabeno) e fenoxietanol. Os parabens, mesmo em pequenas concentrações, podem causar diversos problemas para os humanos, animais e meio ambiente, sendo que diversos estudos mostraram que esses compostos podem afetar o sistema endócrino, além de estarem associados com o câncer de mama.² Entre as várias formas de exposição humana aos parabens, os recursos hídricos são os mais preocupantes e, por esse motivo são inúmeros os estudos que abordam a degradação dessas substância e, mais recentemente, a influência de interferentes reacionais no processo de degradação. O objetivo do trabalho foi aplicar a oxidação eletroquímica e foto-assistida, utilizando um ânodo de mistura de óxidos metálicos (MOM) comercial, com composição nominal Ti/Ru_{0,3}Ti_{0,7}O₂ e fornecido pela De Nora do Brasil, para a remoção do Phenonip™. O eletrodo foi previamente caracterizado por voltametria cíclica em 0,5 mol L⁻¹ H₂SO₄ utilizando uma célula de três eletrodos: MOM - eletrodo de trabalho; eletrodo de calomelano saturado - eletrodo de referência; eletrodo de titânio – contra eletrodo. Eletrólises exaustivas foram feitas com até 10 h de duração em célula do tipo prensa de fluxo contínuo nas densidades de corrente de: 50, 75 e 100 mA cm⁻², em 0,1 mol L⁻¹ de NaCl e 0,1%(v/v) de Phenonip™. O acompanhamento das remoções das substâncias presentes no Phenonip™ foi feito por cromatografia líquida de alta eficiência (CLAE). Nas oxidações eletroquímicas a eletrólise em 100 mA cm⁻² teve o menor tempo de remoção de todos os compostos, porém o melhor consumo energético foi em 50 mA cm⁻². No caso do processo eletroquímico foto assistido a densidade de corrente de 100 mA cm⁻² teve o menor tempo de remoção e ainda o menor consumo energético comparando também com as eletrólises sem a radiação ultravioleta. O fenoxietanol pode influenciar no processo de degradação dos parabens, uma vez que, removido completamente, foi verificada uma alteração no comportamento cinético destes compostos. O decaimento da concentração dos parabens e fenoxietanol ajustaram-se à uma cinética de pseudo primeira ordem.

[1] D. Bledzka, J. Gromadzinska, W. Wasowics, *Environ Int* 67 (2014) 27-42;

[2] J. Jagne, D. White, F. Jefferson, *Water Air Soil Pollut* (2016) 227:182;

[3] D. Dionisio, A.J. Motheo, C. Sáez, P. Cañizares, M.A. Rodrigo. *ChemElectroChem* (2019) doi: 10.1002/celec.201801332

Agradecimentos/Acknowledgments

FAPESP: Processos 2017/20444-1 e 2017/10118-0

Área: MED

Nº de Inscrição:00146

Synthesis and evaluation of trypanocidal activity of novel functionalized carbohydrazonamides

Mayara Salles Souza do Nascimento^{1,2}(PG), Juliana Silva da Costa^{1,3}(IC), Vitória Regina Fontes Câmara^{1,3}(IC), Juliana M. Chaves Barbosa⁴(IC), Alessandra Silva Maia Lins⁴(IC), Kelly Salomão⁴(PQ), Solange Lisboa de Castro⁴(PQ), Samir Aquino Carvalho¹(PQ), Edson Ferreira da Silva^{1,3}(PQ) and Carlos Alberto Manssour Fraga^{2,5}(PQ).

edson.ferreira@far.fiocruz.br; mayarasalles6@gmail.com

¹Instituto de Tecnologia em Fármacos e Farmanguinhos, Fundação Oswaldo Cruz, 21041-250 Rio de Janeiro, RJ, Brazil; ²Programa de Pós-Graduação em Farmacologia e Química Medicinal, Instituto de Ciências Biomédicas, Universidade Federal do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, RJ, Brazil; ³Unigranrio – Universidade do Grande Rio; Rua Prof. José de Souza Herdy, 1160, 25 de Agosto, Duque de Caxias, CEP 25071-202 – Rio de Janeiro – RJ, Brazil; ⁴Laboratório de Biologia Celular, Instituto Oswaldo Cruz, Fundação Oswaldo Cruz, 21040-900, Rio de Janeiro, RJ, Brazil; ⁵Laboratório de Avaliação e Síntese de Substâncias Bioativas (LASSBio), Instituto de Ciências Biomédicas, Universidade Federal do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, RJ, Brazil.

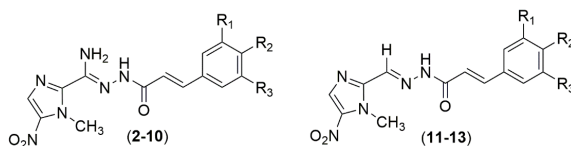
Palavras Chave: Carbohidrazonamidas, Tripanocida, Doença de Chagas

Highlights

The results obtained in this work allowed us to identify a novel series of functionalized carbohydrazonamides with trypanocidal properties.

Resumo/Abstract

American trypanosomiasis, also known as Chagas' disease (CHD), is caused by the protozoan hemoflagellate *Trypanosoma cruzi* belonging to the family Trypanosomatidae [1]. Since it was empirically developed in the 1970s, CHD therapy is restricted to two nitroheteroaromatic compounds: nifurtimox (Nfx) and benznidazole (Bz) [2]. We described herein the synthesis and the trypanocidal action of new functionalized carbohydrazonamides (**2-10**) against trypomastigote forms of *Trypanosoma cruzi*. These novel derivatives were structurally planned, exploiting the molecular hybridization [3] of two potent anti- *T. cruzi* compounds, megazol (**1**) and the trypanocidal *N*-acylhydrazone derivative (**14**), which was previously described by our research group as being twice as potent *in vitro* as benznidazole. The ¹H- and ¹³C-NMR spectra and mass spectra of all the synthesized compounds (**2-13**) were in full agreement with the proposed structures. All the compounds were obtained as a single diastereomer at the imine bond level. They present the more stable (*E*)-configuration in the case of *N*-acylhydrazone derivatives (**11-13**) and the corresponding (*Z*)-configuration in the functionalized carbohydrazonamides (**2-10**), due to the presence of favorable intramolecular hydrogen bonds between the amino group and the imidazole nitrogen and/or the amide N-H bond. The most active compounds were the (**6**) (IC₅₀ 9.50 μM) and the (**8**) (IC₅₀ 12.85 μM), which were almost equipotent to benznidazole (IC₅₀ 10.26 μM) used as standard drug. The removal of the amine group attached to the imine subunit in the corresponding *N*-acylhydrazone derivatives (**11-13**) resulted in less potent or inactive compounds. The *para*-hydroxyphenyl derivative (**8**) presented also a good selectivity index (SI = 32.94) when tested against mammalian cells from Swiss mice.



[1] Rassi, A.Jr.; Rassi, A. *Dis. Clin. North Am.*, **2012**, 26(2), 275-291.

[2] Wilkinson, S.R. *et al. Curr. Top. Med. Chem.*, **2011**, 11(16), 2072-2084.

[3] Viegas, Jr.C. *et al. Curr. Med. Chem.*, **2007**, 14(17), 1829-1852.

Fostering the development of representational competence skills: the case of computer-based simulation of acid-base titrations

Yuri Barros de Araujo (PG), Guilherme Andrade Marson* (PQ)

yuribarroso0@gmail.com; gamarson@iq.usp.br;

Instituto de Química – USP, Av. Prof. Lineu Prestes, 748, São Paulo – SP, CEP 05508-900

Keywords: *Representational competence, Chemical equilibrium, Simulation.*

A simple activity is proposed, suitable for common teaching settings. The study indicates that using the acid-base titration simulator CurTiPot fosters the development of representational competence skills.

Introduction

Chemical equilibrium is a central concept in chemistry. It is an ubiquitous topic in chemical curricula across all formative stages. However, it is often considered a topic difficult to teach and learn, which can be attributed to conceptual and methodological issues. In the case of the former, a major issue is that understanding chemical equilibria requires integrating different modes of conceptual representation in chemistry (phenomenological, symbolic and submicroscopic). Therefore, it crucially depends on the development of representational competence skills^{1, 2}. To these factors, one can associate learning obstacles, among those the several misconceptions already reported in the literature. These are known to persist across higher education and may even hinder proper undergraduate training. In this work, we propose a classroom activity based on computer-based simulations of acid-base titration experiments. Our working hypothesis stands for using the computer simulator as a convenient resource for providing learning opportunities to foster the articulation of different representational modes in chemical equilibrium, which thus would favour the development of representational competence skills.

Methodology

A 150-minute activity was designed and tested with 43 2nd semester undergrads from an introductory Analytical Chemistry discipline at the IQ-USP. It consisted of the following steps: i- questionnaire (pre-test) requesting the analysis of titration curves of the HCl with NaOH and the prediction of a titration curve of NaOH with acetic acid; ii- familiarization with the simulator, iii- simulation of titrations with the CurTiPot simulator (<http://www.iq.usp.br/gutz/Curtipot.html>); iv- questionnaire (post-test) entailing the interpretation of titration curves and requesting chemical equilibrium concepts at incremental complexity levels. Written records of students' production were interpreted and categorized by means of semi-quantitative scales related to the conceptual correctness and the degree of representational competence² development. The resulting data set was analyzed by hierarchical cluster analysis (HCA).

Results and Discussion

Table 1: Results obtained *via* HCA

| Group | n | Pre-simulation (%) | | | | | Post-simulation (%) | | | | |
|-------|----|--------------------|----|----|----|----|---------------------|----|----|----|----|
| | | 0 | 1 | 2 | 3 | 4 | 0 | 1 | 2 | 3 | 4 |
| A | 8 | | | 12 | 23 | 65 | | 4 | 11 | 31 | 54 |
| B | 10 | 5 | 10 | 25 | 50 | 10 | | 7 | 4 | 45 | 44 |
| C | 6 | 25 | 25 | 17 | 33 | | 2 | 36 | 9 | 43 | 10 |
| D | 12 | | 12 | 8 | 68 | 12 | | 4 | 11 | 53 | 32 |
| E | 7 | 7 | 29 | 7 | 36 | 21 | 6 | 22 | 14 | 27 | 31 |

Table 1 displays HCA results from pre and post-usage of the simulator, categorized according to the degree of representational competence requested in questionnaires, as follows: 0 – description only; 1 - first symbolic skills; 2 - syntactic use of formal representations; 3 - semantic use of formal representations; 4 - rhetorical and reflective use of representations. This scale also relates to high (HOCS) and low (LOCS) order demands of cognitive skills³.

It is noteworthy that several students (28 / 43 - in groups B, C and D) have apparently improved their skills in translating across different representational modes for the acid-base chemical equilibrium involved in titrations. Also, a conceptual shift from LOCS to HOCS on chemical equilibrium has apparently occurred.

Conclusions

Findings reported here suggest that the proposed activity significantly contributed to the development of representational competences for a relevant part of the cohort. This is considered very positive given the short time of instruction. One may reasonably agree that such results add-up to the empirical evidences of the advantages of using computer-based simulations of experiments in higher education.

¹ JOHNSTONE, A. H. *Journal of Chemical Education*, v. 70, n. 9, p.701-705, American Chemical Society (ACS), **1993**.

² KOZMA, R.; RUSSELL, J. *Visualization In Science Education*, p.121-145. Springer Netherlands, **2005**.

³ ZOLLER, U.; DORI, Y.J.; LUBEZKY, A. *International Journal of Science Education*, v. 24, p. 185-203, **2002**.

1D- and 2D- luminescent coordination polymers: ligand effect on rare earth phosphinates' structures

Paloma R. de Castro (IC)¹, Gabriela L. E. Teotônio (IC)¹, Luís F. B. Bim (PG)¹, Marco A. Cebim (PQ)^{1*}

paloma_regina_castro@hotmail.com; marco.cevim@unesp.br

¹UNESP – São Paulo State University, Institute of Chemistry, Department of General and Inorganic Chemistry, Luminescent Materials Laboratory, Araraquara, São Paulo, Brazil

Keywords: Nanowires, Nanostructured Materials, Lamellar Structure, Low Dimensionality, Coordination Compounds

Highlights

Implications on luminescent rare earth phosphinates' structures by modifying the ligand composition – from 1D1 to 2D2: effect of the phenyl group.

Abstract

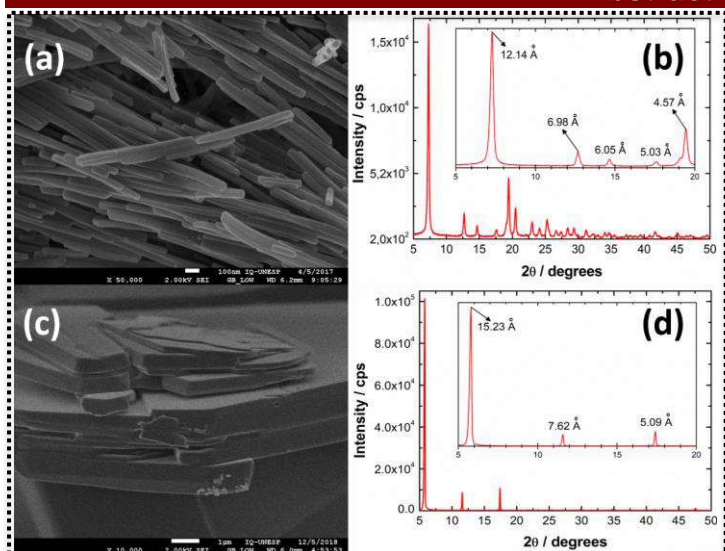


Figure 1: WRS europium(III) diphenylphosphinate (a) SEM-FEG photomicrograph @ 50,000 x, (b) XRD pattern, with emphasis on the region between 5 and 20 2θ-degrees, and WRS europium(III) phenylphosphinate (c) SEM-FEG photomicrograph @ 10,000 x, (d) XRD pattern, with emphasis on the region between 5 and 20 2θ-degrees.

Trivalent rare earth phosphinates give rise to coordination polymers (CP) in which the precipitated particles dimensionality depends on the structure of the phosphinates ligands. Rare earth diphenylphosphinates ($[\text{RE}(\text{dpp})_3]_n$) are one-dimensional CP consisting of 1D1-type particles, with an asymmetric unit containing two hexacoordinated metal centers – two coordinated ligands in the chelate form and a bridging ligand; these compounds exhibit high chemical and thermal stabilities ($\sim 450^\circ\text{C}$ onset thermal decomposition temperature). The ligand exchange (diphenylphosphinate, $\text{dpp} \rightarrow$ phenylphosphinate, mpp) decreases the steric hindrance around the metal centers allowing the formation of two-dimensional CP (consisting of 2D2-type particles) with a lamellar structure. This change results from the modification of the coordination sphere and coordination modes; in rare earth phenylphosphinates, a ligand is in the bidentate form (chelate type) and, other two, in

monodentate form (one of them in its protonated form, i.e., phenylphosphinic acid). One of the simplest ways of obtaining rare earth phosphinates is through wet route precipitation synthesis (WRS) with the titration of the ligand solution by the metal solution. It was evaluated: for (i) rare earth phenylphosphinates – synthesized @ 72°C with ethanol/water (1:1, v:v) as solvent and $\text{N}_2(\text{g})$ as atmosphere –, the structure type originated from the use of different trivalent rare earth cations (e.g., Y^{3+} , La^{3+} , Pr^{3+} , Sm^{3+} , Eu^{3+} , Gd^{3+} , Tb^{3+} , Er^{3+} and Lu^{3+}), and for (ii) rare earth diphenylphosphinates, the structure type originated from the use of different synthetic conditions (e.g., @ 32, 42, 52, 62, 72 or 82°C ; ethanol/water (3:1; 1:1; 1:3, v:v), ethanol, methanol or toluene as solvent and $\text{N}_2(\text{g})$, $\text{H}_2(3\%)/\text{N}_2(\text{g})$ mixture or air as atmosphere). Europium(III) diphenylphosphinates give rise to nanowire-shaped particles, with the diameter ($\sim 30\text{ nm}$) practically invariant with the preparation conditions/approaches. The length, on the other hand, depends heavily on the preparation conditions/approaches, with wires ranging from hundreds of nanometers ($\sim 500\text{ nm}$) to practically $10\ \mu\text{m}$. The wires growth is directly related to the presence of water in the reaction medium, with negligible dependence on the temperature in the studied range; the $\text{H}_2(3\%)/\text{N}_2(\text{g})$ mixture atmosphere preparations resulted in histograms of diameter and length with less dispersion. As for rare earth phenylphosphinates, these are lamellar compounds for the larger RE^{3+} cations (i.e., higher ionic radii). The $\text{RE}^{3+}/\text{ligand}$ size ratio alters the structure and consequently the shape of the particles obtained after Tb^{3+} . Generally, for larger RE^{3+} cations are obtained lamellar structures formed by 2D2-type particles and, for the smaller ones, 1D1-CP.

Reference

Journal of Luminescence 203 (2018) 105–112

Acknowledgments

CNPq and CAPES – Brazilian Agencies

Área: EDU

Nº de Inscrição: _____

Teaching density in a plural perspective on learning: a case study in higher education

Douglas Cezars A. R. Almeida (IC)^{1*}, Denis Ricardo Martins de Godoi (PQ)¹, Amadeu Moura Bego (PQ)¹.

douglas.cezars@unesp.br; amadeu.bego@unesp.br.

¹São Paulo State University (UNESP), Institute of Chemistry, Araraquara, Brazil.

Keywords: *Conceptual Change, Conceptual Profile, Plurality, Misconceptions, Density, Chemical Education.*

Highlights

In which way an experimental activity, that uses cognitive conflict, influences the process of learning the concept of density in students of an undergraduate chemistry course?

Abstract

The purpose of this study is to evaluate the way in which an experimental activity, that uses cognitive conflict, influences the learning process of the concept of density. An experimental script that uses cognitive conflict was used during students' practical activity in the first semester of an undergraduate chemistry course in order to modify possible misconceptions. A case study was carried out with the purpose of operating the research process and obtaining answers to the objective of the study. According to the applied research approach, the sources of information were documents produced by the students. The documents used were: the hypotheses and observations made during the practical activity and the reports made after the activity. Data collection was performed in two different moments: firstly, hypotheses were collected during the practical activity and, one week later, the reports prepared by the groups were also collected. Data analysis was performed by the Content Analysis method. It was shown that in situations where the concept of density was not accommodated in the conceptual ecology of students, they tended to transpose their conceptions between common sense and scientific knowledge, indicating that there was no conceptual change, but rather, some movement of conceptual evolution. The case study also revealed occurrences in which the conceptual conflict was able to allow students to accommodate the scientific concept of density to their conceptual ecology, and it can be said that in these cases the students went through a process of conceptual change. Therefore, the results showed that students can go through both processes: conceptual change and evolution of the conceptual profile. It was also verified that, in some cases, prior conceptions (based on common sense) of some students tend to remain, demonstrating that misconceptions are highly resistant to change. Data analysis showed that the evolution of the conceptual profile can result in a conceptual change in some cases, evidencing that it is important to adopt a plurality of teaching models in order to understand the teaching and learning process and to increase the learning opportunities for the students.

Acknowledgments

The authors would like to thank the Institute of Chemistry of São Paulo State University for supporting this research.

A simple and fast method for Bisphenol S determination in thermal papers samples

Jean C.P. Sousa (IC), ¹ Ricardo A. Bernardo (PG), ¹ Matheus Gallimberti (PG), ² Fernando Barbosa Junior (PQ), ² Boniek G. Vaz (PQ), ¹ Andréa R. Chaves (PQ). ^{1*}

Jeanpsousa01@gmail.com;

¹Instituto de Química, Universidade Federal de Goiás, Goiânia - GO, Brazil

²Faculdade de Ciências Farmacêuticas de Ribeirão Preto, Universidade de São Paulo, Ribeirão Preto -SP, Goiás

Palavras Chave: BPS; Paper Spray; Spectrometry.

Highlights

Direct use of thermal paper sample for BPS analysis. Optimization of the parameters for the paper spray ionization method. No sample preparation step.

Resumo/Abstract

Toxicolysis studies show that Bisphenol A (BPA) as well as Bisphenol S (BPS), may exhibit estrogenic activities. Being used in the manufacture of polycarbonate plastics (bottles, crockery, food packaging), and thermal papers ^{1,2}. BPS is one of the most used compounds as a substitute for BPA, being widely used in the manufacture of cash receipts in thermal papers as a major color-revealing component. In 2016, the European Union decided to set a maximum concentration limit of 200 $\mu\text{g g}^{-1}$ of BPA or BPS in thermal paper. Ionization methods such as; Paper Spray Ionization mass spectrometry (PSI-MS), desorption electrospray (DESI) and direct real-time analysis (DART) are constantly used in complex matrices analyzes. PSI-MS is a qualitative/quantitative, which is fast, accurate, and easy to perform technique. Therefore, in this study a new methodology for direct BPS determination based on PSI-MS was developed. The developed method variables such as paper dimension, desorption voltage, and mass spectrometry parameters were evaluated. According to these parameters, higher sensibility was observed with the triangular shape of the thermal paper with sides measuring 1.5 cm positioned at a distance of 5 to 7 mm from the ion MS inlet, using -5 kV as source voltage, 274 °C as capillary temperature, and methanol as elution solvent. All MS analysis were performed using a Thermo LCQ Fleet mass spectrometer. According to the results, this method showed to be fast, accurate and cheaper than traditional chromatographic methods.

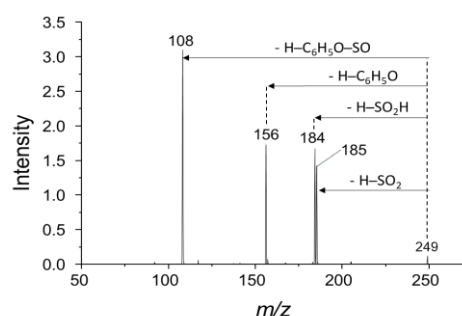
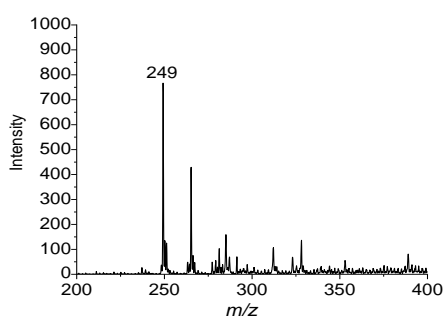


Figure 1. MS spectrum of the BPS analysis. **Figure 2.** MS/MS spectrum of the BPS analysis.

- Rosenmai, A. K. *et al.* Are structural analogues to bisphenol a safe alternatives? *Toxicol. Sci.* **139**, 35–47 (2014).
- Ruan, T. *et al.* Evaluation of the in vitro estrogenicity of emerging bisphenol analogs and their respective estrogenic contributions in municipal sewage sludge in China. *Chemosphere* **124**, 150–155 (2015).

Agradecimentos/Acknowledgments



Área: EDU

Nº de Inscrição: 00153

"OUR DAILY CHEMISTRY": THE USE OF A DIDACTIC SEQUENCE IN THE PERIODIC TABLE TEACHING

Acássio Paiva Rodrigues (IC)¹, Luciana Rodrigues Leite (PQ)¹

acassiopaiva1@hotmail.com; lurodleite@gmail.com

¹Coordenação de Química, Universidade Estadual Vale do Acaraú (UVA).

Keywords: *Didactic sequence. Chemistry teaching. Periodic table.*

Highlights

- It was elaborated a didactic sequence, about the content of the periodic table, and applied to students of the basic education.
- Were used diverse activities: Puppets, parodies, games, etc.

Resumo/Abstract

"Our daily chemistry" is about an extension project, associated to the Vale do Acaraú state university, and which objective consists in contributing to changes in the chemistry teaching context, through the inserting of didactic sequences (DS) in 1° grade classes of the secondary school. Developed in a public school of the municipality of Sobral, the DS about to be presented in this work was elaborated by scholarship holders/licentiates and applied in a 30 students class of the referring school, concerning about the content periodic table. The DS was realized in 05 classes with diverse activities: Puppets (Periodic table historic), organograms (elements and substances), Parody (organization of the periodic table), Flame test (Chemistry elements characteristics) and roulette (knowledge survey). For the data collection was applied a questionnaire. The first question presented a comic strip where some elements were cited and the students were to classify them. 93% of the students answered correctly the question, indicating that were metals. The second question addressed the characteristics of the metals, 83% cited correctly these characteristics. The third question addressed the classification of the elements in periods and families, 87% answered correctly. Among the activities developed in the DS, the students indicated the roulette as the one that they most enjoyed (47%). The application of the sequence, given the analysis of the questionnaires, turned up significant stimulating students learning. It is still emphasized, that were obtained positive and promising results which confirm the potentialities of this methodology in the classroom.

Agradecimentos/Acknowledgments

Universidade Estadual Vale do Acaraú – UVA.

Área: MED

(Inserir a sigla da seção científica para qual o resumo será submetido. Ex: ORG, BEA, CAT)

Nº de Inscrição: 00155

(Inserir o número de inscrição do autor que fez a submissão)

Síntese e avaliação tripanocida de novas cumarinas *N*-acilidrazônicas planejadas como potenciais agentes antichagásicos

Samir Aquino Carvalho (PQ)^{1*}; Vitória R. F. Câmara (IC)^{1,2}; Camila Capelini (PG)^{1,3}; José D. Figueroa Villar (PQ)³; Juliana M. Chaves Barbosa (IC)⁴; Kelly Salomão (PQ)⁴; Solange Lisboa de Castro (PQ)⁴; Edson F. da Silva (PQ)^{1,2}

samircar@gmail.com

1- Fiocruz- Fundação Oswaldo Cruz, Instituto de Tecnologia em Fármacos-Farmanguinhos Rua Sizenando Nabuco, 100, Manguinhos, 21041-250, Rio de Janeiro, RJ.

2- Unigranrio- Universidade do Grande Rio; Rua Prof. José de Souza Herdy, 1160- 25 de Agosto- Duque de Caxias; CEP 25071-202- Rio de Janeiro, RJ.

3- Instituto Militar de Engenharia; Departamento de Química; Praça General Tibúrcio 80, Praia Vermelha-Rio de Janeiro- RJ, 22290-270.

4- Laboratório de Biologia Celular, Instituto Oswaldo Cruz, Fundação Oswaldo Cruz, 21040-900, Rio de Janeiro, RJ, Brasil;

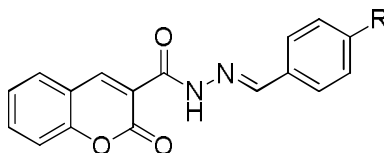
Palavras Chave: *Trypanosoma cruzi*, Doença de Chagas; Cumarinas.

Highlights

Planejamento, síntese e avaliação tripanocida de uma nova família de *N*-acilidrazonas cumarínicas planejadas como agentes tripanocidas. Foram sintetizados 10 novos derivados cumarínicos e suas atividades tripanocida foram avaliadas em testes *in vitro*. O derivado R = OCH₃ apresentou atividade tripanocida preliminar.

Resumo/Abstract

A doença de Chagas é uma zoonose causada pelo *Trypanosoma cruzi*. Esta parasitose endêmica representa um grave problema de saúde pública nos países tropicais. Atualmente a terapia utilizada no Brasil tem eficácia limitada, sendo apenas eficiente na fase aguda da doença¹. Carvalho *et al.* sintetizaram novas *N*-acilidrazonas, que em testes *in vitro*, foram duas vezes mais ativas do que o medicamento de referência Benznidazol². O objetivo deste trabalho é o planejamento, síntese e avaliação biológica de uma nova família de *N*-acilidrazonas cumarínicas destinadas ao tratamento da doença de Chagas. As *N*-acilidrazonas cumarínicas foram planejadas estruturalmente explorando o conceito de hibridação molecular de dois potentes agentes tripanocidas a cumarina chalcona ((*E*)-3-(3-(2,5dimetoxifenil)acrilóil)-2*H*-cromen-2-ona) e o derivado *N*-acilidrazônico ((*E*)-3-hidroxi*N*-((3-hidroxi-naftaleno-2-il)metileno)-7-metoxi-2-naftohidrazida. Os dez novos análogos foram sintetizados em bons rendimentos globais (55-84%). Os espectros de RMN ¹H e ¹³C, massas e IV estão de acordo com as estruturas propostas. A atividade tripanocida preliminar de cinco derivados foi avaliada em teste *in vitro* na forma tripomastigota na concentração de 20µM. Os derivados R = H; R = F; R = Cl e R = Br mostraram-se inativos na concentração testada. Apenas o derivado R = OCH₃ apresentou atividade na concentração testada.



¹ Ferreira, W. S; *et al. Bioorg. Med. Chem.*, **2008**, v. 16, n. 6, p. 2984-2991.

² Carvalho, S. A. *et al. Bioorg. Med. Chem. Lett.*, **2004**, v. 14, n. 24, p. 5967-5970.

Agradecimentos/Acknowledgments

Farmanguinhos.

BARALHO DA TABELA PERIÓDICA: PARA O ENSINO E APRENDIZAGEM DAS PROPRIEDADES PERIÓDICA E APERIÓDICA DA TABELA PERIÓDICA

João M.L. Rocha (IC)¹; Francisco C.S Neto (IC)¹; Thaylon R. Silva (IC)¹; Ruan R.C Nascimento (IC)¹; Elismar A. Brito (IC)¹; Roosman Q. Barreira (IC)¹; Endyorry B. oliveira (IC)¹; Tatiani da L. Silva (PQ)².
tls1981@hotmail.com; joamaitlr@hotmail.com.

¹Universidade do Estado do Pará – Campus Conceição do Araguaia, UEPA; ²Universidade Federal do Sul e Sudeste do Pará, Unifesspa.

Palavras Chave: (Ensino de Química, Lúdico, Tabela Periódica).

Highlights

PACK OF THE PERIODIC TABLE: FOR THE TEACHING AND LEARNING OF THE PERIODIC AND APERIODIC PROPERTIES OF THE PERIODIC TABLE

The learning of chemistry subjects always has been considered complicated and in some cases to remove the thought from the student and make teaching new teaching methodologies have been developed over time and one of them are the games that are considered by many researchers as an efficient tool for teaching and learning.

Resumo

Os benefícios da incorporação de jogos no contexto de ensino e aprendizagem, segundo Grandó (2001), são a introdução e desenvolvimento de conceitos de difícil compreensão; participação ativa do aluno na construção do seu próprio conhecimento; socialização entre alunos e a conscientização do trabalho em equipe, além de motivar os alunos a participarem da aula. Este trabalho teve como objetivo geral apresentar uma proposta de jogo didático para trabalhar o assunto de tabela periódica para o ensino-aprendizagem de alunos do ensino fundamental e médio, contendo também como objetivos específicos, despertar o interesse dos alunos com relação ao assunto da tabela periódica e suas propriedades; demonstrar a importância da tabela periódica para o ensino de química através do jogo elaborado. No dia 30 de outubro de 2018 foi aplicado o jogo intitulado BARALHO DA TABELA PERIÓDICA para uma turma de CN-Química da UEPA – Campus Conceição do Araguaia. O jogo propõe ao aluno aprender sobre as propriedades periódicas e aperiódicas da tabela a saber: nome e sigla do elemento químico, massa atômica, número atômico, período, família e distribuição eletrônica. Antes da aplicação do jogo a maioria dos alunos da turma citada anteriormente tinham uma perspectiva muito limitada sobre o ensino a tabela periódica, pois, até então o professor da disciplina que ministrou esse assunto anteriormente, trabalhou o assunto de forma expositiva deixando a desejar em sua metodologia. Em contrapartida, a proposta do jogo deixou os alunos motivados e interessados, pois o mesmo propõe através do baralho da tabela periódica jogar o truco e o jogo do burro. Levando em consideração os expostos trabalhados nesta pesquisa pode-se perceber que o baralho da tabela periódica teve uma grande significância para o ensino-aprendizagem do assunto tabela periódica para os alunos da turma em que o mesmo foi aplicado. Cabe destacar que as cartas do jogo já foram apresentadas prontas para os alunos, após uma introdução teórica sobre a Tabela Periódica e suas propriedades. Eles tiveram apenas que aprender as regras do jogo. No entanto, o interesse por parte dos alunos foi grande, e alguns queriam jogar mais vezes e mostraram-se dispostos a montar um conjunto de cartas com os dados da tabela para que pudessem jogar em casa com os irmãos e amigos. Esperamos que este jogo sirva também para demonstrar aos professores sobre a importância de se trabalhar com o lúdico em sala de aula.

Figura: Aplicação do jogo elaborado.



Agradecimentos

À Unifesspa e à UEPA.

Área: EDU

Nº de Inscrição: 00158

Gelatina fluorescente: uma demonstração em comemoração ao Ano Internacional da Tabela Periódica 2019

José C. Barros (PQ),¹ Ricardo C. Michel (PQ),¹ Juliana da S. Goulart (PG),¹ Yasmim Jaconiano (IC),¹
 jbarros@iq.ufrj.br

¹Instituto de Química, Universidade Federal do Rio de Janeiro, Centro de tecnologia, Bloco A, Cidade Universitária, RJ

Palavras Chave: IYPT2019, Impressão 3D, Fotoquímica, Gelatina, Fluorescência, Tabela Periódica.

Highlights

Fluorescent jelly: a demonstration for the International Year of Chemistry 2019. Fluorescent jellies prepared in plastic molds constructed from 3D printed Periodic Table are appropriate for consumption and opens up the discussion about 3D printing, photochemistry and natural products in class.

Resumo/Abstract

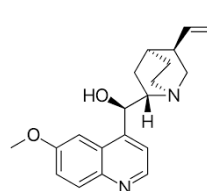
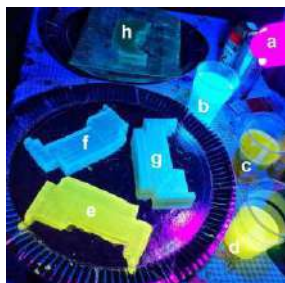
Fotoquímica é um conteúdo raramente abordado em disciplinas de Química Orgânica Experimental, a fim de solucionar este problema e inspirado pelo Ano Internacional da tabela Periódica (IYPT2019), este trabalho teve como objetivo ilustrar aos alunos alguns conceitos de fotoquímica e de impressão de materiais em 3D fazendo uso de uma gelatina em formato de tabela periódica que fluoresce sob irradiação de luz UV.

Inicialmente foram confeccionadas formas de tabela periódica para a gelatina utilizando uma impressora GTMax3D Core A3 v2 e foi produzida uma tabela periódica em ABS (Figura 1). Esta tabela, medindo aproximadamente 15 x 8 x 0,5 cm, foi então utilizada como molde na preparação de formas de PET (usualmente conhecidas como formas de acetato) pela técnica de moldagem a vácuo da folha quente.

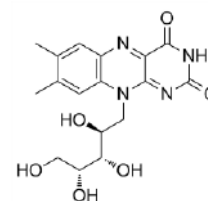
De posse das formas, foram preparadas gelatinas sem sabor empregando água tônica (<https://youtu.be/9W7zPf7JQHQ>), água com acréscimo de uma cápsula de vitamina B2 (riboflavina) e gelatina sabor limão empregando água tônica (Figura 1). Os resultados mostraram que sob ação da luz negra as três gelatinas fluoresceram, entretanto no caso da gelatina de limão foi observada considerável supressão da fluorescência que foi atribuída aos ingredientes da formulação da gelatina.

A gelatina foi preparada em cozinha doméstica utilizando materiais encontrados em supermercados, enquanto a vitamina B2 foi obtida em loja de produtos naturais e suplementos. As gelatinas prontas foram mostradas aos alunos no refeitório da instituição para evitar contaminação com materiais de laboratório. Assim, todas as gelatinas preparadas puderam ser ingeridas pelos alunos, ressaltando-se que apenas uma cápsula da vitamina foi utilizada, que corresponde a dose diária recomendada para adulto.

Esta demonstração permite assim a discussão de diversos tópicos de interesse dos alunos, tais como impressão em 3D, fotoquímica (fluorescência e fosforescência, diagrama de Jablonski), química de produtos naturais (quinina, vitamina B2, colágeno). Os resultados desta demonstração foram submetidos à competição #ispyaperiodictable da Sociedade Americana de Química (ACS).



k



l

Figura 1. Materiais utilizados na demonstração e estrutura das substâncias fluorescentes: (a) luz negra, (b) água tônica (contém quinina), (c) red bull (alternativa a vitamina B2), (d) vitamina B2 dispersa em água, (e) gelatina contendo vitamina B2, (f) gelatina contendo quinina, (g) tabela periódica impressa em 3D, (h) gelatina sabor limão preparada usando água tônica, (i) molde de tabela periódica, (j) gelatina sem sabor, (k) estrutura da quinina, (l) estrutura da vitamina B2 (riboflavina).

Agradecimentos/Acknowledgments

Os autores agradecem o apoio financeiro de CAPES, CNPq e FAPERJ.

Avaliação da corrosão *in vitro* de diferentes encordoamentos de guitarra elétrica.

Marcelo H. V. da Silva (FM)*,¹Amanda F. S. Assis (FM),¹ Edison A. Rodrigues (FM),¹Ellen M. dos S. Araújo (IC),¹Renata C. Oliveira de Figueiredo (IC).¹Raimundo N. Neto (FM). Saulo C. Caraveo (PG).

marcelo.silva@ifpa.edu.br;

¹Coordenação de Química, IFPA;)

Palavras Chave:Corrosão, Guitarra elétrica, Níquel.

Highlights

Evaluation of *in vitro* corrosion of different strings of Guitar.

Evaluation of *in vitro* corrosion of different electric guitar strings.

To detect the chemical constituents released and the morphology of the main guitar strings

The simulated fluid aging

Resumo/Abstract

A guitarra elétrica foi inventada no século XX, não somente por um criador, mas como resultado da evolução contínua de instrumentos como o violão e a partir de experiências de vários colaboradores na tentativa de criar um instrumento de corda com uma potência sonora maior. O objetivo deste trabalho é detectar os constituintes químicos liberados e a morfologia das principais cordas de guitarra vendidas no mercado antes e após serem submetidas à ambientes corrosivos, para a caracterização foi utilizando a microscopia eletrônica de varredura (MEV), sistema de micro-análise, espectroscopia de raio-x por dispersão em energia (EDS). Nas guitarras elétricas, as composições das cordas são usualmente de aço estanhado (aço martensítico), pois essas ligas à base de estanho permitem obtenção de peças finas com melhor reprodutibilidade de detalhes, são mais leves, apresenta dureza elevada e maior brilho. As cordas bordões apresentam aço martensítico no núcleo e no envoltório o aço é níquelado (aço ferrítico), típico de aço com baixo teor de carbono. Existem relatos que o contato contínuo com as cordas provoca problemas na pele, como irritações que podem causar dermatites. Este problema é uma consequência do processo de corrosão das cordas principalmente das bordões, que liberam níquel, um metal com alto potencial alergênico. Além disso, a corrosão também diminui a qualidade do som. Foram pré-selecionadas duas amostras de diferentes marcas e caracterizadas por ensaios de corrosão, EDS, e metalografia. Cada amostra depois de removidas das embalagens foram seccionadas em 5 fragmentos de 2 cm, onde 2 amostras foram embutida para a micrografia e 2 para o envelhecimento em fluido simulado e 1 para o grupo controle. O MEV foi realizado antes e após o processo de envelhecimento, submetendo as cordas a ambiente de corrosão *in vitro* expondo-as em solução de suor artificial, seguida pela norma EN1811:2011, estabelecida pela União Europeia, durante 28 dias sendo monitoradas em intervalos de 7 dias. No resultado da análise dimensional identificamos que todas as amostras apresentaram uma excelente uniformidade dimensional sendo o desvio padrão para todas as medidas de 0,001mm. Já no ensaio de corrosão as duas amostras tiveram comportamentos opostos para esse ensaio, onde a amostra BS apresentou a menor taxa de corrosão bem reduzida se comparada a concorrente. Ficou evidenciada durante os ensaios a formação do produto de corrosão de cor amarelada somente nas extremidades da corda imersa na solução, onde não existia o revestimento polimérico já que a corda foi seccionada. A amostra NG apresentou corrosão acentuada com uma perda de massa superior a 14,8%. Os espectros foram obtidos a partir de maiores áreas para visualizar a dispersão dos elementos na microestrutura. Todas as amostras apresentaram uma composição de um aço carbono com a presença de alguns elementos a liga como silício e magnésio. O silício é usualmente utilizado para aumentar a resistência mecânica e para o aumento da resistência à corrosão, além de ser agente desoxidante. A partir dos resultados apresentados, foi possível caracterizar as duas amostras selecionadas, evidenciando diferenças entre as mesmas. Onde identificamos que a amostra BS apresentou maior desempenho na resistência à corrosão.

Rezić, Iva and Ujević, Magdalena and Ćurković, Lidija (2014) *Investigation of metal ion release from violin, viola, and cello strings after dissolution in corrosive solution. = Investigation of metal ion release from violin, viola, and cello strings after dissolution in corrosive solution.* Materials and Corrosion, 65 (9). pp. 931-934. ISSN 0947-5117.

Agradecimentos/Acknowledgments

Os autores agradecem ao IFPA, aos Laboratório de Corrosão e Engenharia de Materiais do IFPA.

42ª Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química: Eixos Mobilizadores em Química

Área: QPN

Nº de Inscrição:00162

Identificação de flavonóides em folhas de *Phyllanthus* sp. (Phyllanthaceae) por LC-MS

Raimundo Negrão Neto* (FM)¹, **Luziane da Cunha Borges** (PG)², **Sônia das Graças S. R. Pamplona** (TM)², **Consuelo Yumiko Yoshioka e Silva** (PQ)², **Milton Nascimento da Silva** (PQ)², **Ketlyn Edivani Coelho de Oliveira** (IC)², **Geycianne Teixeira Noronha** (IC)², **Marcelo Henrique Vilhena Silva** (FM)¹.

negraoneto@yahoo.com.br; **luziane_borges22@yahoo.com**; **sgpamplona@yahoo.com.br**;
yumikoyoshioka@yahoo.com.br; **yumilton@yahoo.com.br**; **ketlynoliveira@gmail.com**;
marcelo.silva@ifpa.edu.br

¹Departamento de Química, IFPA; ²Departamento de Química UFPA

Palavras Chave: (*Phyllanthaceae*; *Phyllanthus* sp.; Flavonóides; LC-MS).

Highlights

Identification of flavonoids in leaves of *Phyllanthus* sp. (Phyllanthaceae) by LC-MS.

Five compounds were identified from *Phyllanthus* sp. belonging the class of flavonoids.

Flavonoids are an important class of natural products, have substances with variable phenolic structures with relevant pharmacological properties.

Resumo/Abstract

Na medicina tradicional, diversas espécies pertencentes ao gênero *Phyllanthus* são conhecidas popularmente como quebra-pedra e utilizadas especialmente para o tratamento de litíase renal e como diurético¹, dentre essas espécies encontra-se *Phyllanthus* sp., que ainda apresenta poucos estudos fitoquímicos. Considerando que a composição química de espécies do gênero *Phyllanthus* é fonte de compostos pertencentes a classe dos flavonoides que atualmente apresenta um número crescente de publicações devido às suas propriedades biológicas (antibacteriano, antiviral, anti-inflamatório etc.)², O presente trabalho objetivou investigar a composição química do extrato metanólico das folhas de *Phyllanthus* sp. (EMFL) por cromatografia líquida acoplada a espectrometria de massas. As folhas foram coletadas na cidade de Abaetetuba, estado do Pará, em seguida foram limpas e depois secas em estufa de ventilação a 45°C, as folhas foram trituradas e submetidas a extração a quente por banho ultrassônico com metanol. O extrato obtido passou por um pré-tratamento de Extração em Fase Sólida (SPE) para retenção de interferentes. As análises via LC-MS foram realizadas em um espectrômetro de massas XEVO G2-S QToF (Waters®) com fonte de eletrospray (ESI) acoplado a UPLC, onde uma alíquota de 5µL do EMFL foi eluída em modo gradiente linear na faixa de composição de fase móvel 5-95% durante 20 minutos sob uma temperatura de 40 °C, em fluxo de 0,3 mL/min. As análises via LC/MS-MS de EMFL realizadas no modo negativo de ionização possibilitaram a identificação dos seguintes compostos: catequina e epicatequina, m/z 289 (M-H), com os fragmentos m/z 245 e m/z 205 oriundos a partir de uma fissão do anel heterocíclico e m/z 179 originado a partir da perda de uma unidade catecol; rutina, m/z 609 (M-H), observando principalmente o fragmento em m/z 301 correspondente a perda da unidade rutinosídeo por hidrólise; a astragalina m/z 447 (M-H), a qual perde uma hexose neutra para gerar um fragmento m/z 285, e os fragmentos m/z 255 e 227 típicos de derivados de canferol. E o canferol com os fragmentos m/z 255, 227, 117 e 93. A identificação desses cinco compostos foi feita por comparação de espectros de fragmentação de massas (MS) encontrados na literatura e em bases de dados de fragmentação. Todos pertencentes a classe dos flavonoides, os quais já foram isolados e/ou identificados em espécies do gênero *Phyllanthus*, com ressalva de que estes estão sendo relatados pela primeira vez para a espécie *Phyllanthus* sp. Tais resultados contribuem ao enriquecimento do conhecimento químico da espécie em estudo, por apresentar compostos relatados pela primeira vez e ainda por estes pertencerem a classe dos flavonóides, que apresentam grande interesse por suas propriedades farmacológicas comprovadas cientificamente.

Referências

- 1-YAO, N.; KAMAGATÉ, M.; AMONKAN, A.K.; KOFFI, C.; KPAHE, F.; KOUAMÉ, M.; DIÉ-KACOU, H. Comparative effects of aqueous extract of *Phyllanthus* amarus and its fractions on urinary excretion in rat. *J. Phytopharmacol.*, v. 5, p. 182-184, 2016.
- 2-PANCHE, A,N; DIWAN, A. D.; CHANDRA, S. R. Flavonoids: an overview. *J Nutr Sci.* v.47, n.5, p. 1-15, 2016.

Agradecimentos/Acknowledgments

Os autores agradecem a UFPA, ao IFPA, ao Laboratório de Cromatografia Líquida (LABCROL) e a CAPES pelo auxílio financeiro.

Síntese de nanotubos de óxido de nióbio e aplicação destes como suporte na imobilização de enzimas.

Thays Cordeiro da Silva (IC),^{1*} Cristiane Pilissão (PQ).¹

thays.2013@alunos.utfpr.edu.br

¹Departamento de Química e Biologia (DAQBi), UTFPR;

Palavras Chave: Nanotubos de nióbio, método hidrotérmico, imobilização de enzimas.

Highlights

Synthesis of niobium oxide nanotubes and support applications in enzyme immobilization. The synthesis of the niobium nanotube was carried out through the hydrothermal method and through the mev, met and Raman indicated the efficient formation of the same and due to its properties showed to be an excellent support to immobilize the enzymes.

Resumo/Abstract

Desde a descoberta dos nanotubos de carbono em 1991, a classe dos nanotubos vem despertado muito interesse devido a suas propriedades, elevada área superficial, estabilidade química, térmica entre outras. Assim o interesse em novas rotas sintéticas para a produção de nanotubos, especialmente a partir de óxidos, tais como, TiO_2 , SiO_2 , Al_2O_3 , MoO_3 , Nb_2O_5 , tem crescido nos últimos anos devido a vasta aplicação em diversas áreas, tais como, catálise, células solares, sensores de gás e armazenamento de hidrogênio, suporte. A síntese dos nanotubos de nióbio (NTNbs) foi realizada pelo método hidrotérmico. Inicialmente foram adicionados 100 mL de uma solução de NaOH (9, 10 e 12 mol/L) e 3 g de pentóxido de nióbio em um reator de teflon, o reator foi mantido em estufa de 24 a 48 horas nas temperaturas de 120 a 180 °C. Após o tempo estimado, o material passou por um processo de lavagem com uma solução de ácido clorídrico 0,1 mol/L até obter um pH inferior a três e depois com água até pH neutro. O material resultante foi submetido novamente ao processo descrito anteriormente. O material obtido foi caracterizado através de espectroscópicas de Microscopia Eletrônica de Varredura (MEV), Difração de Raios X (DRX), Microscopia eletrônica de transmissão (MET) e espectroscopia dispersiva de Raios-X (EDS). Comparando material de partida e o produto pelo EDS foi constatado que após a lavagem o material passava a conter também sódio e cloro. E fazendo a mesma comparação pelo MEV observamos a mudança de morfologia do material, onde o material de partida (**figura 1 a**) apresentava a forma de aglomerados majoritariamente esféricos e o produto (**figura 1 b**) apresentava morfologia tubular com diâmetro variando entre nanômetros e micrometros. Através do MET (**figura 1 c**) analisamos que pode ter ocorrido a formação de nanobastões ao invés de nanotubos, uma vez que a imagem escura representa que o material está preenchido.

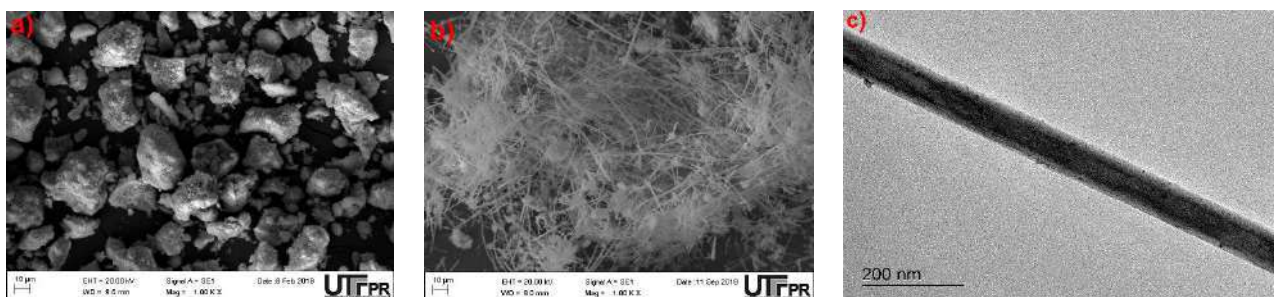


Figura 1 - a) Microscopia Eletrônica de Varredura (MEV) do material de Partida, **b)** Microscopia Eletrônica de Varredura (MEV) do material do produto e **c)** Microscopia eletrônica de transmissão (MET), da síntese de NTNb com Nb_2O_5 em NaOH 10 mol/L e a 120°C, lavado com HCl 0,1 mol/L

Agradecimentos/Acknowledgments

CNPq, CAPES, DAQBi-UTFPR, PPGQ-UTFPR.

Área: OrgInscrição: 00168

One-pot green synthesis of isoxazol-5(4*H*)-one derivatives using Organocatalyst of Ionic Liquids in water

Luciana M. Ramos (PQ)¹, Gabriela H. C. Oliveira (PG)¹, Raíssa Kelly C. Paiva (PG)¹, Brenno A. D. Neto (PQ)²

luciana.ramos@ueg.br; gabriela.hc@hotmail.com

¹ Laboratório de Química Medicinal e Síntese Orgânica (LaQuiMeSO), Universidade Estadual de Goiás- Câmpus de Ciências Exatas e Tecnológicas, UEG; ² Laboratório de Química Medicinal e Tecnológica LaQuiMeT, Instituto de Química, Universidade de Brasília

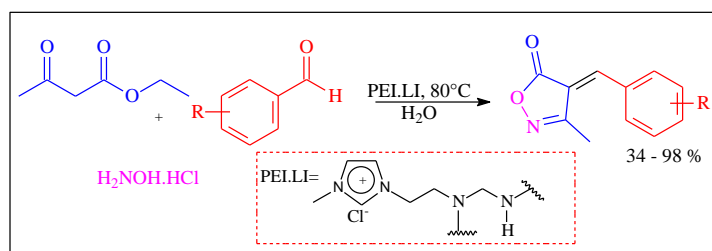
Palavras Chave: *isoxazol-5 (4H)-one*, *ionic liquids*, *organocatalyst*.

Highlights

Use of an Ionically Tagged synthetic enzyme (PEI.LI) applied as an organocatalyst in the synthesis of 3,4-disubstituted isoxazol-5 (4*H*)-one derivatives and antimicrobial evaluation.

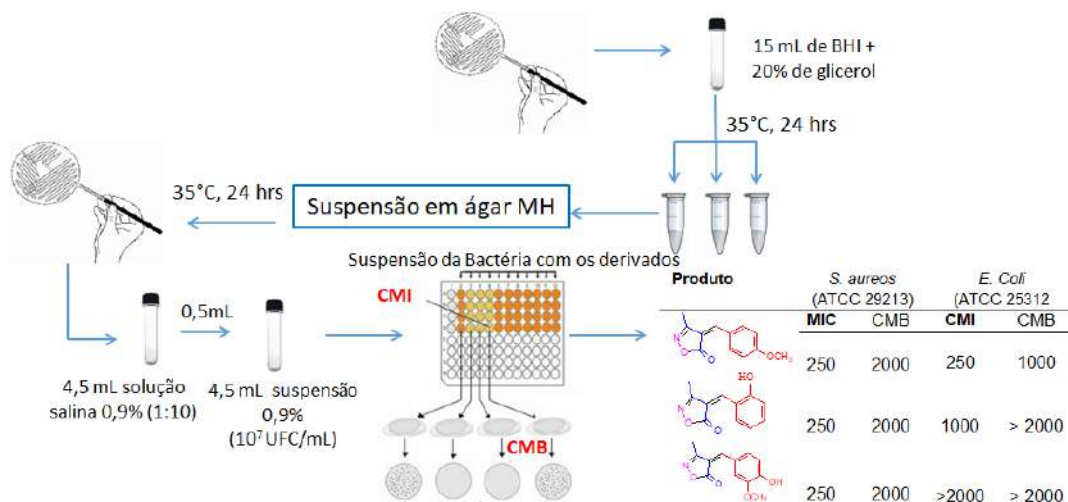
Resumo/Abstract

A síntese dos derivados isoxazólicos via RMC (reações multicomponentes) é uma metodologia atraente. O presente trabalho descreve a síntese de derivados isoxazol-5(4*H*)-ona 3,4-dissubstituídos empregando uma enzima sintética ionicamente (PEI.LI) marcada como organocatalisador da RMC entre β-cetoéster com didroxilamina hidrocloreídica e vários aldeídos aromáticos para formação de derivados isoxazol-5(4*H*)-ona 3,4-dissubstituídas (Esquema 1).



Esquema 1. Metodologia para síntese de derivados isoxazol-5(4*H*)-ona 3,4-dissubstituídas.

O ensaio biológico para a determinação da CMI e do CMB permitiu verificar que dentre os derivados sintetizados, alguns apresentaram atividade bacteriostática pois inibiram o crescimento das bactérias, e um dos compostos apresentou atividade bactericida (Esquema 2).



Esquema 2. Esquema do CMI e CMB dos derivados.

Área: Q. O.

(Inserir a sigla da seção científica para qual o resumo será submetido. Ex: ORG, BEA, CAT)

Inscrição: 00639

(Inserir o número de inscrição do autor que fez a submissão)

Enantioselective Synthesis of α -Aryl Tetralones (1-Carba-isoflavanones)

Francisco V. Gaspar (PG),¹ Luana G. Souza (PG),¹ Jorge L. O. Domingos (PQ),² Paulo R. R. Costa (PQ)^{1*}

¹Instituto de Pesquisas de Produtos Naturais, UFRJ; ²Departamento de Química, UERJ

*prrcosta2011@gmail.com

Palavras Chave: ATH-DKR, Ruthenium, Palladium, α -aryltetralones

Highlights

α -Arylation of α -tetralones. Reduction of α -aryltetralones under ATH-DKR conditions.

Abstract

Ma and cols¹ studied the inhibition of the enzyme aromatase by racemic synthetic isoflavanones and compounds **1** and **2** were selected as the most active (Figure 1). These compounds presented antiproliferative effect in mama cancer cells lines (MCF7).

α -Aryl- α -tetralones (1-carba-isoflavanones) can be considered as isosters of the natural isoflavanones in which the oxygen atom at the B-ring is replaced by a methylene group. Several α -aryltetralones were synthesized in our laboratory and interesting bioactive compounds were found among these compounds.²

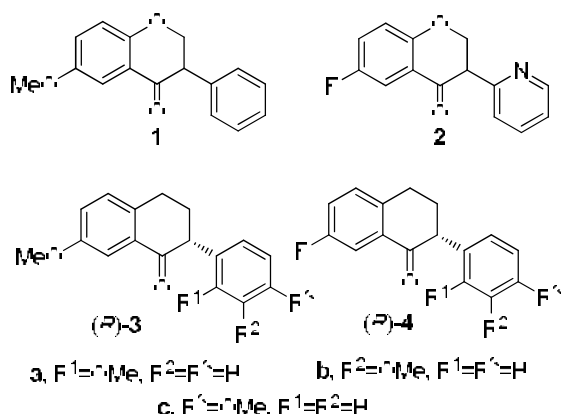


Figure 1. Isoflavanones (1,2) and carba-analogues (3,4).

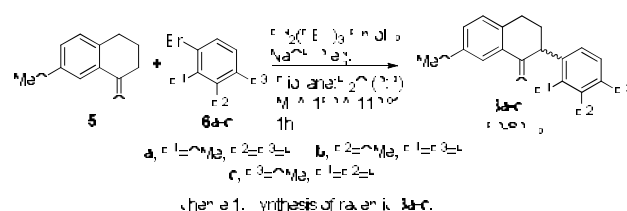
As part of an ongoing project aimed the discovery of new antiproliferative agents we designed the synthesis of products type **3** and **4** carba-analogues of **1**.

In this communication we report our results on the enantioselective synthesis of **4a-c** (Figure 1).

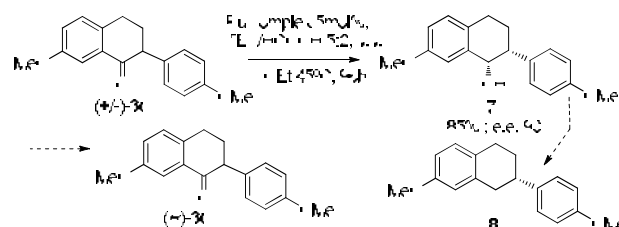
We expected that the presence of methoxy groups at the C-ring could increase the affinity for the

aromatase (interaction with the iron at the Heme part of the protein) leading to an increase in the antiproliferative effect.

In Scheme 1 is shown the synthesis of racemic **3a-c** by α -arylation of **5** with bromoarenes **6a-c** under MW heating, conditions previously described by our laboratory.³



Next we investigate the reduction of racemic ketone **3c** using chiral Ru catalyst under asymmetric hydrogen transfer conditions. This reaction was slower than the reduction of isoflavanones but after 96h alcohol **7** was obtained in 85% chemical yield and 90 e.e. The oxidation of **7** to (*R*)-**3c** and its reduction to **8** are under optimization.



Scheme 2. Preliminary results on the enantioselective synthesis of (+)-**3c** and (-)-**8**.

References: 1- Bonfield, K.; et al., *Bioorg. Med. Chem.*, **2012**, *20*, 2603-13; 2- Manvar, D.; et al., *Eur. J. Med. Chem.* **2015**, *93*, 51-4; 3- Fernandes, T. A.; et al., *Eur. J. Org. Chem.* **2014**, 1314-20.

Acknowledgment

FAPERJ, CAPES, CNPq, UFRJ, UERJ

Área: ANA

Nº de Inscrição: 170

A comparison study of coprecipitation and solid-phase extraction for trace elements determination in seawater samples by ICP-MS

Bruna Miurim Dalfior (PG),¹ Vitor Nunes da Conceição (PG),¹ Matheus Barbosa Rasch (IC),¹ Geisamanda Pedrini Brandão Athayde (PQ),¹ Maria Tereza Weitzel Dias Carneiro (PQ),^{1*}

ipodtheu@hotmail.com; mariacarneiro@hotmail.com

¹Departamento de Química, Universidade Federal do Espírito Santo

Palavras Chave: Seawater, ICP-MS, Trace Elements, Sample Preparation

Highlights

Trace elements determination in seawater by ICP-MS. Evaluation of extraction and preconcentration methodologies. Coprecipitation and solid-phase extraction procedures.

Resumo/Abstract

A determinação de elementos traço em água salina não é uma tarefa simples, devido às baixas concentrações presentes. Dessa forma, o uso de técnicas analíticas sensíveis como a espectrometria de massas com plasma indutivamente acoplado (ICP-MS) é necessário¹. No entanto, um desafio encontrado na determinação de elementos traço em água do mar por ICP-MS está relacionado à sua matriz, a qual é fonte de diferentes interferências². Para minimizar essas interferências, metodologias de extração dos analitos, como a extração em fase sólida com resinas quelantes ou a coprecipitação são necessárias. O objetivo desse trabalho é comparar a coprecipitação dos analitos, a partir da precipitação de Mg(OH)₂ e a extração em fase sólida usando a quelante Chelex-100. Esse estudo foi realizado para posterior determinação de As, Cd, Cr, Cu, Pb, Ni, Mn e Zn por ICP-MS. A extração em fase sólida foi realizada pela adição de 200 mL de água do mar em pH 4 em uma coluna de vidro acondicionada com 4,0 g da resina Chelex-100. Um volume de 40 mL de HNO₃ 10% v/v foi utilizado como eluente e o volume final da solução ajustado para 50 mL. A coprecipitação foi realizada pela adição de 1200 µL de amônia aquosa concentrada, a um volume de 25 mL de água do mar. A solução foi deixada em repouso por 3 minutos e logo após submetida à centrifugação por 30 min a 3000 rpm. O sobrenadante foi descartado, o precipitado foi dissolvido em 400 µL de HNO₃ conc. e o volume final de 10 mL foi ajustado com água ultrapura. As amostras foram analisadas em ICP-MS e os resultados de recuperação dos elementos traço adicionados estão descritos na Tabela 1.

Tabela 1. Porcentagem de recuperação dos elementos traço após pré-concentração utilizando resina Chelex-100 e coprecipitação

| Elementos traço | As | Cd | Cr | Cu | Pb | Ni | Mn | Zn |
|-------------------|------|-------|-------|------|------|------|-------|------|
| % Rec. Chelex-100 | 4,3 | 104,7 | 8,8 | 84,2 | 93,9 | 97,8 | 100,2 | 82,9 |
| Coprecipitação | 97,6 | 13,5 | 112,4 | 99,0 | 98,4 | 9,7 | 106,8 | 21,1 |

Ambas as metodologias são eficazes na pré-concentração de Pb e Mn. Já para Cd, Ni e Zn a coprecipitação não se mostrou satisfatória, devido à formação de complexos com amônia. No entanto, a determinação de As e Cr utilizando a resina Chelex-100 apresentou baixas recuperações, sugerindo que as espécies desses dois elementos não interagem de forma satisfatória com a resina. A partir dos resultados conclui-se que a resina Chelex-100 pode ser utilizada de forma eficiente para a determinação de Cd, Cu, Pb, Ni, Mn e Zn e a coprecipitação se mostrou eficiente para a determinação de As, Cr, Cu, Pb e Mn em amostras de água do mar por ICP-MS.

¹SANTELLI, R. E.; FREIRE, A. S.; OLIVEIRA, E. P.; LEMOS, V. A.; NOVAES, C. G.; BEZERRA, M. A. *ISRN Analytical Chemistry*, v. 2012, p.1-8, 2012.

²WANG, B.; LEE, C.; HO, T. *Talanta*, 128, p. 337-344, 2014.

Agradecimentos/Acknowledgments

CAPES, FAPES, PPGQUI-UFES, LabPetro/UFES, LEA (Laboratório de Espectrometria Atômica).

Área: ANAInscrição: 00172

Simultaneous determination of endocrine disruptors triclosan and methylparaben in personal care products by UV-vis spectroscopy

Edson R. Santana*¹ (PG), Almir Spinelli (PQ)¹***edsonr.santana0@gmail.com**¹Departamento de Química, Universidade Federal de Santa Catarina – Florianópolis, SC – BrasilPalavras Chave: *Triclosan, Methylparaben, UV-vis spectroscopy, Personal care products.*

Highlights

Triclosan and methylparaben are potential endocrine disruptors. Simultaneous triclosan and methylparaben sensing by UV-vis spectroscopy using a nonlinear deconvolution process is presented.

Abstract

Triclosan (TCS) and methylparaben (MePa) are widely used as preservative and antimicrobial agents in cosmetics, pharmaceuticals and personal care products. MePa, a member of the class of compounds known as parabens, is one of the most widely used additives due its low cost, broad spectrum of antimicrobial activity, and good chemical and thermal stability [1,2]. TCS is mainly used in antiseptic products such as hand soaps, deodorants and creams for over 40 years [3]. However, TCS and MePa can act as endocrine disruptors. MePa and other parabens present a weak estrogenic activity but can lead to a potential increase in breast cancer incidence, as TCS can lead to disruption of thyroid hormones homeostasis [1]. In Brazil, the ANVISA (RDC 29/2012) limits a maximum concentration of 0.4% (w/w) of a single paraben in the final product and 0.8% (w/w) a mixture of parabens. In the same resolution, the agency fixes a maximum concentration of 0.3% (w/w) of triclosan in the final product [4]. Thus, this work describes the development of a simple, cost-effective, rapid and sensitive analytical method for simultaneous and individual TCS and MePa sensing in personal care products by UV-vis spectroscopy. The measures were performed on a Shimadzu UV-1800 spectrophotometer (Shimadzu, Japan), using a quartz cell with an optical path of 1.0 cm. To obtain the calibration curves, standard solutions of TCS and MePa were prepared in ethanol and the maximum absorbance values were monitored at 282 and 257 nm, respectively. Four samples of personal care products were obtained from commercial stores in Florianópolis, SC: toothpaste, antiseptic soap, antiseptic deodorant and shampoo. A fifth sample was prepared by combining the antiseptic soap and shampoo simulating a bath kit. For the analyzes, 0.5 g of the samples were weighed and ultrasonicated in 10.0 mL of ethanol for 40 min. After that, they were filtered and diluted in ethanol in a 25.0 mL volumetric flask for further detection. For the individual analyses of TCS and MePa, the linear ranges were found to be 1.0 to 14.0 $\mu\text{mol L}^{-1}$ with detection limit of 0.32 and 0.37 $\mu\text{mol L}^{-1}$ for TCS and MePa, respectively. In the simultaneous analysis, the overlap of the absorptions bands of MePa and TCS required the use of a mathematical processing of nonlinear deconvolution. The commercial software Origin Pro 8.5 (from Originlab) was used and the spectroscopic data were introduced together with a wavelength value for each individual process. With the data processed, the calibration curves for the TCS and MePa were found to be 1.0 to 14.0 $\mu\text{mol L}^{-1}$ with detection limit of 0.42 and 0.38 $\mu\text{mol L}^{-1}$, respectively. It is observed that the detection limits obtained for the simultaneous analysis of TCS and MePa through the non-linear deconvolution procedure are very similar to the detection limits reached for the individual analysis of each species. Finally, it was possible to successfully detect the content of TCS and MePa in samples of personal care products. Two samples (antiseptic deodorant and bath kit) contained TCS and MePa and it was necessary to use the nonlinear deconvolution. The other samples contained only one endocrine disruptor: antiseptic soap and toothpaste, TCS only, and shampoo, MePa only. All concentrations determined were in accordance with the ANVISA guidelines. Recoveries in the range of 85.0 to 110.0% were obtained.

Acknowledgments:

CNPq, FAPESC, Capes and UFSC.

References:

- [1] H. Wang, D.J. Cocovi-Solberg, B. Hu, M. Miró, *Anal. Chem.* 89 (2017) 12541–12549.
- [2] J.V. Piovesan, E.R. Santana, A. Spinelli, *J. Electroanal. Chem.* 813 (2018) 163–170.
- [3] M.L. Yola, N. Atar, T. Eren, H. Karimi-Maleh, S. Wang, *RSC Adv.* 5 (2015) 65953–65962.
- [4] Brasil, Agência Nacional de Vigilância Sanitária. RDC nº 29 de 01 de junho de 2012.

Área: INO

Nº de Inscrição: 00175

Synthesis of cyclic carbonates catalyzed by benzothiazole metal complexes

Álvaro F. A. da Mata (PG),¹ Rafael P. das Chagas (PQ),^{*1} Werberston de A. Bezerra (IC),¹ Pamella A. Dos Santos (PG),² Ângelo de Fátima (PQ).²

alvaro_jau@hotmail.com; rpchagas@ufg.br

Instituto de Química – Universidade Federal de Goiás/GO

Keywords: Metal complexes, Benzothiazoles, Homogeneous catalysis, Carbon dioxide, Cyclic carbonate.

Highlights

- Facile synthesis of complexes from various metal salts with benzothiazoles ligands.
- Use of benzothiazole complexes as catalysts for the chemical fixation of CO₂.

Abstract

The use of CO₂ for the production of cyclic carbonates has been a sustainable and low cost alternative to fossil carbon sources [1, 2]. In this work, benzothiazoles metal complexes were used as catalysts for the coupling between epoxides and CO₂, selectively producing cyclic carbonates.

CO₂ is an abundant and renewable source of carbon present in nature. However, its use in the synthesis of fine chemicals is still restricted. O study aims to develop an efficient catalytic system using complexes with benzothiazole ligands, for the selective synthesis of cyclic carbonates from CO₂ and epoxides (Fig. 1).

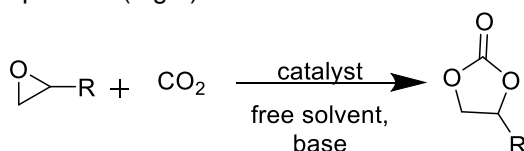


Figure 1. General cyclic carbonate synthesis.

The ligands 2-(2-hydroxyphenyl)-benzothiazole (**a**) and 2-(2-pyridyl)-benzothiazole (**b**) were used in reactions with various metal salts forming complexes of Zn (II) (**1**), Co (II) (**2**), Ni (II) (**3**), Mn (II) (**4**), Cu (II) (**5**) and Fe (III) (**6**) (Fig. 2).

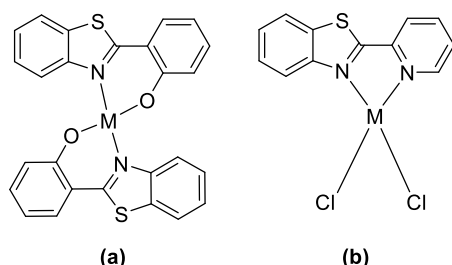


Figure 2. General structure of the complexes with benzothiazoles.

The complexes were characterized by elemental analysis, absorption spectroscopy in the infrared region and ¹H NMR. Catalytic tests were run in a Parr reactor system model 4848 with pressure and temperature control. The six complexes were employed as catalysts in the cycloaddition reaction of CO₂ and epoxides, using tetrabutylammonium

bromide as cocatalyst (Table 1). Conversions were determined based on ¹H NMR spectra. All catalysts were active for the selective conversion of CO₂ to cyclic carbonates. In a blank experiment without the presence of a catalyst the conversion was 5%.

Table 1. Catalytic tests using complexes 1-6.

| Cat. | Conv. (%) | Sel. (%) | TON | TOF |
|-----------|-----------|----------|-----|-----|
| - | 5 | 96 | - | - |
| 1a | 15 | 91 | 144 | 48 |
| 2a | 27 | 92 | 257 | 85 |
| 3a | 8 | 78 | 63 | 21 |
| 4a | 20 | 96 | 196 | 65 |
| 5a | 20 | 45 | 93 | 31 |
| 6a | 14 | 83 | 124 | 41 |
| 1b | 47 | 94 | 450 | 150 |
| 2b | 16 | 84 | 135 | 45 |

Reaction conditions: catalyst (0.1 mol%), cocatalyst (TBAB, 0.1 mol%); substrate: PO (25 mmol), P [CO₂] = 30 bar, T = 100 ° C, time = 3 h. Conversions determined based on ¹H NMR analysis. Turnover number: mol of carbonate produced/mol catalyst. Frequency of turnover (TON.h⁻¹).

In standard conditions, complex **1b** showed a conversion value of 47% and 94% of selectivity for the cyclic carbonate, and also the highest TON and TOF among all the complexes. In view of the conversion and selectivity, complex **1b** will be used in the optimization of the system conditions and subsequently employed in reaction with various epoxides. Further, reuse studies of the system will be performed. All the complexes were active for chemical fixation of CO₂. There is no reported in the literature a catalytic system that uses complexes with benzothiazoles ligands for the synthesis of cyclic carbonate from CO₂ and epoxides.

Acknowledgments

FAPEG, PPGQ/IQ/UFG, CAPES

[1]. MAEDA, C.; MIYAZAKI, Y.; EMA, T. *Catalysis Science & Technology*, v. 4, n. 6, p. 1482-1497, 2014.

[2] MILANI, J. L. S. *et al. Journal of CO₂ Utilization*, 3, 100-106, 2019.

Área: ORG

Nº de Inscrição: 00176

Synthesis of β -nitro alcohol using hydrolases free or immobilized on MWCNTs

Maria Clara S. Durigon (IC)^{1*}, Nádia Krieger² (PQ), Gustavo H. Couto¹ (PQ), Cristiane Pilissão¹ (PQ)

mariadurigon@alunos.utfpr.edu.br

¹ Departamento de Química e Biologia (DAQBi) - UTFPR; ² Departamento de Química - UFPR.

Palavras Chave: *Enzymatic Promiscuity, Nitroaldol, Hydrolases*

Highlights

This study used hydrolases free or immobilized on MWCNTs as catalyst in the Henry reaction using p-nitroaldehyde and nitromethane, which provides a simple and efficient method for obtained β -nitro alcohols chiral with good yield.

Abstract

Enzymes are attractive catalysts because of their promiscuity - ability to work in reaction conditions different from those in nature. Besides, biocatalytic synthesis has many advantages over chemical catalysis: high regio, chemo and stereoselectivity.^{1,2} This study to evaluate the catalytic activity of different hydrolases free or immobilized on carbon nanotube-MWCNTs in the Henry reaction. The lipases from Lipozyme 435 and Pancreatic pig (PPL), the protease from Papain and the lipase metagenomic native LIPC12 were used as catalyst in the Henry reaction using p-nitrobenzaldehyde (1 mmol) and nitromethane (2 mmol) in DMSO (5 mL) and water (0.5 mL). The mixture was stirred by 48h at 45°C. The product obtained was characterized and quantified by ¹H NMR (**Fig. 1**). To evaluate the stereoselectivity, we initially performed the acylation of the product obtained in the Henry reaction using acetic anhydride (5 mmol) in 15 mL of dichloromethane, using as catalyst H₂SO₄ (1%). The product obtained will be quantified by chiral gas chromatography (**Fig 2**).

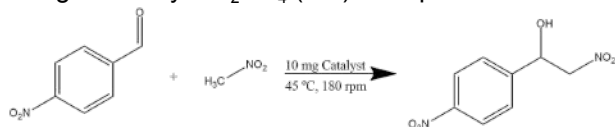


Figure 1 – Henry reaction catalyzed by hydrolases.

Initially were evaluated different hydrolases free or immobilized on MWCNTs in the Henry reaction, the results are shown in Fig. 3.

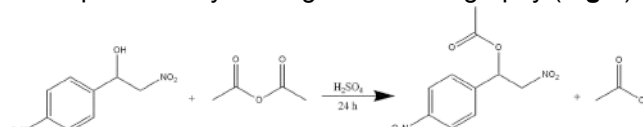
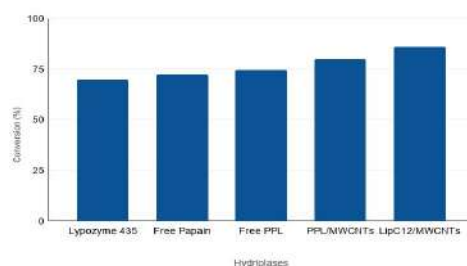


Figure 2 – Acylation of β -nitroaldol



The system presented excellent results using the hydrolases free or immobilized, being that the conversions were of 69-85%. When used the LIPC12/MWCNTs a lipase native the conversion was of 85%. The enantioselectivity of the reaction is going to be analysed by GC with chiral columns, using the acylated product. These preliminary results showed that hydrolases have great potential to be exploited in different reaction within the organic synthesis.

Figure 3. Catalytic efficiency of the hydrolases in Henry's reaction

Agradecimentos/Acknowledgments

CNPq, CAPES, DAQBi-UTFPR, PPGQ-UTFPR, UFPR.

References

- López-Iglesias, M.; Gotor-Fernández, V. *Chem. Rec.* **2015**, 15, 743–759.
- Acharya, C.; Achari, A.; Jaisankar, P. *Tetrahedron Lett.* **2018**, 59, 663–666.

Fitoquímica em resíduos madeireiros de *Acacia mangium* Willd de plantio comercial

Loretta Ennes Saboia de Melo (PG),¹ Claudete Catanhede do Nascimento (PQ),¹ Antonio Gilberto Ferreira (PQ),² Maria da Paz Lima (PQ),¹

lorettaennes@hotmail.com; mdapaz@inpa.gov.br

¹Coordenação de Tecnologia e Inocação, INPA; ²Departamento de Química, UFSCar

Palavras Chave: *Fabaceae*, esteroides, compostos fenólicos

Highlights

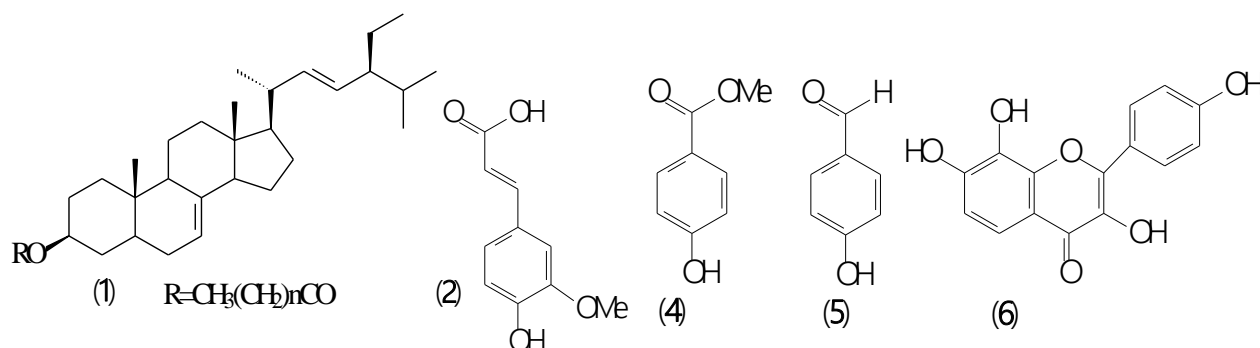
Phytochemistry in woody residues of *Acacia mangium* Willd from commercial planting

Resíduos of trunk from *A. mangium* give steroid spinasterol esterified, β -sitosterol and estigmasterol, the phenolics ferulic acid, methylparaben and 4-hydroxybenzaldehyde, flavonoid 3,4',7,8-tetrahydroxyflavone.

Resumo/Abstract

Acacia mangium Willd. Fabaceae originária da Austrália e Malásia é adaptada às condições de solo e clima brasileiro cujos plantios comerciais são destinados à extração de taninos a partir de casca, a madeira é utilizada pela indústria de celulose, na geração de energia e produção de painéis. A espécie tem potencial para programas de reflorestamento e recuperação de áreas com solos pobres ou degradados. Os registros sobre compostos isolados são restritos à dois triterpenos em folhas e três flavonóides do cerne. Neste trabalho avaliou-se os constituintes químicos nos resíduos madeireiros oriundos da produção de pequenos objetos. O fracionamento do extrato hexânico (1.15 g) em *CC forneceu a substância **1** (25 mg). O extrato metanólico (13 g) fracionado em *CC gerou 24 frações: 7-11 (ACM-7; 468 mg) e 14-16 (ACM-14; 2,79 g) foram refracionadas. ACM-7 em *CC, CLMP (sistema SEPACORE) e celulose forneceu as substâncias **2** (3 mg), a mistura de β -sitosterol e estigmasterol **3a,b** (20 mg), **4** (1,0 mg) e **5** (3,0 mg). ACM-14 (3,7 g) fracionadas em coluna de Amberlite XAD-2, *CC e Sephadex LH-20, resultou na purificação de **6** (3,0 mg). Os espectros de RMN ¹H e ¹³C de **1** mostraram sinais típicos do espinasterol esterificado. Com base nos dados espectrais de RMN (1 e 2D) identificou-se **2**, **4** e **5** como ácido ferúlico, metil-parabeno and 4-hidroxibenzaldeído, respectively; além da substância **6** como 3,4',7,8-tetraidroxiflavona. As substâncias identificadas no tronco de *A. mangium* estão sendo reportadas pela primeira vez no gênero *Acacia*.

*CC- cromatografia em coluna (silica gel, 230-400 mesh)



Conclusões - A obtenção dos resíduos madeireiros de acácia oriunda de plantio foi uma oportunidade para o conhecimento dos seus metabólitos secundários além de agregar valor aos descartes do setor madeireiro.

Agradecimentos - Os autores agradecem a bolsa concedida pelo Capes a doutoranda Loretta Ennes Saboia de Melo; ao suporte financeiro da FAPEAM.

SÍNTESE E CARACTERIZAÇÃO DE RESINA POLIMÉRICA À BASE DE TIOUREIA, FORMALDEÍDO E MELAMINA PARA APLICAÇÃO AMBIENTAL

Emerson dos Santos Freire (PG)¹, Daniela Santos Anunciação (PQ)¹

freireemerson02@gmail.com

¹Laboratório de Instrumentação e Desenvolvimento em Química Analítica (LINQA), Instituto de Química e Biotecnologia – Universidade Federal de Alagoas (UFAL)

Palavras-chave: Resina, Melamina, Tioureia, Formaldeído, Caracterização

Highlights

Synthesis and characterization of thiourea, formaldehyde and melamine based polymeric resin for environmental application.

The MTUF resin was successfully synthesized and characterized.

The resin was able to adsorb 90% of the Hg²⁺ ions present in aqueous medium.

Resumo

A contaminação de corpos d'água por elementos traço tem impulsionado uma série de estudos envolvendo a remoção destes elementos devido à potencial toxicidade e efeito cancerígeno dos mesmos, a exemplo de Sb, As e Hg. Uma excelente alternativa é o uso de resinas quelantes promissoras devido à função multi-adsorvente destes materiais. O objetivo do presente trabalho foi sintetizar e caracterizar uma resina à base de Melamina-Tioureia-Formaldeído (MTUF), para posterior aplicação ambiental em amostras de água contendo íons Hg²⁺, As³⁺ e Sb³⁺. A síntese ocorreu mediante reação de polimerização com liberação de água obedecendo a uma razão molar de 1:5:1 (melamina, formaldeído e tioureia, respectivamente), tempo de reação de 2 horas, a 400 rpm de agitação e 80°C. A caracterização da resina foi realizada por difração de raio-X (DRX), análise de adsorção-desorção de nitrogênio pelo método de BET e análise termogravimétrica (TGA). A capacidade de retenção dos analitos foi verificada mediante preparo de 100 mL de soluções-padrão de 50 µg L⁻¹ de Hg, As e Sb que foram submetidas ao contato com 200mg de resina durante 2h, sob agitação de 300 rpm. Através da caracterização por TGA, observou-se que a resina tem estabilidade térmica em torno de 75°C e seu processo de combustão é composto por três estágios (Fig. 1). Através da análise de DRX foi possível verificar que a resina MTUF se assemelha a um material semi-cristalino devido ao alargamento do sinal (Fig 2). A aplicação do método de BET gerou informações acerca do volume do poro da resina, diâmetro e área superficial da mesma, com medidas de 0,027 cm³ g⁻¹, 33 Å e 47,694 m² g⁻¹, respectivamente (Fig 3). Com relação à interação com soluções dos íons Hg²⁺, As³⁺ e Sb³⁺ com a resina, observou-se que a MTUF interage melhor com o Hg²⁺ em relação aos demais íons uma vez que adsorveu quase 90% do Hg²⁺ presente em solução, enquanto que para Sb³⁺ a resina só foi capaz de adsorver cerca de 1%, e no caso do As³⁺ não se verificou interação, de forma que a concentração deste analito na solução não foi alterada. A caracterização da resina foi realizada a contento e os resultados apresentados para solução-padrão se mostraram bastante promissoras para aplicações em amostras reais de ambientes aquáticos contaminados com Hg²⁺.

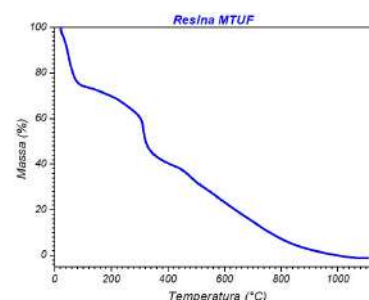


Fig. 1: Curva termogravimétrica da resina MTUF.

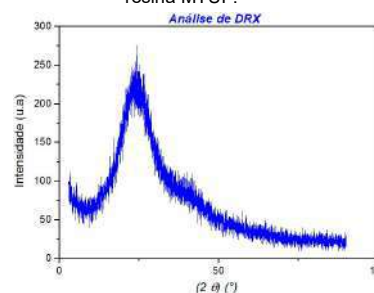


Fig. 2: Difratograma de raio-X

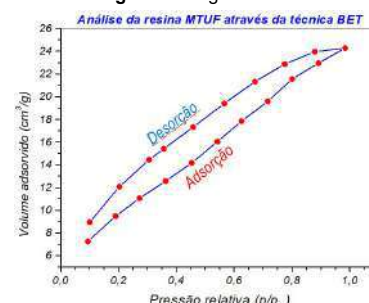


Fig. 3: Curva de adsorção-desorção de nitrogênio

Agradecimentos



Isotermas de Adsorção do íon Zinco(II) pela Turfa Decomposta Fina (TDF)

Bruna Szpoganicz (PG),¹Lino Meurer (IC)¹, Bruno Szpoganicz (PQ)¹.

belabruna@yahoo.com; belabruna@yahoo.com.br

¹Departamento de Química, UFSC.

Palavras Chave: Turfa, Adsorção, Isotermas, Langmuir, Zinco(II).

Highlights

The isotherm that best describes the adsorption of zinc(II) ion by peat TDF is the Langmuir isotherm ($R^2 = 0.998$). It is a monolayer adsorption model, showing that the adsorption of zinc (II) is a chelation of the metal ion on the surface of the peat.

Resumo/Abstract

A concentração C_t do íon Zn(II) depois da adsorção pela turfa TDF, após um tempo t , foi determinada por colorimetria usando murexida como indicador. Soluções diluídas de Zn(II) produzem um complexo amarelo que exibe uma absorção máxima em 450 nm.

Para determinar as isotermas de adsorção, foi necessário encontrar as concentrações de equilíbrio (q_e) do íon zinco(II) adsorvido na turfa TDF. (Figura 1).

A isoterma que melhor descreve o experimento é a de Langmuir (Figura 1) (LANGMUIR, 1917, 1918) ($R^2 = 0,998$) (Tabela 1). Ela é um modelo de monocamada de adsorção, onde a adsorção ocorre na superfície da turfa. Supõe-se então que uma vez que o íon metálico ocupe um local, não ocorre mais adsorção neste local.

A equação da isoterma de Langmuir tem a seguinte forma :

$$q_e = (q_m \cdot K_L \cdot C_e) / (1 + K_L \cdot C_e) \quad (1)$$

E a Equação 2 é a forma linear desta equação:

$$(C_e/q_e) = (1/K_L \cdot q_m) + (1/q_m) \cdot C_e \quad (2)$$

Onde q_m é a quantidade máxima de íon Zinco(II) adsorvido por grama de turfa (mg/g) e K_L (ml/mg) é a constante de equilíbrio de adsorção de Langmuir. Esses valores são estimados a partir do intercepto da curva linear de C_e/q_e versus C_e , onde C_e é a concentração do íon metálico na solução de equilíbrio.

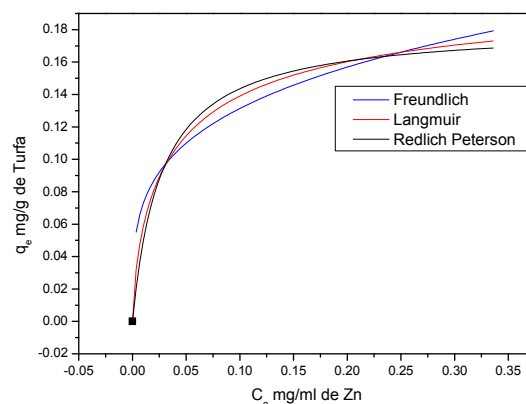


Figura 1. Isotermas de adsorção do íon zinco (II) na turfa TDF.

Tabela 1. Dados de concentração de saturação e constantes de equilíbrio das isotermas.

| Modelo | K_L | Q_m | R^2 |
|------------------|-------|-------|-------|
| Langmuir | 9.58 | 0.211 | 0.998 |
| Freundlich | 3.91 | 0.237 | 0.955 |
| Redlich Peterson | 6.76 | 0.182 | 0.992 |

Agradecimentos/Acknowledgments

Os autores agradecem ao CNPQ e a CAPES.

Área: TEC

(Inserir a sigla da seção científica para qual o resumo será submetido. Ex: ORG, BEA, CAT)

Nº de Inscrição: 00184

(Inserir o número de inscrição do autor que fez a submissão)

Knowledge Management in Chemical Data Science applied to anticancer drugs for the Brazilian National Health System**Jorge L. Magalhães (PQ)^{1,2,6}, Danielle C.P.R. Silva (PG)^{2*}, Jorge C.S. Costa (PQ)^{2,3}, Adelaide M. S. Antunes (PQ)^{4,5}.**jorge.magalhaes@far.fiocruz.br; daniellecristinareissilva@gmail.com¹Center for Technological Innovation – NIT Farmanguinhos/FIOCRUZ; ²Professional Postgraduate program in Management, Research and Development in Pharmaceutical Industry Farmanguinhos/FIOCRUZ; ³Vice Presidency of Production and Innovation in Health – VPPIS/FIOCRUZ; ⁴National Institute of Industrial Property – INPI; ⁵Chemical School/UFRJ. RJ, Brazil; ⁶University NOVA of Lisbon, IHMT – Global Health and Tropical Medicine (GHTM), Portugal.

Key words: Anticancer drugs, Big data in chemistry, Knowledge management, Information science, Public Health.

Highlights

Anticancer chemical substances hidden among 100 million patents.
 Challenges & opportunities in anticancer drugs for the Brazilian National Health System.
 Knowledge management in Chemical Data Science.

Resumo/Abstract

In 2017, according Transparency Market Research (2018), the Active Pharmaceutical Ingredients market reached more than US\$ 150 billion. In 2026 it is estimated that will exceed a value of US\$ 219 billion. Investments in anticancer drugs have already surpassed 100 billion since 2011. The pharmaceutical chemistry sector is one of the most competitive and profitable in the market. The health sector releases more than 1 million papers a year on scientific knowledge with advances 10% a.a. In knowledge technological has 100 million patents in European Patent Office (EPO). Thus, a case study using knowledge management in chemical Data Science applied to anticancer drugs will provide a contribution to reflection for National Health System (SUS – Brazilian term). According WHO (2013), 80% of the world's population does not have access to essential medicines. Its necessary new approach for Research and Development for innovation in health.

The combination in chemical studies in the last 20 years for "anticancer" drugs match 19401 patents. Identified and processed (SciFinder®, EPO database and Patent2Net) all patents with term in title and into abstract. Summary: areas whose production opportunities emerge are synthetic chemistry 52%, biotechnology 41%, blood products 3%, fermentation 2% and in vitro diagnosis 2%. Figure shows anticancer opportunities in technological trends in chemical (blue hexagon). So, knowledge management in anticancer drugs could become a great allied to aid decision-makers in the private and public sectors from R&D for innovation in chemicals.

Bibliography: 1) POSSAS, C. et al. Access to new technologies in multipatented vaccines: challenges for Brazil. *Nature Biotechnology*, v. 33, n. 6, p. 599–603, jun. 2015.

2) CKHOUSE, S.; LEWISON, G.; SULLIVAN, R.

Trends in the global funding and activity of cancer research. *Molecular Oncology*, v. 2, n. 1, p. 20–32, 1 jun. 2008.

3) CANADIAN INSTITUTES OF HEALTH RESEARCH. Knowledge Translation and Commercialiation. Disponível em: < <http://www.cihr-irsc.gc.ca/e/29418.html#1> >.



Área: INO

Nº de Inscrição: 00185

Study of gadolinium coordination compound with crylene acid ligand

Lucas do Prado Cardoso (IC),^{1*} Michele do Rocio Gonçalves Dias (PG),¹ Cristiane Pilissão (PQ),¹ Renata Danielle Adati (PQ).¹

lucascardoso@alunos.utfpr.edu.br

¹ Departamento Acadêmico de Química e Biologia, UTFPR

Keywords: Coordination compound, Gadolinium, Lanthanide, Luminescence, Octocrylene, Sparkle Model.

Highlights

A Gd-crylene acid complex was obtained, Gd³⁺ titration and CHN analysis confirmed stoichiometry, 77 K PLS and Sparkle with INDO/S provided experimental and theoretical triplet state, respectively.

Abstract

The carboxylic acids are known for various coordination modes and by stronger coordination binding between them and lanthanides ions, this make possible build polycentric structures, including polymers. Lanthanides exhibit several singular properties, e.g. Eu, Sm, Tb and Dy presents high luminescence when sensitized by coordination of chromophore ligand, due to antenna effect. We report here coordination of crylene acid (CLN; 2-cyano-3,3-diphenyl-2-propenoic acid) to gadolinium ion to study stoichiometry and triplet excited state of obtained compound. CLN was obtained from octocrylene (OCR; 2-ethylhexyl 2-cyano-3,3-diphenyl-2-propenoate), on our previous studies we verified at FT-IR spectra ~31 cm⁻¹ frequencies displacement from OCR to CLN carbonyl group. OCR mass spectrum exhibit m/z = 361 molecular peak and m/z = 205 base peak was denoted from OCR without alkyl and carboxyl groups, the same base peak to CLN spectrum, which means carboxyl group loss. At NMR (200 MHz) spectroscopy was observed any alkyl group protons from OCR to CLN spectrum. Currently gadolinium complex, GdCLN, synthesis and characterization made possible determining the ligand triplet state and chemical stoichiometry. GdCLN was obtained from 4.0 mmol CLN, in ethanol, and 1.0 mmol LnCl₃ (pH 4.5) slowly added to CLN solution. The Gd³⁺ titration, with standard EDTA solution, and elemental analysis (C, H and N) confirmed 4:13 (metal:ligand) chemical stoichiometry (Table 1). TGA provided 4.6% of water in sample, equivalent to 10.2 water molecules, but probably part of this percentage is due to sample humidity. GdCLN fluorescence analysis at 77 K provided 22704.95 cm⁻¹ to triplet state. Using Sparkle/AM1 model implemented in MOPAC 2016 package to calculate the ground state geometry (Figure 1) used to predict triplet state by INDO/S-CIS method implemented in ORCA package, the 25971.90 cm⁻¹ value for theoretical triplet state was determined for GdCLN. CLN coordinate to Gd³⁺ ion, but experimental triplet state value demonstrates no antenna effect, so systems with CLN and bipyridine, phenanthroline, avobenzene and dibenzalacetone, will be studied to evaluate energy transfer from ligands to lanthanide.

Table 1. Elemental analysis data of [Gd₄(CLN)₁₃(H₂O)₆]Na⁺ stoichiometry.

| | Gd ³⁺ (%) | C (%) | H (%) | N (%) |
|--------------|----------------------|-------|-------|-------|
| Theoretical | 15.77 | 62.65 | 3.59 | 4.57 |
| Experimental | 15.83 | 62.55 | 3.69 | 4.66 |

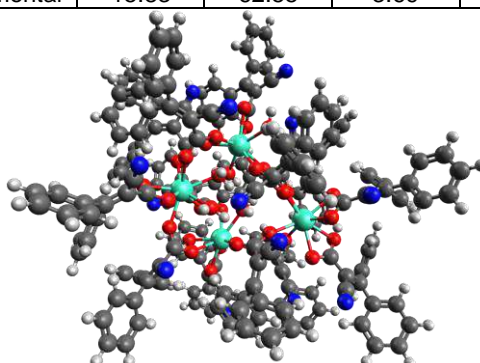


Figure 1. Optimized GdCLN structure by Sparkle/AM1 model.

Acknowledgments

CNPq, CAPES, Fundação Araucária, DAQBi-UTFPR, LAMAQ-UTFPR, PPGQ-UTFPR, NPGQ-UFS.

42ª Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química: Eixos Mobilizadores em Química

Área: AMB

Nº de Inscrição: 00187

Use of life cycle assessment (LCA) for the development of sustainable synthesis of metal organic frameworks- MOFs to capture CO₂

João M. B. Neto (IC),^{1*} Dejour P. Souza (PG),¹ Jussara L. Miranda (PQ).¹

joaomarioneto.brito@gmail.com

¹Instituto de Química, Universidade Federal do Rio de Janeiro

Palavras Chave: MOF, MIL-53(Al), MIL-101(Cr), Life Cycle Assessment, LCA, Sustainability.

Highlights

- Environmental assessment of the synthesis of two metal organic frameworks (MOFs) to capture CO₂
- Life Cycle Assessment (LCA), NBR ISO 14040
- MOFs synthesis

Abstract

Metal Organic frameworks¹ (MOFs) are a class of crystalline compounds with high surface area and porosity that are well known to be employed for adsorption of gases. MOFs are formed by the coordination of metallic agglomerates with bidentate or tridentate organic linkers, forming a very well-organized structure. The nature of the linker influences MOF's structural properties, such as stiffness and pore size. The most commonly used linkers are aromatic carboxylic acids, since they provide excellent stiffness and avoid the interpenetration of the binders. In addition, they are capable of forming structures with zinc, copper, chromium, aluminum, zirconium and other elements.

In this work, the environmental impact of the production of two MOFs for the capture of CO₂ was evaluated. The methodology of Life Cycle Assessment (LCA), NBR ISO 14040, was used to evaluate the environmental impacts of the processes developed for the synthesis of MOFs in laboratory scale. The functional unit of comparison was one kilogram of CO₂ adsorbed to both MOFs. The selected MOFs for this work were two of great already reported CO₂ adsorption capacity: MIL-101 (Cr) and MIL-53 (Al) (MIL refers to MOFs named as Matériaux de L'Institut de Lavoisier¹). These MOFs were synthesized in this work employed the hydrothermal method according to previously work of the group¹. CO₂ adsorption analysis were evaluated using a HIDEN IMI volumetric sorption unit in the 1 to 20 bar pressure range and at room temperature.

To carry out the environmental assessment, the routes of synthesis of the MOFs were modeled in the software Umberto®. The data from the production of the reagents were obtained from the Ecoinvent¹ v3 database, whereas the mass balance data of the synthesis (production) were obtained by the experiments in the laboratory. The ReCiPe² midpoint method was used to evaluate environmental impacts. The results show that, in general, for the categories of impacts assessed, MIL - 53 (Al) presented a lower environmental impact for CO₂ adsorption due to the lower energy consumption during its synthesis and the amount of waste disposed. MIL-101 (Cr) has a high energy consumption and demands reagents more harmful to the environment. In addition, it can be observed that the LCA methodology is a good tool for the development of more environmentally sustainable products.

1. Falabella, E.; Arroyo, P. A.; Barros, M. A.; **Miranda, J. L.** The future of zeolites and MOF materials In: Zeolites and Metal-Organic Frameworks From Lab to Industry.1 ed. AMSTERDAN: AMSTERDAN UNIVERSITY PRESS, 2018, v.1, p. 320-360.
2. Ecoinvent report version 3.5, Swiss Centre for LCI, ART, Duebendorf and Zurich, CH, 2017.
3. Goedkoop M.J., Heijungs R., Huijbregts M., De Schryver A.; Struijs J., Van Zelm R. ReCiPe 2008, A life cycle impact assessment method which comprises harmonised category indicators at the midpoint and the endpoint level; First edition Report I: Characterisation. 6 January 2009 (updated May 2013).

Acknowledgments

Laboratory of Advanced Manufacturing Management -COPPE- UFRJ

Study of the volatile organic compounds produced by *Epicoccum nigrum* antagonistic to *Magnaporthe oryzae*

Carla T. P. Coelho (IC)¹, Luiza V. Cruz (IC)¹, Bryna T. A. F. Gama¹, Jerônimo R. Oliveira Neto (TC)², Luiz C. Cunha (PQ)², Leila G. Araújo (PQ)³, Ana P. Terezan (PQ)¹, Vanessa G. P. Severino (PQ)^{1*}

carlathaispc19@gmail.com; vanessa.pasqualotto@gmail.com

¹Chemistry Institute, UFG; ²Toxic-Farmacologic Center of Studies and Researches, Pharmacy College, UFG; ³Department of Genetics, Biological Science Institute, UFG.

Keyword: Rice, brusone, *Epicoccum nigrum*, volatile organic compounds.

Highlights

Epicoccum nigrum produces Volatile Organic Compounds (VOCs); VOCs inhibiting *Magnaporthe oryzae*; Capture of VOCs by solid phase microextraction-headspace; ketones, benzenes, alkanes and amines.

Resumo/Abstract

The rice is an important source of nutrients for the world population, however, it is frequently attacked by pests. *Pyricularia oryzae* (sexual morph *Magnaporthe oryzae*) is responsible for the major disease of rice called brusone. Nowadays, the synthetic chemical pesticides are widely used; but they are potentially toxic. An alternative for the improvement of sustainable agricultural planting is the use of natural products produced by microorganisms, based on the growth antagonism relation of the pathogen and inducing plant resistance.¹ Thus, in this study the chemical profile of Volatile Organic Compounds (VOCs) produced by *Epicoccum nigrum* fungus was analyzed, which inhibit the growth of *M. oryzae*.

For the development of the study, mycelium discs of the pathogen and *E. nigrum* were inserted in the same polystyrene plate containing the culture medium composed of potato, dextrose and agar. The VOCs were captured seven days after the fungus growth, by headspace solid-phase microextraction (HS-SPME), for 20 minutes using the divinylbenzene/carboxen/polydimethylsiloxane (DVB/CAR/PDMS) fiber. The VOCs analysis was performed by gas chromatography coupled to mass spectrometry (GC-MS), with DB-5MS column in a non-linear temperature program for 15 minutes. The identification of the compounds was given by the retention index, mass spectra and comparison with the literature^{2,3}.

From the pairing of the fungi were identified VOCs belonging to different classes, like ketones, carboxylic acids, alkanes and amines (figure 1),

which, according to the literature, showed evidence of antifungal activity against *M. oryzae*⁴.

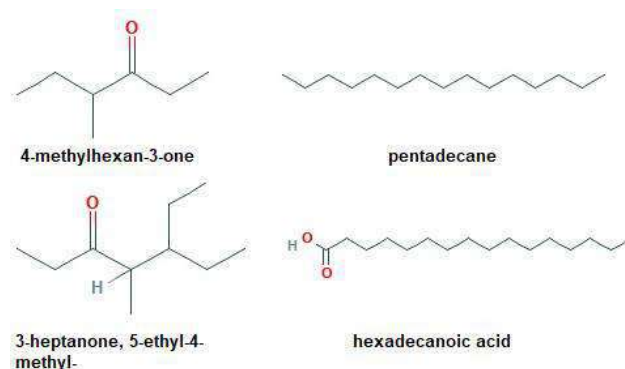


Figure 1: VOCs produced in the antagonism between *E. nigrum* and *M. oryzae*.

In conclusion, the VOCs produced in situations of antagonism between *E. nigrum* and *M. oryzae* were identified for the first time. This study is important for the comprehension of the action mechanism. In addition, the chemical structures obtained contribute as models to their synthesis on large scale and other similar molecules, which can be tested for their antifungal potential.

¹RAY, M.; et al. **Biosensors and Bioelectronics**, 87, 708-723, 2017.

²NIST, National Version of the NIST/EPA/NIH Mass Spectral Data Base. Gaithersburg, 1998.

³KIM, S. et al. PubChem Substance and Compound databases. **Nucleic Acids Res.** 2016.

⁴CHAVES-LÓPEZ C. et al. **J Appl Microbiol.** 119 (2): 487-99; 2015.

Agradecimentos/Acknowledgments

The authors gratefully thank to the Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de Goiás (FAPEG), Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq) e à Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior (CAPES) for the financial support for this research.

Área: AMB

Nº de Inscrição: 00190

Black Carbon (BC) Associated to Fine Particulate Matter (PM_{2.5}) in Ambient Air of a Brazilian Medium-Sized City.

Maria Cristina Solci (PQ)*, Débora R. Fernandes (PG), Janaina M. S. Costa (PG), Carlos R. Silva Junior (PQ), Igor Mantovani (PG), Jurandir P. Pinto (PQ).

solci@uel.br

LACA, Departamento de Química, Universidade Estadual de Londrina.

Key words: BC, PM_{2.5}, Air pollution, Aerosol, Diagnostic ratio BC_{2.5}/PM_{2.5}.

Highlights

Variability of BC in PM_{2.5} measured in Londrina, Brazil.
Fine fraction mass concentration from 5.3 to 328 µg m⁻³.
Highest BC concentration of 6.9 µg m⁻³.
BC_{2.5}/PM_{2.5} of 0.06 suggesting influence of solid fuel sources (biomass burning)

Abstract

Black carbon (BC) pollution has become a crucial issue due to its multiple effects on urban air quality, global climate change and public health. BC is mainly associated to fine PM and is one of the most harmful air pollutants. It is a valuable additional air quality indicator and could be useful to evaluate not only the health risks arising from air pollution dominated by primary combustion emissions, but also the benefits of traffic abatement measures. The present study aims to quantify BC and PM_{2.5} levels and their variability in Londrina ambient air. PM_{2.5} samples were collected using a high-volume (Hi-Vol) sampler (Energetica, Brazil) installed near PR-445 road in Londrina from May 2017 to June 2018. Pre-treated quartz microfiber filters (22.8 cm × 17.7 cm, Whatman, USA) were used every 3 days for 24h at 1.13 m³ min⁻¹. Before and after collection, filters were conditioned in a room with controlled temperature and humidity (22 ± 3 °C and 50 ± 2%) and field blank filters were included in the analysis. Gravimetric measurements were employed using an analytical balance (Mettler Toledo, Switzerland) and PM mass was obtained based on the difference between the mass of the filter before and after each collection. BC concentrations were determined through the light reflectance method using the EEL 43D Smoke Stain Reflectometer (Diffusion Systems, UK). 90 samples were collected along the period. Mass concentration of ≤ PM_{2.5} ranged from 5.3 to 328 µg m⁻³ with highest values in dry seasons (May and June) with fewer precipitation events. BC equivalent concentration varied from 0.15 to 6.9 µg m⁻³ in January (wet) and May (dry) 2018, respectively. The calculated diagnostic ratio BC_{2.5}/PM_{2.5} ranged from 0.002 to 1.7. According to Liu *et al.* (2018), ambient air low BC/PM ratio indicates mainly the influence of solid fuel combustion (coal and biomass burning), while high ratios indicate predominant influence of liquid fuel sources (traffic). Silva Jr. *et al.* (2018) investigated the BC/PM ratio originating from a traffic primary source (diesel/biodiesel fuel) and presented a diagnostic ratio of 0.85. This result was very important as it allows us to recognize a fingerprint and therefore help identify sources of air pollution. The measurements in Londrina ambient air present an average diagnostic ratio of 0.06, indicating more influence of solid fuel combustion sources. Although the sampling site was near a highway road and avenues, the burning practice seems to be more representative than the traffic source. The average concentration of fine particle fraction was 30 µg m⁻³ and 30% of the yearly values was higher than the OMS recommendation for healthy ambient air (25 µg m⁻³). Because BC and particle mass were not highly correlated in time, BC should be a useful additional air pollution indicator.

References

Hung *et al.* Atmospheric Environment 92(2014)231.
Liu *et al.* Sci. Total Environ. 618(2018)531.
Silva Jr *et al.* J. Braz. Chem. Soc. (2019).

Acknowledgments

INCT-E&A, CNPq, CAPES, UFRJ (specifically to Profa. Dra. Graciela Arbilla, for lending us the Hi-Vol sampler).

Área: EDU

(Inserir a sigla da seção científica para qual o resumo será submetido. Ex: ORG, BEA, CAT)

Nº de Inscrição: 00191

(Inserir o número de inscrição do autor que fez a submissão)

CONTRIBUIÇÕES DO NUPEC NA PROFISSIONALIZAÇÃO DA CARREIRA DOCENTE PARA AS ÁREAS DE ENSINO DE QUÍMICA DAS IES EM GOIÁS

Nyuara A. S. Mesquita (PQ),¹ Márton H. F. B. Soares (PQ).¹ nyuara2006@gmail.com

¹Laboratório de Educação Química e Atividades Lúdicas (LEQUAL)/Instituto de Química, UFG

Palavras Chave: formação docente, licenciatura em química .

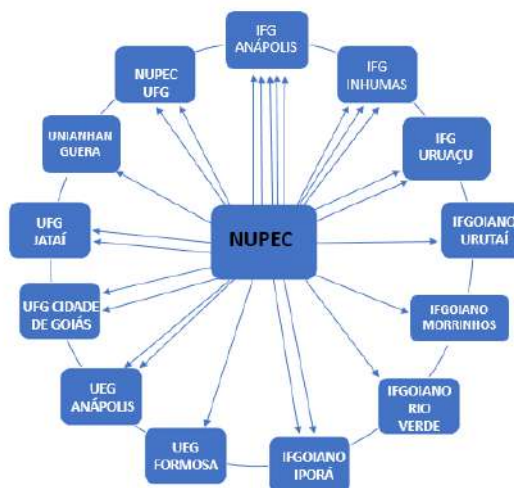
Highlights

NUPEC CONTRIBUTIONS IN THE PROFESSIONALIZATION OF THE TEACHING CAREER FOR THE AREAS OF TEACHING CHEMISTRY OF IES IN GOIÁS. NUPEC contributes to the training of masters and doctors in the area of Chemistry Teaching in the state of Goiás. These professionals work to improve the quality of the degree programs in the region.

Resumo/Abstract

A expansão das licenciaturas demanda profissionais para estruturar cursos de formação de professores em suas especificidades como nos estágios, disciplinas de didática, instrumentação para o ensino, dentre outras. Nesse sentido, o Núcleo de Pesquisa em Educação em Ciências (NUPEC) da Universidade Federal de Goiás (UFG), criado em 2004, formado por cinco doutores que atuam na área de Ensino de Química, tem contribuído com a formação de mestres e doutores na área de Ensino de Química. Os docentes do NUPEC atuam em dois programas de Pós-Graduação: Programa de Pós-Graduação em Química e o Programa de Pós-Graduação em Educação em Ciências e Matemática, ambos da UFG. A partir da atuação como orientadores, os cinco professores do NUPEC formam novos mestres e doutores que por sua vez passam a compor áreas de Ensino de Química de outros cursos de Licenciatura em Química ofertados por Instituições de Ensino Superior (IES) públicas e privadas no estado de Goiás. Visando identificar as contribuições formativas dos professores do NUPEC na profissionalização docente no estado, realizamos pesquisa documental dos currículos da Plataforma Lattes dos docentes do NUPEC e de seus orientandos para identificar as IES nas quais os mestres e doutores orientados pelos professores do NUPEC atuam em cursos de Licenciatura em Química. O resultado deste levantamento é apresentado na Figura 1.

Figura 1 – Número de professores formados no NUPEC que atuam em IES de Goiás



Nota-se que há 24 professores orientados, em nível de mestrado e/ou doutorado, por docentes do NUPEC que atuam como professores formadores de cursos de Licenciatura em Química de Goiás. Essa participação alcança 13 dos 16 cursos (82%) ofertados no estado. Dessa forma, destacamos que o NUPEC contribui de forma efetiva na formação de recursos humanos para a área da formação docente e da pesquisa em ensino de química no estado de Goiás.

A simple dispersive micro-solid phase extraction (D- μ -SPE) procedure for the simultaneous determination of polycyclic aromatic compounds in water samples

**Madson M. Nascimento (PG)¹, Gisele O. Da Rocha (PQ)¹, Jailson B. de Andrade(PQ)^{1,2},
madchemis89@gmail.com**

¹Departamento de Química Geral e Inorgânica, Instituto de Química, UFBA;

²SENAI-CIMATEC, Av. Orlando Gomes, 1845 - Piatã, 41650-010, Salvador - BA

Palavras-Chave: *Polycyclic aromatic compounds, Dispersive micro-solid phase extraction, Water samples*

Highlights

A simple and practical D- μ -SPE procedure for extraction and preconcentration of PAHs, nitro-PAHs and quinones was developed. The extraction conditions were optimized using experimental design. The validated procedure was successfully applied in the determination of PCs in water samples.

Resumo/Abstract

In present study, a new and practical D- μ -SPE procedure for the simultaneous determinations of polycyclic aromatic compounds (PACs) in water samples (20 – 250 mL) was developed. The dispersive micro-solid phase extraction procedure was based on the use of C18 as sorbent combined with a microextraction step using 500 μ L of hexane in a Whatman Mini-UniPrep syringeless filter G2 (microextraction device), followed by GC-MS analysis. The D- μ -SPE procedure employed a specially designed glass device (20 mL – 500mL) and 100 mg of C18. The main factors affecting the dispersive micro-solid extraction were optimized using Doehlert design. The optimal extraction conditions were 100 mg of C18 as sorbent and 32 minutes of extraction on vortex at 1000 rpm followed by filtration on a glass wool mini filter. After sample filtration, the sorbent and the glass wool was directly transferred to the microextraction device. The desorption step was carried out using 500 μ L of hexane under 20 minutes of sonication. Both desorption and filtration steps were performed in the same microextraction device providing high analytical speed. The microextraction device has the same dimensions as a chromatography vial and therefore, it was put on the GC-MS autosampler and the extract was directly injected. The limit of detection for PAHs and nitro-HPAs, ranged from 0.9 - 66 ng L⁻¹ and 300 ng L⁻¹ to 500 ng L⁻¹, respectively. For quinones it ranged from 1.62 μ g L⁻¹ to 4.4 μ g L⁻¹. Recoveries ranging from 70.3 % to 107 % (RSD 29 %) were obtained for the most of PAHs and 68.9 % to 169 % (RSD \leq 7.5 %) for the nitro-PAHs. The recoveries for quinones ranged from 65.3 % to 95.3 % (RSD \leq 15.6 %). Enrichment factor ranging from 98 to 1702; 22 to 970; and 122 to 1388 were obtained for PAHs, nitro-PAHs and quinones, respectively. After validation, the procedure was successfully applied in the determination of PACs in riverine and marine water samples. Low molecular weight PAHs were detected with high frequencies and their concentration ranged from 6.94 ng L⁻¹ (fluoranthene) to 18.9 ng L⁻¹ (acenaphthene). The Figure 1 shows a chromatogram of a real marine water sample analyzed using the developed procedure.

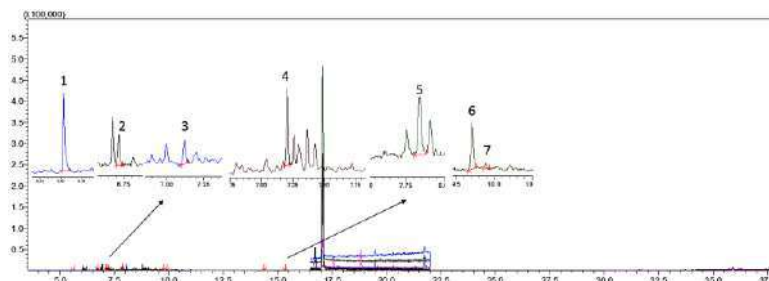


Figure 1. GC-MS Chromatogram (SIM mode) of a marine sample. [1] naphthalene, [2] 1,4-naphthoquinone, [3] acenaphthylene, [4] acenaphthene, [5] fluorene, [6] phenanthrene, [7] anthracene.

Agradecimentos/Acknowledgments

CNPq, CAPES (This study was financed in part by the Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior - Brasil (CAPES) - Finance Code 001), FAPESB and FINEP.

Área: BEA

(Inserir a sigla da seção científica para qual o resumo será submetido. Ex: ORG, BEA, CAT)

Nº de Inscrição: 00193

(Inserir o número de inscrição do autor que fez a submissão)

Determination of metals and macronutrients of *Bromelia antiacantha* Bertol. fruits collected in Rio Grande do Sul.

Miriam Ines Marchi ^{1,*},(PQ), **Marciéli Aldine Mann** ²;(IC) **Bárbara Buhl** ²;(IC) **Talita Scheibel** ²;(IC) **Maria Cristina Dallazen** ¹, (PQ), **Lucélia Hoehne** ¹;(PQ) **Elisete Maria de Freitas** ², **Eduardo Miranda Ethur** ¹

mimarchi@univates.br; mimarchi@univates.br

¹ Centro de Ciências Exatas e Tecnológicas, UNIVATES, ² Centro de Ciências Biológicas e da Saúde, UNIVATES,

Palavras Chave: *Bromelia antiacantha* Bertol., minerais, macronutrientes, micronutrientes, PANC.

Highlights

Study of the physical and chemical properties of *Bromelia antiacantha* Bertol.
Bromelia antiacantha Bertol. Can be used as a food supplement.
 High levels of minerals in *Bromelia antiacantha* Bertol.

Resumo/Abstract

Bromelia antiacantha Bertol. also known as caraguatá, carauatá, gravatá or bananinha-do-mato, is considered an unconventional food plant (PANC in Portuguese). The ripe fruits are used in the preparation of jellies, juices, liqueurs and "sparkling wines". However, there are few studies on the chemical composition of *B. antiacantha*, especially on the content of metals present in fruits. In this way, the objective of this work was to evaluate the metals composition and macronutrients of the fruits of *B. antiacantha*. The main parameters analyzed were: sodium, calcium, potassium, manganese, magnesium, zinc, iron and nickel (Table 1), pH, moisture, lipids, ashes, proteins, carbohydrate, phosphorus (Table 2). The samples were analyzed in triplicate, with results expressed as mean values and standard deviation

Tabela 1: Analysis of metals of fruits of *B. antiacantha*

| Parameters | Contents |
|--------------|-----------------------------------|
| Na (mg/100g) | 20,61 ± 0,01 |
| Ca (mg/100g) | 72,54 ± 0,01 |
| K (mg/100g) | 326,59 ± 0,02 |
| Mn (mg/100g) | 2,14 ± 0,01 |
| Mg (mg/100g) | 12,87 ± 0,01 |
| Zn (mg/100g) | 0,00058 ± 3,40 x 10 ⁻⁷ |
| Fe (mg/100g) | 0,00014 ± 6,53 x 10 ⁻⁷ |
| Ni (mg/100g) | 0,00122 ± 3,23 x 10 ⁻⁶ |

Tabela 2: Physical-chemical parameters of fruits of *B. antiacantha*

| Parameters | Contents |
|----------------------|--------------|
| pH | 3,82 ± 0,04 |
| Moisture (%) | 43,37 ± 4,17 |
| Lipids (%) | 1,19 ± 0,10 |
| Asches (%) | 4,50 ± 0,14 |
| Proteins (%) | 0,79 ± 0,01 |
| Carbohydrate (%) | 50,15 |
| Phosphorus (mg/100g) | 40,28 ± 0,01 |

Through the results it was possible to observe that the fruits of *Bromelia antiacantha* have high levels of minerals, among them metals and low lipid content. In this way, this food can be a low-cost alternative to complement the intake of these nutrients.

Agradecimentos/Acknowledgments

This study was financed in part by the Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior - Brasil (CAPES) - Finance Code 001, Financiadora de Estudos e Projetos (FINEP), Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq) and Univates.

Área: INO

Nº de Inscrição: 00194

Filmes de Langmuir-Blodgett de compostos anfífilos derivados do heterociclo 1,3,4-oxadiazol e suas caracterizações

Iolanda P. Araújo (IC),^{1*} Elizangela C. Cesca (PG),¹ Eduard Westphal (PQ),² Herbert Winnischofer (PQ).¹

iooparaujo@gmail.com

¹Departamento de Química, UFPR; ²Departamento Acadêmico de Química e Biologia, UTFPR.

Palavras Chave: Langmuir-Blodgett, 1,3,4-oxadiazol, Filmes finos, Fluorescência, Cristal líquido.

Highlights

Langmuir-Blodgett films of amphiphilic derivatives of the 1,3,4-oxadiazole heterocycle and their characterizations. Some 1,3,4-oxadiazole derivatives show liquid crystalline behavior and intense fluorescence, aspects that can be explored in molecular devices with LB films (thin films of high molecular organization).

Resumo/Abstract

A química supramolecular estuda as interações moleculares provenientes de um processo de auto-organização. Materiais auto-organizados possuem aplicabilidade em áreas distintas, como no desenvolvimento de dispositivos moleculares. Além disso, em função das interações moleculares, esses materiais podem apresentar propriedades diferentes daquelas observadas em moléculas isoladas. Derivados do heterociclo 1,3,4-oxadiazol têm sido estudados nas últimas décadas para o desenvolvimento de novos cristais líquidos¹ e, em especial, por sua intensa luminescência². Neste trabalho, apresentamos dois compostos anfífilos sintetizados pelo grupo, 2-(4-dodeciloxinaftil)-5-(4-piridil)-1,3,4-oxadiazol (**NFT1**) e 2-(4-dodeciloxinaftil)-5-(2-piridil)-1,3,4-oxadiazol (**NFT2**). Ambos foram caracterizados por técnicas de RMN de ¹H, ESI-MS, UV-Vis, FTIR, Raman, as quais confirmaram a estrutura proposta, e por espectroscopia de fluorescência, termogravimetria e microscopia óptica de luz polarizada. Os máximos de emissão das bandas de fluorescência (em clorofórmio) do **NFT1** e **NFT2** foram observadas em 410 nm e 418 nm, respectivamente. Os resultados de DSC e as texturas observadas em MQLP permitiram atribuir que somente o **NFT1** é cristal líquido, cujas moléculas estão organizadas em uma mesofase esméctica A. Posteriormente, os compostos foram estudados em interface líquido-ar em uma Cuba de Langmuir, à temperatura ambiente, na qual ambos os filmes apresentaram auto-organização. O **NFT1** apresentou um comportamento muito estável, com perfil de isoterma semelhante ao de ácidos graxos, enquanto no caso do **NFT2**, a molécula passa por uma mudança de orientação sobre a subfase aquosa, representada por um patamar na isoterma. Após as caracterizações e a definição das condições apropriadas, os filmes de Langmuir foram transferidos para substratos de quartzo e ouro e os filmes de Langmuir-Blodgett (LB) foram caracterizados por UV-Vis e FTIR-IRRAS. Os resultados obtidos por UV-Vis dos filmes, comparados com os resultados em solução, demonstram que ocorre a formação de agregados do tipo -J e, predominantemente, do tipo -H. A partir dos estudos e das caracterizações dos filmes foi possível confirmar que os parâmetros de deposição utilizados foram ideais. Essas interações moleculares presentes nos filmes de **NFT1** e **NFT2** podem ser úteis na construção de dispositivos fotônicos. Estudos de caracterização da luminescência dos filmes estão em andamento.

¹ Han, J. "1,3,4-Oxadiazole based liquid crystals". *Journal of Materials Chemistry C*, **2013**, 1(47), 7779-7797.

² Horvath, R.; Fraser, M. G.; Cameron, S. A.; Blackman, A. G.; Wagner, P.; David, L. O.; Gordon, K. C. *Inorg. Chem.* **2013**, 52, 1304–1317.

Agradecimentos/Acknowledgments

À Prof.^a Dr.^a Daniela Mezalira, ao Prof. Dr. Hugo Gallardo, PPGQ-UFPR, PPGQ-UTFPR, UFPR, UTFPR, CNPq, CAPES.

Área: QPN

(Inserir a sigla da seção científica para qual o resumo será submetido. Ex: ORG, BEA, CAT)

Nº de Inscrição: 00195

(Inserir o número de inscrição do autor que fez a submissão)

In vitro* antimicrobial activity, of the essential oils of two *Psidium salutare* variations on clinical isolates of *Candida spp.

Eduardo M. Ethur^{1,*}(PQ), Bárbara Buhl² (PG), Talita Scheibel² (IC), Carla Kauffmann² (PQ), Valeriano A. Corbelini³ (PQ), Miriam I. Marchi¹ (PQ), Elisete M. de Freitas² (PQ) e Lucélia Hoehne¹ (PQ)

eduardome@univates.br; eduardome@univates.br

¹ Centro de Ciências Exatas e Tecnológicas, UNIVATES, ² Centro de Ciências Biológicas e da Saúde, UNIVATES; ³ Departamento de Química e Física, UNISC.

Palavras Chave: *Candidíase*, *Psidium salutare*, Óleo essencial, Bioma Pampa, 1,8-Cineol, Atividade antimicrobiana

Highlights

The OE of PSS and PSM are rich in monoterpenes.
1,8-cineole is the major component of OEPSS and OEPSM.
Fourteen clinical isolates of *C. albicans* were tested.

Resumo/Abstract

Candida spp. is a group of opportunistic yeasts whose incidence of infections encompasses a broad spectrum of diseases that may be of little clinical relevance or even deadly. With the widespread and inadequate use of antifungals, they are no longer showing good results due to the resistance acquired by these isolates, and therefore, a search for drugs with a broader action spectrum has been occurring, and plant extracts have a great potential for the discovery of new treatments. The objective of this work was to identify the chemical components and to evaluate the antimicrobial activity and the antibiofilm activity of the essential oil (OE) of *Psidium salutare* var. *sericeum* (PSS) and *mucronatum* (PSM) on 14 clinical isolates of *Candida spp.* Leaf OE was extracted by hydrodistillation using a modified Clevenger apparatus for 3.5 h of extraction. The essential oil compositions were determined by gas chromatography and mass spectrometry. The clinic isolates of *Candida* were: *C. albicans* ATT 10231; *C. albicans* 0051-L; *C. famata* RL28; *C. glabrata* RL49; *C. glabrata* 0030-L; *C. glabrata* 993; *C. guilhiermondii* TA07; *C. guilhiermondii* CGU02; *C. krusei* 0037-L; *C. krusei* ATCC 6258; *C. lusitaniae* RL21; *C. parapsilosis* RL38; *C. parapsilosis* RL33 e *C. tropicalis* ATCC 750. The evaluation of antimicrobial activity was carried out by the broth microdilution method. In all, 98.96% of the essential oil of PSS and 98.27% of the oil of PSM were identified. The major component presented by both oils was 1,8-cineole. As for the antimicrobial activity, the essential oils of PSS and PSM only showed a potential antimicrobial activity on *C. albicans* ATCC 10231, in which an MIC of 1.25 mg/mL was observed. Preliminary studies, such as this one, may indicate potential substances with antifungal action, serving as a basis for possible alternative treatments.

Agradecimentos/Acknowledgments

This study was financed in part by the Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior - Brasil (CAPES) - Finance Code 001, Financiadora de Estudos e Projetos (FINEP), Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq) and Univates.

Graphene oxide/imidazole polymeric non-covalent nanocomposite: nanocatalyst for organophosphates

Thayna Hack Pereira de Lima (IC),* Naiane Naidek (PG), Aldo J. G. Zarbin (PQ), Elisa S. Orth (PQ)

thackpl@gmail.com

Department of Chemistry, Universidade Federal do Paraná (UFPR), CP 19032, CEP 81531-980, Curitiba, PR, Brazil.

Keywords: Graphene oxide, Nanocatalyst, Electrochemical Polymerization, Imidazole, Organophosphates degradation.

Highlights

- Efficient degradation of an organophosphate;
- Thin film device easily separated from medium.

Abstract

Possessing high toxicity, organophosphates are organic compounds widely used as chemical weapons and pesticides. They remain potentially active on the environment for years, due to their high chemical stability. The understanding of dephosphorylation reactions mechanisms is fundamental for a precise control of these agents. In this context, several materials are being developed to monitor and destroy organophosphates in food, water and stockpiles, such as graphene oxide (GO), metal nanoparticles, and other organic molecules, as for example imidazole (IMZ). This work proposes the development of a non-covalently functionalized GO nanocatalyst with the electropolymerized polymer of 1-(3-aminopropyl) imidazole (API). The final nanocomposite was used in order to cleave the organophosphate diethyl 2,4 -nitrophenyl phosphate (DEDNPP).



Figure 1: Schematic representation of non-covalent nanocomposite and DEDNPP dephosphorylation

The polymer nanocomposite formation was identified by scanning electron microscopy (SEM), which the globular aggregates of API polymers on the GO surface are visualized in the images. An heterogeneous system for monitoring DEDNPP degradation was prepared and the dephosphorylation reaction progress was accompanied by UV-Vis analysis with the increase of the band at 400 nm, characteristic of the 2,4-dinitrophenolate compound (DNP), the degradation products of the DEDNPP. The results for the catalytic activity evaluated according to a kinetic profile of a pseudo first order reaction, are among the highest reported for this reaction. Finally, a device with a non-covalently bound nanocomposite of GO and electrochemically polymerized PolyAPI was produced. Excellent results were obtained for the degradation of DEDNPP, evidencing the effectiveness of GO/PoliiAPI, in order to configure itself as a promising and innovative method for the monitoring/degrading such agents. Additional nanocomposites characterizations are being performed to fully understand the proposal mechanism.

References: (1) Trac-Trend Anal Chem 2014, 54, 1-10; (2) J Catal 2017, 356, 75-84

Acknowledgments

Authors acknowledge the Financial support from UFPR, CNPq, CAPES, PhosAgro/UNESCO/IUPAC, Fundação Araucária, INCT de Nanomateriais de Carbono and L'Oréal-UNESCO-ABC.

Área: MED

(Inserir a sigla da seção científica para qual o resumo será submetido. Ex: ORG, BEA, CAT)

Nº de Inscrição: 00198

(Inserir o número de inscrição do autor que fez a submissão)

Metabolic stability studies of methyl and ethyl esters and their application in Medicinal Chemistry

Hygor M R de Souza (PG),¹ Luis G. V. Gelves (PQ),¹ Lídia M Lima (PQ).^{1*}

ribeirohygor@gmail.com; lmlima23@gmail.com

¹Laboratório de Avaliação e Síntese de Substâncias Bioativas (LASSBio®), Universidade Federal do Rio de Janeiro, CCS, Cidade Universitária, Rio de Janeiro-RJ, Brazil.

Palavras Chave: *Hydrolytic liability, Esteres moiety, Carboxylesterase, Pro-drugs, Enzymatic hydrolysis.*

Highlights

The half-life difference between the methyl and ethyl esters strengthens the possibility of the rational choice of carboxyl-linked groups for the construction of bioactive compounds containing esters. The base-promoted chemical hydrolysis was compared with the enzymatic hydrolysis using rat plasma and hepatic microsome.

Resumo/Abstract

Esters are the best known in pro-drugs and drug prototype candidates due to the predominance of carboxylic and hydroxyl substituents in drug molecules along with the availability of enzymes in living systems capable of hydrolyzing them.¹ Although the mechanism of chemical and enzymatic hydrolysis is known,^{2,3} only a few studies have studied that correlate the reactivity of enzymatic hydrolysis with the alkoxy substituent.⁴ In this work, we reported how the stability of esters is affected by increase in the carbon chain length of the ester moiety in the presence of rat plasma and liver microsome when compared to promoted base hydrolysis. Thus kinetic hydrolysis studies of esters were performed under three experimental conditions: i) in the presence of lithium hydroxide in a mixture of THF: H₂O at 37 °C; ii) in the presence of plasma solution at 37 °C; and iii) in the presence of hepatic microsome from rats at 37 °C. All the analyzes were performed by HPLC-MS. The half-life was calculated using the expression $t_{1/2} = 0.693/a$, and is a straight slope of the natural log of sample concentration vs incubation time. One-way analysis of variance (ANOVA) test followed by Dunnett post-tests were used for comparisons among groups, and were considered significant for all tests with a minimum of $P < 0.05$. Methyl and ethyl showed 14 and 15 minutes half time for alkaline hydrolysis, respectively. On the other hand, they present a contrary result 36 and 17 in rat plasma and 15 and 12 minutes in liver microsome, respectively. These results allowed confirming the possibility of predicting the reactivity of the hydrolysis in basic medium as dependent of the carbonyl electrophilicity and the stability of the alkoxy ion. However, the results clearly revealed the impossibility of applying the same rational to explain the reactivity against enzymatic hydrolysis. The data obtained evidenced the greater hydrolytic liability of the methyl carboxylate group under basic conditions. On the other hand, this group showed the one of greater stability against the enzymatic hydrolysis. The participation of CES in the hydrolytic process was confirmed by enzymatic inhibition studies using an irreversible CES inhibitor. The extrapolation of the results to more complex esters was performed by studying the kinetics of comparative hydrolysis of flumazenil and benzocaine, both containing the ethyl carboxylate subunit, and comparing the results with the kinetics of their lower homologues (i.e. presenting the methyl carboxylate unit) obtained by transesterification. From these studies, it was possible to confirm the higher hydrolytic stability of the methyl ester, when compared to the corresponding ethyl ester, in rat plasma. Finally, the results obtained in this work strengthen the possibility of carrying out the ad hoc planning of bioactive compounds or pro-drugs containing esters, from the rational choice of the groups bound to carboxyl unit, according to the need to obtain compounds of higher stability or greater hydrolytic liability, indicating that the hydrolytic stability in plasma or rat microsomes is inversely proportional to the size of the alkoxy group linked to the ester- carbonyl subunit.

¹Rautio, J. *et. al.* Nat. Rev. Drug Discov. **2008**, 7, 275; ²Bender, M. L. Chem. I Rev. **1960**, 60, 53; ³Aranda, J. *et. al.* Biochemistry. **2014**, 53, 5820; ⁴Jordan, C.G. J Pharm Sci. **1998**, 87, 880.

Agradecimentos/Acknowledgments

FAPERJ, CAPES, INCT-INOVAR

Reverse solvatochromism in a family of “hybrid cyanine” dyes having 2,6-di-*tert*-butylphenolate as electron-donating group

Carlos E. A. de Melo (PG), Celso R. Nicoleti (PQ), Misael Ferreira (PQ), Vanderlei G. Machado (PQ)*
vanderlei.machado@ufsc.br

Departamento de Química, Universidade Federal de Santa Catarina, UFSC, Campus Trindade, Florianópolis, SC

Keywords: Solvatochromic dyes, Solvatochromic reversal, Solvatochromism, Solute–solvent interactions

Highlights

Compounds with 2,6-di-*tert*-butylphenolate as electron-donating groups and 4-nitrophenyl or 2,4-dinitrophenyl acceptor moieties on their molecular structures were synthesized. Their solvatochromism was studied in 29 solvents. In all cases a reverse solvatochromism occurred.

Abstract

Seven compounds with 2,6-di-*tert*-butylphenolate as electron-donating groups and 4-nitrophenyl or 2,4-dinitrophenyl acceptor moieties with or without conjugated bridges on their molecular structures (**Figure 1**) were synthesized and studied as probes of solvent polarity.

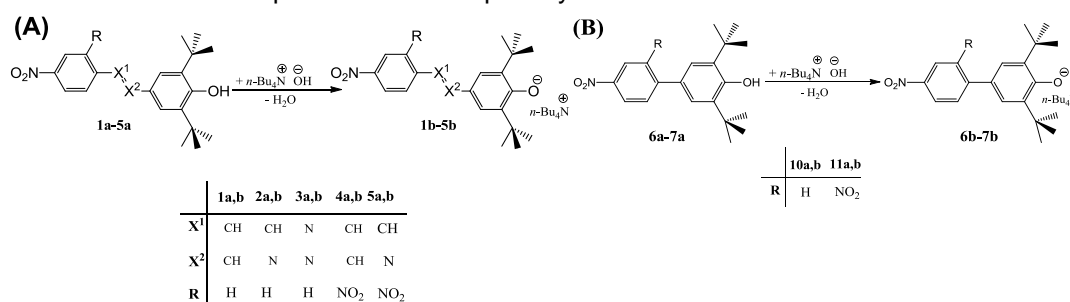


Figure 1. Compounds (A) **1a–5a** and (B) **6a–7a** and their deprotonation to generate dyes **1b–7b**.

The phenolate dyes were studied in 29 solvents with different polarities, as shown for dye **6b** in **Figure 2A** and **2B**. In all cases a reversal in the solvatochromism was verified (**Figure 2C**).

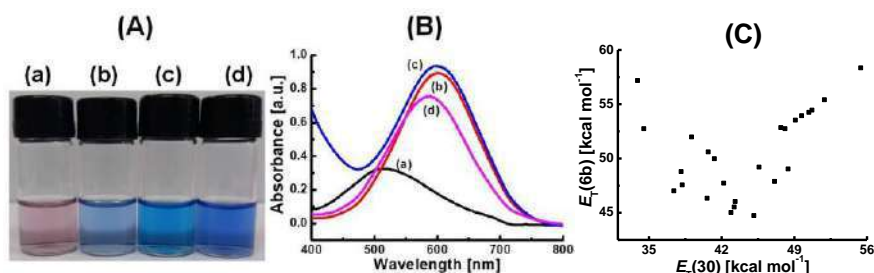


Figure 2. (A) Solutions of dye **6b** and (B) corresponding UV-vis spectra in (a) ethanol, (b) dimethoxyethane, (c) acetone and (d) ethyl acetate. (C) Molar transition energies for dye **6b** as a function of $E_T(30)$.

In order to evaluate which parameter of the solvent has greater influence in the solvation of the solute, Kamlet-Abboud-Taft and Catalán multiparametric equations were applied to these systems. Catalán strategy provided the best correlations for all dyes studied, and the acidity was the parameter of the solvent that has the greater influence on the solvatochromic behavior of the dyes.

Acknowledgments

The authors are grateful to UFSC, CAPES (Finance code 001), CNPq and FAPESC.

STUDY OF PHOTOCATALYTIC ACTION OF ZnO NPs IN THE DECOMPOSITION OF SYNTHETIC POLYMERS

Ana Luiza Einloft Petter da Silva (IC),¹ Francielle Schmitz (PG),¹ Samara de Quadros (PG),¹ Lizandra M. Zimmermann (PQ).^{1*}

E-mail: eanaluiza@hotmail.com; lmz@furb.br

¹Departamento de Química. CCEN/FURB. Rua Antônio da Veiga, 140, CEP 89012-900, Blumenau, SC.

Keywords: zinc oxide nanoparticles, UV-blocker, polystyrene, nanocomposites, photodegradation

Highlights

NPs of ZnO were combined with polymeric matrices of polystyrene giving rise to nanocomposites with good properties, allowing the investigation of the photocatalytic action of ZnO in the decomposition of PS.

Abstract

A special class of semiconductor nanoparticles (NPs), as zinc oxide (ZnO), has been receiving a lot of attention due to its properties, such as high photocatalytic potential, antimicrobial activity and protection against ultraviolet (UV) radiation.¹ Therefore, ZnO NPs were synthesized via sol-gel route in alcoholic medium and afterwards combined with polystyrene (PS) in chloroform in order to get films. Then, the photodegradation of PS was investigated, given the photocatalytic activity of ZnO. Figure 1 shows that it was possible to obtain PS nanocomposites with good properties and homogeneity. The films with NPs presented good transparency, as shown in Figure 2. The introduction of NPs causes the system to absorb more UV radiation, making the material a good UV-blocker. Also, in Figure 2, by the absorbance spectrum of the dispersion of the synthesized material, it is possible to observe that the particles are larger than those in the quantum confinement regime, with average diameters ≥ 10 nm, confirmed by DLS. It was possible to analyze the dispersion quality of the NPs in the polymer matrix (Figure 3). Through the FTIR measurements (Figure 4), it is intended to discuss the mechanism of PS degradation in the presence and absence of ZnO, considering the intensity ratio of PS characteristic bands.

Figure 1. Nanocomposite (PS + ZnO NPs) under white light (A) and UV light at 365 nm on nanocomposite (B) and on pure PS (C)

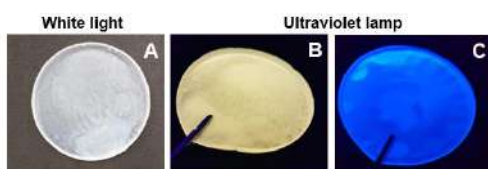


Figure 3. SEM images for nanocomposite (PS + ZnO NPs)

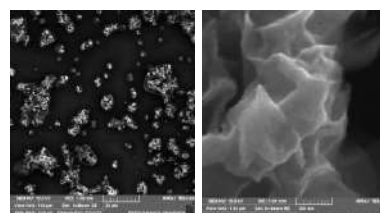


Figure 2. Spectrum of absorbance of ZnO colloidal dispersion (30 min after synthesis) (A). Spectrum of transmittance of PS films with and without NPs with an image insert of a nanocomposite film on a paper (B).

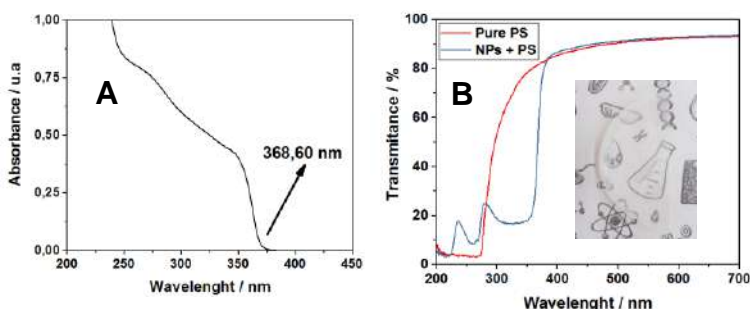
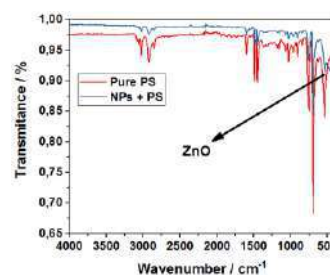


Figure 4. FTIR spectrum of pure PS and nanocomposite



1. Zimmermann, L. M.; Baldissera, P. V.; Bechtold, I. H. *Mat. Res. Exp.*, **2016**, 3, 7, 075018.

Acknowledgments

FURB, FAPESC, Capes, SED-Santa Catarina/ PiPe Art. 170 for the financial support.

Chemical structure of a partially 3-O-methylated heterogalactan from medicinal mushroom *Pholiota nameko*

Letícia S. Mello (IC)^{1*}, Ruberney S. Oliveira (PG),¹ Dayane R. Brito (PG),¹ Sthefany R. F. Viana (PG),² Maria Carolina B. Di-Medeiros(PQ),³ Luciano M. Lião (PQ),³ Elaine R. Carbonero (PQ).¹

leticia-silvanello100@hotmail.com; elainecarbonero@gmail.com

¹Unidade Acadêmica Especial de Química, UFG-Regional Catalão; ²Faculdade de Ciências Agrônomicas, UNESP Botucatu; ³Instituto de Química, UFG-Regional Goiânia.

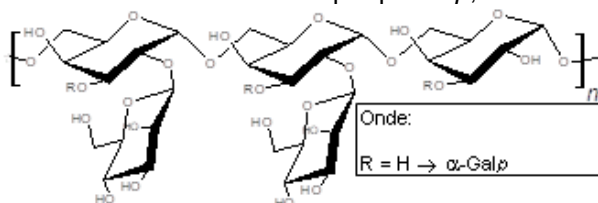
Palavras Chave: Macrofungos, *Pholiota nameko*, Polissacarídeo, Caracterização estrutural, GC-MS, RMN

Highlights

A heterogalactan from *P. nameko* was structurally characterized
It containing a (1→6)-linked main chain, composed of 3-O-Me- α -Galp and α -Galp units
The polymer was highly branched by β -Manp single-units

Resumo/Abstract

Pholiota nameko é um macrofungo amplamente consumido para fins gastronômicos e/ou medicinais. Diversos estudos demonstram que as principais moléculas responsáveis pelos efeitos terapêuticos (antitumoral, imunomoduladora, anti-inflamatória) atribuídos a estes organismos são os polissacarídeos. No entanto, há poucos relatos sobre a estrutura química fina dos polímeros obtidos a partir dos basidiomas produzidos no Brasil. Para isto, uma alíquota (25,2 g) foi submetida à extração aquosa (10°C; 2x), originando um extrato bruto que foi fracionado com EtOH (3:1; v/v). A fração polissacarídica (precipitado etanólico) foi separada por centrifugação, dialisada e liofilizada, resultando a fração *Pn*-AF (~2,6 g) composta por xilose (Xyl; 3,2%), 3-O-Metil-Galactose (3-O-MeGal; 3,1%), Manose (Man; 18,5%), Glucose (Glc; 58,8%) e Galactose (Gal; 16,2%). Visando a purificação, *Pn*-AF foi submetida ao fracionamento por congelamento e degelo e precipitação com CuSO₄ em meio alcalino. A partir destes procedimentos foi isolada uma fração homogênea (*Pn*-PF₂AF) constituída por Man (40,2%), Gal (52,2%) e 3-O-MeGal (7,6%). Para determinação do tipo de ligação glicosídica, uma alíquota desta fração foi metilada e analisada por CG-EM, a qual continha derivados parcialmente metilados correspondentes às unidades de Galp e 3-O-Me-Galp 6-O e 2,6-di-O-substituídas (2,3,4-Me₃-Gal e 3,4-Me₂-Gal, respectivamente) e aos terminais não redutores de Manp (2,3,4,6-Me₄-Man). Análises de RMN 1D e 2D confirmaram a presença de uma manogalactana similar àquelas isoladas de cogumelos do gênero *Pleurotus*, sendo constituídas por uma cadeia principal formada por α -Galp e 3-O-Me- α -Galp ligadas (1→6), parcialmente substituídas em O-2 por β -Manp, conforme estrutura a seguir:



Agradecimentos/Acknowledgments

À CAPES e ao CNPq pelo apoio financeiro e à empresa YUKI Cogumelos (Proprietário: José Francisco Ramos Fernandes Viana) pela doação do macrofungo.

Copper-Supported ZSM-5 Zeolite: Catalysts with High Catalytic Activity for Chemical Transformation of Limonene.

Gabriela Maria Maffi (IC),^{1*} Anderson Joel Schwanke (PQ),² Rosana Balzer (PQ)¹

maffigabriela@gmail.com

¹Universidade Federal do Paraná-Setor Palotina (UFPR), 85950, PR, Brasil.

²Universidade Federal do Rio Grande do Sul (UFRGS), 91540000, RS, Brasil.

Palavras Chave: (Zeólita ZSM-5, Catálise Heterogênea, Limoneno).

Highlights

Catalytic reactions heterogeneous of limonene.

Limonene (monocyclic monoterpene) is a natural and abundant substrate in Brazil.

Zeolite ZSM-5.

Heterogeneous copper catalyst supported in ZSM-5.

Resumo/Abstract

Pesquisas na área de catálise heterogênea vêm buscando o desenvolvimento de novos catalisadores com elevada seletividade e conversões significativas em reações de transformação química de monoterpenos. Nesse contexto, a zeólita ZSM-5 (Zeolite *Socony Mobil* number 5) apresenta características importantes para esse estudo, tais como, estabilidade térmica, seletividade de forma, acidez e elevada área superficial específica, tornando-se um suporte catalítico promissor ^[1]. A zeólita ZSM-5 é composta por unidades pentasil e pertencem a estrutura do tipo MFI (Mobil Five). A produção de derivados terpênicos e terpenóides naturais são importantes para a indústria de medicamentos, fragrâncias e óleos essenciais ^[2]. Assim, destaca-se o limoneno (monoterpeno monocíclico) o qual é um substrato natural, abundante e renovável no território brasileiro. Dessa forma, o objetivo desse trabalho é sintetizar catalisadores de cobre (Cu) suportados em ZSM-5 que sejam eficientes e seletivos frente à reações de transformação química do monoterpeno monocíclico (R)-(+)-limoneno. Foram preparados dois catalisadores, identificados como: Cu_{0,05}/ZSM-5 e Cu_{0,2}/ZSM-5. Os catalisadores foram caracterizados pelos métodos: BET; BJH; DRX, MEV e IV. Os testes de atividade catalítica foram realizados em fase aquosa por 3 horas, utilizando como oxidante o peróxido de hidrogênio (H₂O₂) e os produtos reacionais foram caracterizados por cromatografia gasosa. Os principais produtos reacionais obtidos na reação de epoxidação estão apresentados na representação esquemática da **Figura 1**.

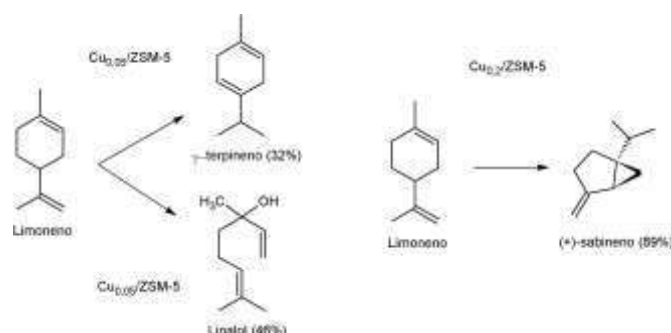


Figura 1. Produtos resultantes das reações catalíticas com o substrato limoneno e catalisadores Cu/ZSM-5.

Referências/References:

¹ Dawagreh, A. B. M.A. *ResearchGate*. **2018**, (1), 1-16.

² Charbonneau, L. *et al.*, *ACS Sustainable Chem. Eng.* **2018**, 6 (4), 5115–5121.

Agradecimentos: Fundação Araucária.

Dereplication of antileishmanial active fraction and identification of new acetogenins from seeds of *Porcelia macrocarpa* (Annonaceae)

Emerson A. Oliveira (PG)^{1,*}, Diogo de O. Silva (PQ)¹, Patricia Sartorelli (PQ)¹, Maiara Romanelli (PG)², Andre G. Tempone (PQ)², Thais A. Costa-Silva (PQ)³, João Henrique G. Lago (PQ).³
*e-mail: dupontemerson@hotmail.com

¹Instituto de Ciências Ambientais, Químicas e Farmacêuticas, Universidade Federal de São Paulo (UNIFESP); ²Centro de Parasitologia e Micologia, Instituto Adolfo Lutz (IAL); ³Centro de Ciências Naturais e Humanas, Universidade Federal do ABC (UFABC).

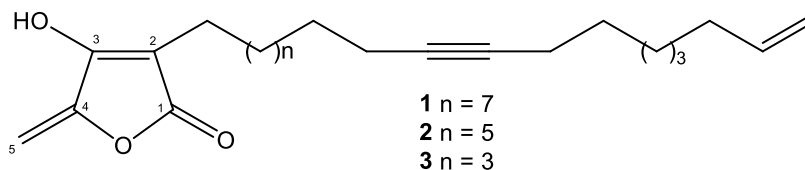
Key words: *Porcelia macrocarpa*, anti-*L. infantum* activity, dereplication procedures, acetogenins.

Highlights

Based in a prospection program aimed to identification of anti-*Leishmania infantum* metabolites from Brazilian flora from seeds of *Porcelia macrocarpa* (Annonaceae) was identified a mixture of three bioactive related acetogenins (**1** – **3**) by NMR and HPLC/HRESIMS. Fraction containing compounds **1** – **3** displayed anti-*L. infantum* potential with EC₅₀ of 34.5 ± 9.4 μM to promastigotes and 12.5 ± 3.2 μM to amastigotes. Additionally, reduced toxicity was observed to NCTC cells (CC₅₀ > 200 μM).

Abstract

Porcelia macrocarpa (Annonaceae) is an endemic plant in Brazil composed by different metabolites such as flavonoids, alkaloids, terpenes and acetogenins. The *n*-hexane extract from seeds displayed *in vitro* activity against amastigote forms of *L. infantum* (100% of parasite death at 200 μg/mL) and was submitted to a bioactivity-guided fractionation. This approach afforded a bioactive fraction whose ¹³C and DEPT NMR spectra displayed signals at δ 80.3 and 80.2, attributed to sp carbons, at δ 139.0 and 114.2 to sp² carbons and several methylene signals at range δ 32 – 19. This profile indicated the occurrence of related compounds containing an aliphatic side chain with one acetylenic system and a terminal double bond, as previously detected to acetogenins isolated from seeds of *P. macrocarpa*.¹ In the ¹H NMR spectrum were observe, beside those assigned to unsaturated side chain at δ 5.80 (ddt, *J* = 17.0, 10.0 and 6.7 Hz), 4.95 (m), 2.13 (t, *J* = 6.0 Hz), 2.04 (q, *J* = 6.7 Hz), and 1.26 (s), two coupled doublets at δ 5.26 and 5.12 (*J* = 2.9 Hz), suggesting the presence of a lactone ring. ¹³C and DEPT NMR spectra displayed, to lactone unity, four non hydrogenated carbons at δ 173.1, 105.3, 162.3, and 149.8 assigned to C-1, C-2, C-3 and C-4. An additional peak at δ 93.1 (CH₂) was thus attributed to C-5, indicating the presence of an α,β,γ,δ-carbonyl system, as reported to related compounds isolated from *Lomatium dissectum* (Apiaceae).² HPLC separation associated to HRESIMS (negative mode) spectra showed three peaks with *m/z* 385.2743, 357.2417 and 329.2126, corresponding to molecular formulas C₂₅H₃₈O₃, C₂₃H₃₄O₃ and C₂₁H₃₀O₃, respectively. Finally, analysis of MS² spectra to each compound showed an intense peak at *m/z* 123.0091 assigned to α-acetylenic fragment, indicating that the triple bond was positioned at C-11, C-9 and C-7, respectively, in compounds **1** – **3**. Therefore, these new acetogenins were identified as 3-hydroxy-4-methylene-2-(9-*n*-eicos-1-enyl)-but-2-enolide (**1**), 3-hydroxy-4-methylene-2-(9-*n*-octadec-1-enyl)-but-2-enolide (**2**) and 3-hydroxy-4-methylene-2-(9-*n*-hexadec-1-enyl)-but-2-enolide (**3**). Fraction containing compounds **1** – **3** displayed anti-*L. infantum* potential with EC₅₀ of 34.5 ± 9.4 μM to promastigotes and 12.5 ± 3.2 μM to amastigotes. Additionally, reduced toxicity was observed to NCTC cells (CC₅₀ > 200 μM). These data suggest that the fraction enriched by new acetogenins **1** – **3**, obtained from seeds of *Porcelia macrocarpa* be considered as a potential candidate for the development of a new antileishmanial drugs.



References: ¹Chaves, M.H. and Roque, N.F. *Phytochemistry* **1997**, 44, 523-528. ²Bradford, C.V. and John, H.C. *Tetrahedron* **1986**, 42, 1117-1122.

Acknowledgements: FAPESP, CAPES and CNPq.

Área: FIS*(Inserir a sigla da seção científica para qual o resumo será submetido. Ex: ORG, BEA, CAT)***Nº de Inscrição: 00206***(Inserir o número de inscrição do autor que fez a submissão)*

Modeling adsorption on oxides and zeolite

João B. L. Martins*(PQ)**Lopes@unb.br**¹Laboratório de Química Computacional, Instituto de Química, UnBPalavras Chave: óxidos, catálise, *ab initio*, ONIOM, ondas planas.

Highlights

Modeling the adsorption of syngas molecules; Modeling the adsorption of alcohol on zeolites; ONIOM cluster model; plane wave periodic calculation; Adsorption energies including thermal correction.

Resumo/Abstract

There is a considerable interest in understanding the interaction of molecules on metal oxide surfaces, as adsorption on metal oxides is central in many technological areas, such as gas sensors and heterogeneous catalysis. One of mostly studied oxides, the semiconductor ZnO has a relatively large direct band gap of almost 3.3 eV. Zinc oxide is a major component of based catalysts which are highly effective for the methanol synthesis from CO/H₂ and CO₂/H₂ mixtures. There are three main surfaces in ZnO wurtzite structure: The ideal polar surface (0001) that expose zinc atoms positioned out with three coordination number; the polar surface ended in oxygen, and the prismatic plane where the zinc atoms and oxygen are in the same plane. As an example, (0001) and ZnO surfaces show a significant difference in reactivity for the dissociative adsorption of methanol. Besides the oxides, zeolites configure a versatile system for catalyzes. Furthermore, industrial chemical processes are catalyzed by zeolites, and they include some process, e.g., the conversion of methanol into gasoline (MTG), isomerization, alkylation, and dehydration of alcohols. H-ZSM-5 has been widely used for catalysis, for example, ethylene can be acquired by catalytic conversion of ethanol, a renewable source, into H-ZSM-5 zeolite surfaces. Another important conversion, is the dehydration of alcohols by acid catalysts. The methanol dehydration over H-ZSM-5 produces high octane gasoline, light olefins and dimethyl ether (DME) as a chemical intermediate widely used in the production of biodiesel, aerosol propellant gas and other compounds. Ethanol, 1-propanol and 1-butanol are also dehydrated on zeolites for the production of ethylene, propylene and butane. From the theoretical point of view, the dehydration of methanol, ethanol, propanol and 1-butanol on zeolite H-ZSM-5 was modeled.

The activation of carbon dioxide is environmentally important, and is also a molecule used for testing the basicity of metal oxides surfaces. In this study we have used a cluster model and periodic approaches to treat the ZnO surfaces and adsorbed molecules. The cluster approach was carried out with ONIOM hybrid method. The periodic model was performed using LCAO and plane wave.

The adsorbed molecules studied were H₂, CO, CO₂, H₂O, and CH₄. A large number of ZnO and MgO units where used with variable number of layers, specifically four, six and eight layers for the wurtzite structure. Cluster model using ONIOM was applied for the H-ZSM5 modeling of alcohol dehydration. The main purpose of this study is to investigate structural and electronic properties of these molecules on oxides and zeolites, and compare the different theoretical models employed. The theoretical simulation was performed using Density Functional Theory (DFT) implemented in the VASP for the plane wave and Crystal06 for the LCAO, while for the ONIOM method the Gaussian09 package was used with three layers. Interaction energies, orbital stabilization and geometries are comparable to the available experimental data.

Agradecimentos/Acknowledgments

Support: CAPES, FAPDF, UnB e CNPq

Oxidative stability and cold filter plugging point of biodiesel blends derived from fats and soy oil.

Samuel J. Santos (IC), João V. Braun (IC), Guilherme C. Espíndola (IC), Gabriel F. de Mattos (IC), Diego P. Ongaratto (IC), Luiz Antonio Mazzini Fontoura (PQ)

Universidade Luterana do Brasil, ULBRA – Centro de Pesquisa em Produto e Desenvolvimento, CEPPEP.

Key words: Biodiesel, oxidative stability, cold filter plugging point

Highlights

Biodiesel blends derived from fats and soy oil have oxidative stability and cold properties optimized.

Abstract

Biodiesel has been used as total or partial substituted to fossil diesel in compression-ignition engine. As a fuel, it has the advantages of higher cetane number, lubricity and flash point. It is free from sulfur compounds, and contributes to the reduction of hydrocarbons, and particulate materials emission. By the other hand, it has higher hygroscopicity and cold filter plugging point, and lower oxidative stability. Especially those two last characteristics are extremely dependent on the feedstock biodiesel is made from. Biodiesels made from oils are predominantly polyunsaturated, and, consequently, have good cold properties, but high tendency to oxidize. Biodiesels made from fats, by the other hand, are mainly saturated. Although they are highly stable, they easily crystalize at low temperatures.¹ Blends from both, that is, fats and oils biodiesel, can exhibit optimized properties. In this work, oxidative stability (Rancimat model 873 Metrohm, EN 14112), and cold filter plugging point (FFP 5GSA ILA by PAC, EN 116) of blends from palm, palm kernel, babassu, tallow or lard biodiesels with soy one were measured. No antioxidant was added. Results are shown in the Fig. 1. In Brazil, induction period must be 8 h or higher (green dashed line). It is observed from 60 % of fat biodiesel in the blend, except palm. CFPP higher limit depends on the period of the year and the region. In the summer time, it cannot be higher than 14 °C (blue dashed line). Except palm, all the blends shown CFPP below the limit. In the winter, the limits are 10, 8, or 5 °C (green, orange and red lines, respectively). Palm kernell biodiesel can be added to soy in any content. Tallow, lard, and babassu can be added from 40 to 80 % depending on the region.

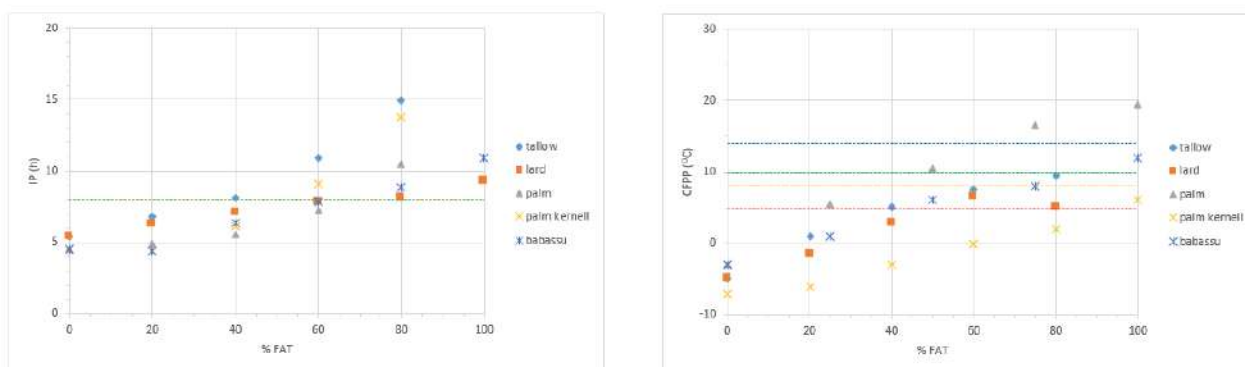


Figure 1 – Induction period (IP), left, and cold filter plugging point (CFPP), right, of biodiesels blends from fats and soy oil.

¹Knothe, G.; Razon, L. F.; Progress in Energy and Combustion Science **2017**, 58, 36.

Synthesis of Hybrid Xanthene-Dihydropyridines *via* Huisgen Reaction under Cu (I) catalysis.

Samuel J. Santos (PG),^{*1} Vanessa P. de Souza (PG),¹ Luiz Antonio M. Fontoura (PQ),² Dennis Russowsky (PQ).¹

samuel.j.santos@hotmail.com

¹Instituto de Química, Departamento de Química Orgânica, UFRGS.

²Centro de Pesquisa em Produto e Desenvolvimento (CEPPED), ULBRA.

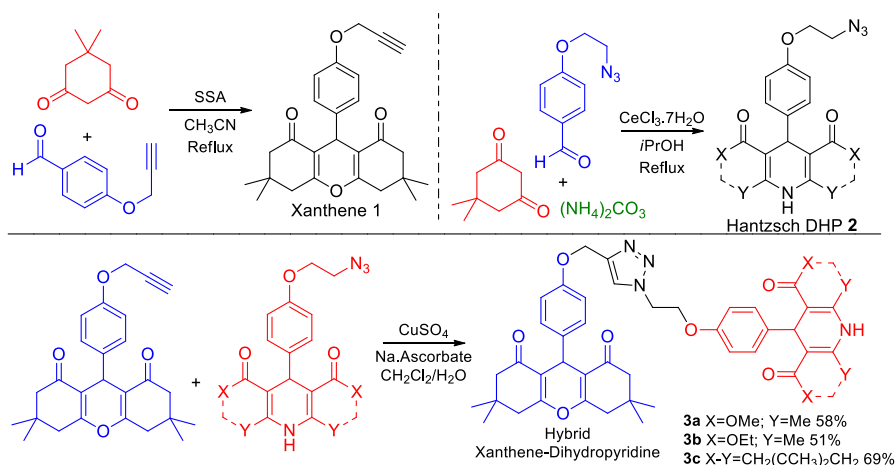
Key words: xanthenes, dihydropyridines, hybrid compounds, multifunctional drugs, Huisgen Reaction.

Highlights

Based on their individual biological activities, xanthene-dihydropyridine hybrid compounds were designed and synthesized via copper (I) catalyzed Huisgen cycloaddition reaction as potential multifunctional drugs

Abstract

The inefficiency of conventional drugs accessing distinct targets in organism has encouraged the development of new multifunctional compounds, since such structures may reduce undesired side effects of common drug cocktails prescribed nowadays. Multifunctional hybrid compounds are those structurally based on two or more pharmacophores, linked by a stable or metabolizable bridge. Xanthenes and dihydropyridines are heterocycles structurally analogous but with remarkable distinct properties. The former are bactericides, antivirals, and anti-inflammatories.¹ The latter, are antihypertensive, anticoagulant, antioxidant, and anticancer.² Additionally, some of those compounds are fluorescent, that allows to observe its trajectory in biological environment. Xanthene **1** and dihydropyridines **2a-c** were synthesized in one step by multicomponent reactions. Hybrids **3a-c** were obtained *via* regioselective Huisgen Reaction in the presence of Cu (I) catalyst (50-70 % yield), Scheme 1. Structures were confirmed by ¹H and ¹³C-NMR.



References:

1. Das, S. K.; Singh, R.; Panda, G. *Eur. J. Org. Chem.* **2009**, 28, 4757.
2. Khedkar, S. A., Auti, P. B. *Mini Rev. Med. Chem.* **2014**, 14, 282.

Acknowledgments



Estudo por DFT e DFT-DT de estruturas com efeito push-pull e propriedades espectrais para aplicações fotovoltaicas.

Marcos Eduardo G. do Carmo (IC),¹ Lincoln Lucilio Romualdo (PQ).^{1*}

marcos.go.carmo@gmail.com; lincoln.romualdo@gmail.com

¹Unidade Acadêmica Especial de Química, UFG-Regional Catalão.

Palavras Chave: DFT, DFT-DT, Porfirina, DSSC, Hiperpolarizabilidade.

Highlights

Study by DFT and DFT-DT of structures with push-pull effect and spectral properties for photovoltaic applications.

Studies on DFT and DFT-DT aiming the application of modified porphyrins with promising values of hyperpolarizability in solar cells of TiO₂ sensitized by Dyes.

Resumo/Abstract

O trabalho visa a proposta de um sensibilizador para as Células Solares de TiO₂ Sensibilizadas por Corantes (DSSC) partindo da modificação teórica do anel porfirínico (Fig.1) (estrutura rica em densidade eletrônica) acrescentando substituintes (Fig.2) que proporcionem efeito push-pull (R- π -D) com intuito principal de diminuir o gap entre orbitais HOMO e LUMO, aproximando-os da fronteira da banda de condução (BC) do TiO₂ (GUNTER, P., 1999).

A Teoria da Densidade Funcional (DFT) e a DFT Dependente do Tempo (DFT-DT) foram empregadas com híbrido funcional B3LYP e base 6-311+G(d,p), pelo software Guassian 09W, para otimização estrutural e avaliação de propriedades eletrônicas antes da interação com o TiO₂. Os resultados foram comparados com os do corante CS1A (fig.3), estudado por Mahmood. A., 2014.

Grupos carboxílicos capazes de se ligarem a superfície do TiO₂ pela formação de quelatos (CAIXETA, B. P., 2018), em conjunto com o grupo doador favoreceram com a redução do gap entre HOMO e LUMO e aumento da absorvidade molar da estrutura, potencializando sua aplicação nas DSSC's.

Na tabela 1 são apresentados valores para a proposta estrutural estudada (PorM), porfirina simples (Por) e estrutura da referência (CS1A). A estrutura eletrônica de PorM, não planar com momento dipolo diferente de zero, possui valores das energias do LUMO e HOMO próximos à fronteira da (BC) do TiO₂ e potencial de oxidação/redução de I/I₃ demonstrados por Gratzel, M., 2001, evidenciando menor gap comparado a referência, juntamente com absorção no visível e hiperpolarizabilidade (β) promissor.

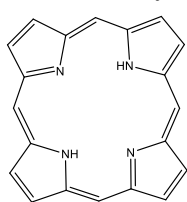


Fig.1. Porfirina simples.

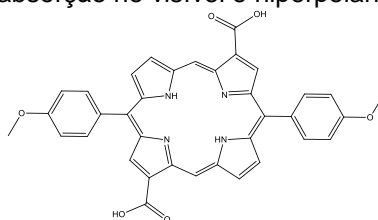


Fig.2. Porfirina modificada.

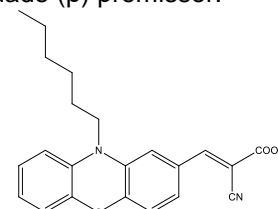


Fig.3. CS1A.

Tabela 1. Valores teóricos das estruturas estudadas e da referência em meio de THF.

| Estruturas | λ (nm) | | | Homo (eV) | Lumo (eV) | Gap (eV) | β |
|------------|----------------|-----|-----|-----------|-----------|----------|------------------------|
| CS1A | 626 | 370 | 341 | -7,08 | -1,88 | 5,20 | $3,58 \times 10^{-29}$ |
| Por | - | - | - | -6,53 | -1,76 | 4,77 | $4,50 \times 10^{-30}$ |
| PorM | 623 | 547 | 408 | -6,63 | -2,56 | 4,08 | $3,80 \times 10^{-28}$ |

1-GUNTER, P., Nonlinear Optical Effects and Materials, Editorial Board, 1999.

2- Mahmood. A., *Arabian Journal of Chemistry*, v. 1, p. 2-4, 2014.

3-CAIXETA, B. P., UFU, Tese (Doutorado), 2018.

4- Gratzel, M., *Nature*, v. 414, p. 339, 2001.

Agradecimentos/Acknowledgments

Agradecimentos ao Prof. Dr. Antônio E. da H. Machado pela disponibilização do Software Gaussian 09W.

Área: ORG

Inscrição: 00212

Synthesis of dipyrromethanes in water and their application in the synthesis of dipyrins and their cobalt(III), nickel(II) complexes.

Paula Romanhi¹ (IC), Tamiris de Almeida¹ (IC), Gustavo S. Proença¹ (IC), Cindy J. de Oliveira¹ (IC), Luana A. Machado² (PG), Leandro F. Pedrosa^{1,2*} (PQ).

paularomanhi@id.uff.br; leandropedrosa@id.uff.br

¹ Institute of Exact Sciences, Department of Chemistry, UFF, CEP 27213-145, Volta Redonda, RJ, Brazil.

² Institute of Chemistry, Department of Organic Chemistry, UFF, CEP 24020-141, Niterói, RJ, Brazil.

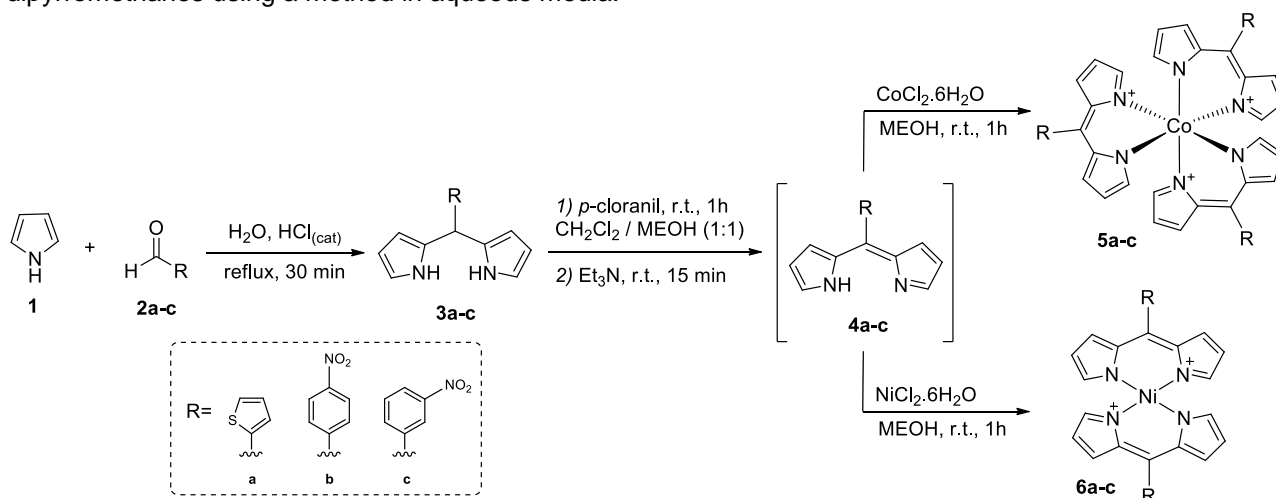
Keywords: Dipyrins, Dipyrromethane, Metal complex.

Highlights

Efficient synthesis of dipyrromethanes in aqueous medium acid-catalyzed (HCl) at reflux. A one-pot synthesis of dipyrins and their cobalt(III), nickel(II) complexes was also achieved.

Resumo/Abstract

In recent years, research on the chemistry of dipyrins has increased due to their optical properties, its stability and thus its use as a binder to form larger compounds. The ability to manipulate synthetically dipyrins, which are usually crystal molecules with intense molar absorptivity in the visible region, is growing increasingly. The bis-pyrrole skeleton dipyrins can be easily functionalized in the pyrrole ring, as well as in the 5-position. Innovative research means of dipyrins have been directed to form neutral complexes with different metal ions.¹ Generally, dipyrromethanes are synthesized by the condensation of aldehydes with pyrroles. Process reactions that take place in water represent an interesting approach for the green chemistry group. With these concerns and those for the environment, our challenge was to synthesize dipyrromethanes using a method in aqueous media.^{2,3}



Scheme 1. Synthesis of dipyrromethanes, dipyrins and their cobalt(III), nickel(II) complexes.

In this context, 9 substances were synthesized in total, being 3 dipyrromethane derivatives (**3a-c**) and 6 dipyrins complexes of cobalt (**5a-c**) and nickel (**6a-c**). The dipyrromethane derivatives (**3a-c**) were obtained by two methodologies, the first one being carried out with excess pyrrole and TFA as catalyst and the second in water as solvent and HCl as catalyst that presented better results besides being an environmentally correct process and without the necessity of purification by column chromatography.⁴ Dipyrins and their metal complexes were obtained in a one-pot synthesis strategy without prior isolation of the dipyrins intermediates (**Scheme 1**). A monocrystal of the tris-dipyrrolate cobalt compound (**5a**) confirmed the success of the methodology used to obtain the complexes.

REFERENCES

¹ Wood, T. E.; Thompson, A. *Chem. Rev.* **2007**, 107, 1831.

² T. Rohand; et al. *ARKIVOC* **2007**, (x), 307.

³ Zoli, L.; Cozzi, P. G. *ChemSusChem* **2009**, 2, 218.

⁴ Sobral, A.; et al. *Tetrahedron Lett.* **2003**, 44, 3971.

Área: ORG

(Inserir a sigla da seção científica para qual o resumo será submetido. Ex: ORG, BEA, CAT)

Nº de Inscrição: 00214

(Inserir o número de inscrição do autor que fez a submissão)

Aplicação de Nova Metodologia Sintética para a Guanilação de Tioureias

Graziela Pereira dos Santos (IC),^{1*} Maisa Borges Costa (PQ)¹; Elisa Guimarães Barbosa Carvalho (PG),¹

*grazielawand@gmail.com; maisabc@gmail.com

¹ Laboratório de Síntese, Isolamento e Modificações de Compostos Orgânicos (LabSIMCO) – Campus de Ciências Exatas e Tecnológicas Henrique Santillo – Universidade Estadual de Goiás (UEG-CCET); Caixa Postal 459, Cep. 75132-400 – Anápolis-Go – Brasil

Palavras Chave: Guanilação, Tioureias, Agentes Tiofílicos.

Highlights

Application of New Synthetic Methodology for Thioureas Guanilation

This work aimed at the synthetic study of functionalized guanidines, although it is well described in the literature, with a glimpse of thiourea guanylation reactions as use of molecular iodine with thiophylic agent due to its low toxicity.

Resumo

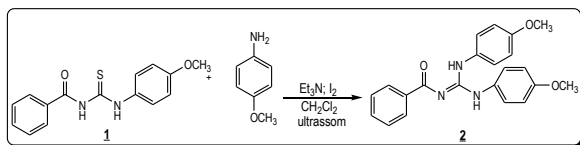
Com o crescimento abrangente de novos fármacos, os compostos nitrogenados com grupos funcionais guanidínicos, destacam-se como alvo sintético devido ao seu amplo espectro de atividades biológicas e farmacológicas.

Em nosso grupo de pesquisa (LaBSIMCO), a aplicação de tioureias **1** para à síntese de guanidinas **2** e seus derivados sintéticos, é um dos alvos que norteiam nossas pesquisas científicas.

Neste contexto, a síntese de guanidinas funcionalizadas, apesar de bastante descrita na literatura,¹⁻³ objetivou este trabalho, com vislumbre para reações de guanilação de tioureias **1**, a partir de metodologias sintéticas “mais limpas”. Principalmente, por não empregar agentes tiofílicos, sendo estes em sua grande maioria metais com alto grau de toxicidade.¹⁻³

Nesta nova proposta de metodologia empregou-se o iodo molecular com agente tiofílico por apresentar baixa toxicidade (Esquema 1).

Esquema 1 - Metodologia para Síntese de guanidina com o emprego do iodo como agente tiofílico



As reações foram promovidas sob banho ultrassônico e acompanhadas por CCD, e mesmo após 24 horas de reação, como descrito na literatura¹ era nítida a presença de matéria-prima.

Neste primeiro estudo, a reação desenvolvida com o iodo molecular, como agente de dessulfurização, apresentou um rendimento de 20,88%. Rendimento este, bem inferior ao comparado com a literatura (53%).² A análise estrutural por RMN ¹H e de ¹³C unidimensional, evidenciou uma região aromática complexa, o que infere em uma mistura de reagentes e produtos. Esta observação é notória tanto para o RMN de ¹H (δ 7.9-6.8 ppm) quanto para o RMN de ¹³C (δ 144-104 ppm). Entretanto, o RMN de ¹³C confirma a formação do produto guanilado com a presença do carbono quaternário em δ 165.01 ppm que é característico do carbono do núcleo guanidínico. Novos estudos estão em andamento com o intuito de melhorar o rendimento desta reação.

Agradecimentos

Agradecemos ao CNPQ pela bolsa de iniciação científica concedida, a Universidade Estadual de Goiás por todo o suporte fornecido e ao grupo de pesquisa LabSIMCO.

Referências

- 1 LEVALLET, C.; LERPINIÈRE, J.; KO, S. Y. **The HgCl₂ - promoted guanylation reaction: The scope and limitations.** Tetrahedron, v. 53, n. 14, p. 5291-5304, 1997.
- 2 CUNHA, S. D.; COSTA, M. B.; NAPOLITANO, H. B.; LARIUCCI, C.; VENCATO, I., Tetrahedron, V. 57, p. 1671-1675, 2001.
- 3 FEDOSEEV, P.; SHARMA, N.; KHUNT, R.; ERMOLATEV, D. S.; EYCKEN, E. V. V. **Iodine-mediated regioselective guanylation amination of propargylamines towards the synthesis of diversely substituted 2-aminoimidazoles.** RSC Adv., 2016, 6, 75202–75206, 2016.

Área: FIS

Nº de Inscrição: 00216

Aqueous two-phase systems formed by tween surfactant and cholinium-based ionic liquids at different temperatures

Beatriz de Paula Valverde (IC), Sílvia Juliana Barros e Silva (PG), Tomás Antônio Coelho Celestino (IC), Aparecida Barbosa Mageste (PQ), and Gabriel Max Dias Ferreira (PQ).*

beatrizvalverde2@gmail.com; *gabriel.ferreira@ufop.edu.br

Laboratório de Físico-Química e Química Ambiental, Departamento de Química, ICEB, UFOP, Minas Gerais, Brazil

Keywords: Aqueous two-phase system; non-ionic surfactants, Tween 20, Tween 80, Choline chloride, Choline bitartrate.

Highlights

- ATPSs formed by tween surfactant and choline chloride or choline bitartrate were studied;
- Binodal region increased with the temperature and surfactant hydrophobicity;
- Bitartrate anion had greater salting out effect than the chloride anion.

Abstract

Aqueous two-phase systems (ATPSs) have been widely used for extraction of several analytes such as dyes, metal ions, and biomolecules. Currently, the use of non-ionic surfactants and ionic liquids for formation of ATPSs have had great visibility. The use of these surfactants combined with the ionic liquids of the choline family, for example, leads to the formation of sustainable ATPSs, since they have high biodegradability and are non-toxic. In this work, binodal curves were obtained for ATPSs formed by non-ionic surfactant (tween 20 or tween 80) + choline electrolyte (chloride or bitartrate) + water at 298.15 and 313.15 K. The binodal curves were obtained by turbidimetric titration method (Figures 1 and 2). For all studied ATPSs, the temperature increase promoted an increase of the biphasic region, indicating an endothermic phase separation process. This behavior was attributed to the weakening of the hydrogen bonds formed among the water molecules and the hydrophilic part of the surfactant, which favored the salting out effect provided by the ionic liquids. The change of the components forming the system also affected the salting out effect provided by the ionic liquids and, consequently, changed the immiscibility region: (i) the change of electrolyte, from choline chloride to choline bitartrate (Figure 1) promoted an increase of the biphasic region, allowing the formation of ATPSs in lower concentrations of the components. This result indicated a greater salting out potential of bitartrate in relation to chloride. ii) the change of surfactant, from tween 20 to tween 80, caused an increase of the biphasic region, regardless of the temperature. This behavior was attributed to the higher hydrophobicity of tween 80, contributing with the salting out effect provided by the ionic liquids. These systems are yet under investigation in our laboratory, and equilibrium data are being obtained. These new ATPSs are strategic for the extraction of several compounds due to their environmentally friendly features.

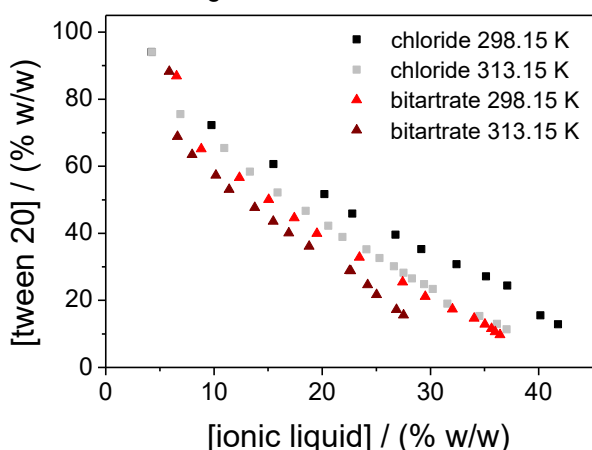


Figure 1. Binodal curves for TW20 + ionic liquids + H₂O ATPSs at different temperatures.

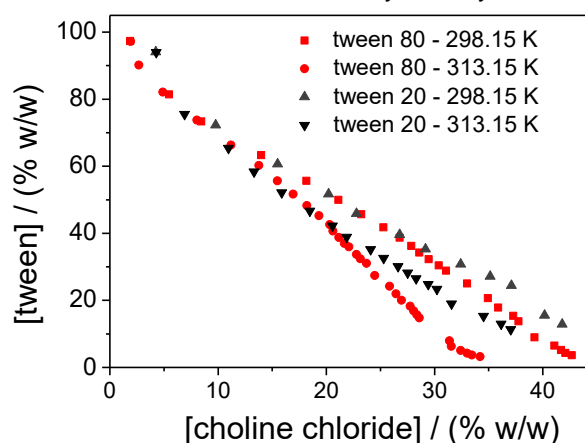


Figure 2. Binodal curves for TW (20 or 80) + choline chloride + H₂O ATPS at different temperatures.

Acknowledgments

PROGRAD, UFOP, DEQUI, CAPES, FAPEMIG, CNPq

Biocatalytic asymmetric reduction of difficult-to-reduce ketones by carrots

Naira V. Machado (PG)*,¹ Álvaro T. Omori (PQ)².

naira.machado@ufabc.edu.br

¹Centro de Ciências Naturais e Humanas, UFABC

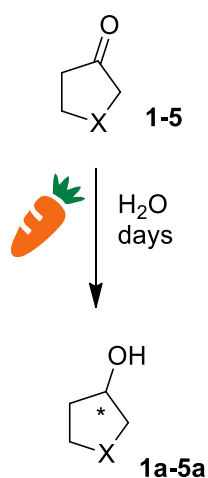
Palavras Chave: Biocatálise, Biorredução, Cenoura.

Highlights

Ketones with low difference between α - and α' -moieties flanking the carbonyl function are difficult to reduce asymmetrically. Excellent enantioselectivities and fair conversion rates were obtained using carrots.

Abstract

The ketones 1-Z-3-pyrrolidinone (**1**), 2-methyltetrahydrofuran-3-one (**2**) e 4,5-dihydro-3(2H)-thiophenone (**3**), N-Boc-3-pyrrolidinone (**4**) and 1-Benzyl-3-pyrrolidinone (**5**) are example of "difficult-to-reduce" asymmetrically ketones.¹ When α' and α'' groups next to the carbonyl groups present low structural/electronic difference, the asymmetric reduction can be difficult. Therefore, we investigated the possibility of such compounds could be reduced biocatalytically employing carrots.² The reactions were conducted in water and the results are summarized in table 1.



| Substrate | Time (days) | Conversion to Alcohol (%) | Enantiomeric excess (ee) ⁱⁱ |
|-----------|-------------|---------------------------|--|
| | 2 | 83 ⁱ | - |
| | 3 | 98 ⁱ | - |
| | 2 | 19 ⁱⁱ | >99% (95% dr) |
| | 3 | 18 ⁱⁱ | >99% (85% dr) |
| | 2 | 98 ⁱ | - |
| | 3 | >99 ⁱ | - |
| | 2 | 99 ⁱ | >99% |
| | 3 | >99 ⁱ | >99% |
| | 2 | 0 ⁱ | - |
| | 3 | 0 ⁱ | - |

i. Obtained by GC-MS. *ii.* Obtained by chiral GC (β -cyclodextrin)

According to the table, the Benzyl protecting group has strong negative influence on the reaction. Next steps include the assignment of the absolute configuration and chiral separation by HPLC of alcohols derived from (**1**) and (**3**) (β -cyclodextrin did not separate the alcohols **1a** and **3a**).

1.Sun, Z.; Lonsdale, R.; Ilie, A.; Li, G.; Zhou, J.;Reetz, M.T. *ACS Catal.* **2016**, 6, 1598

2.Lacheretz, R.; Pardo, D. G.; Cossy, J. *Org. Lett.*, 2009, 11, 1245

Acknowledgments

Agradecimentos à FAPESP, CAPES, CEM-UFABC e UFABC pelo auxílio ao projeto.

Área: **COL**Nº de Inscrição: **00220**

Formulation and characterization of oil-in-water emulsions containing Selol stabilized by folic acid-modified Pluronic F-127 copolymer

Sarah F.A. Ferreira (IC),^{1*} Emília C. D. Lima (PQ)¹

saraharaujofer@gmail.com*

¹ Instituto de Química, Universidade Federal de Goiás, UFG.

Palavras Chave: Emulsões, Ácido fólico, Espalhamento de luz dinâmico.

Highlights

Oil-in-water emulsion based on Selol stabilized by folic acid-modified Pluronic F-127 presenting drops in nanometer size range and high colloidal stability.

Resumo

O Selol é um composto oleoso, formado por uma mistura de triglicerídeos que contém selênio em sua estrutura e possui diversas atividades, entre elas a atividade antitumoral.[1] Uma das maneiras de se aumentar a eficácia e diminuir os efeitos colaterais do tratamento do câncer, é o direcionamento do princípio ativo, majoritariamente, para as células tumorais, por meio da associação de moléculas direcionadoras aos sistemas de liberação.[2,3] Nesta perspectiva, o desenvolvimento de emulsões contendo Selol, estabilizada por Pluronic F-127 (PF127) modificado com ácido fólico (AF), é uma estratégia interessante para a entrega de Selol, já que vários tipos de tumores humanos possuem receptores de folato superexpressados. Foram preparadas emulsões contendo 5 mg/mL de Selol estabilizadas: pelo copolímero puro PF127, denominada de emulsão A; pelo copolímero modificado AF-PF127, denominada de emulsão B; e com uma mistura de 3:1(m/m) de PF127 e AF-PF127, denominada de emulsão C. As formulações foram caracterizadas quanto ao diâmetro hidrodinâmico por intensidade (DH_i) e numérico (DH_N), por meio da técnica de espalhamento de luz dinâmico. As três amostras apresentam um aspecto líquido translúcido, demonstrando a alta estabilidade coloidal das emulsões. Os diâmetros hidrodinâmicos médios das gotículas estão apresentados na tabela 1. A figura 1 mostra que as emulsões apresentam distribuições de tamanhos de gotículas polimodal, sendo as emulsões A e C com distribuições semelhantes, consistindo de duas populações equivalentes em quantidade com diâmetros de 89 nm e 497 nm, aproximadamente. A amostra B, preparada somente com o copolímero modificado apresenta a maior população de gotas (88,1 %) com diâmetro de 337,9 nm. As três amostras apresentaram DH_N muito próximos, na faixa de 40-50 nm. Conclui-se que o copolímero modificado com ácido fólico se presta a estabilização de emulsões a base de Selol, que apresentam características semelhantes às das emulsões obtidas com o copolímero puro, tais como o teor de Selol veiculado, os diâmetros hidrodinâmicos e a estabilidade coloidal.

Tabela 1 – Diâmetros hidrodinâmicos numérico e por intensidade

| Emulsão | Diâmetro hidrodinâmico (nm) | |
|---------|-----------------------------|-------------|
| | Numérico | Intensidade |
| (A) | 43,64 | 150,1 |
| (B) | 49,67 | 218,6 |
| (C) | 47,99 | 144,9 |

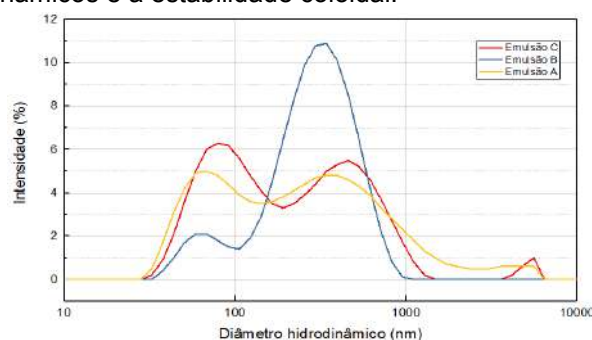


Figura 1 - Gráfico da distribuição dos diâmetros hidrodinâmicos, ponderados por intensidade de luz espalhada, das emulsões

[1] Suchocki, Piotr. et al. *Pharmacological Reports*, **2010**, 62, 352-361.

[2] Basak, Rajib . Bandyopadhyay, Ranjini. *Langmuir*, **2013**, 29, 4350-4356.

[3] Gong, Changyang. et al. *Biomaterials*, **2013**, 34, 1413-1432.

Agradecimentos

À Capes, CNPq, PIBIC-UFG e ao Dr. Suchoki por ceder a amostra de Selol.

Área: ORG

(Inserir a sigla da seção científica para qual o resumo será submetido. Ex: ORG, BEA, CAT)

Nº de Inscrição: 221

(Inserir o número de inscrição do autor que fez a submissão)

Synthesis of bioactive 6*H*-benzo[*c*]chromenes triazoles

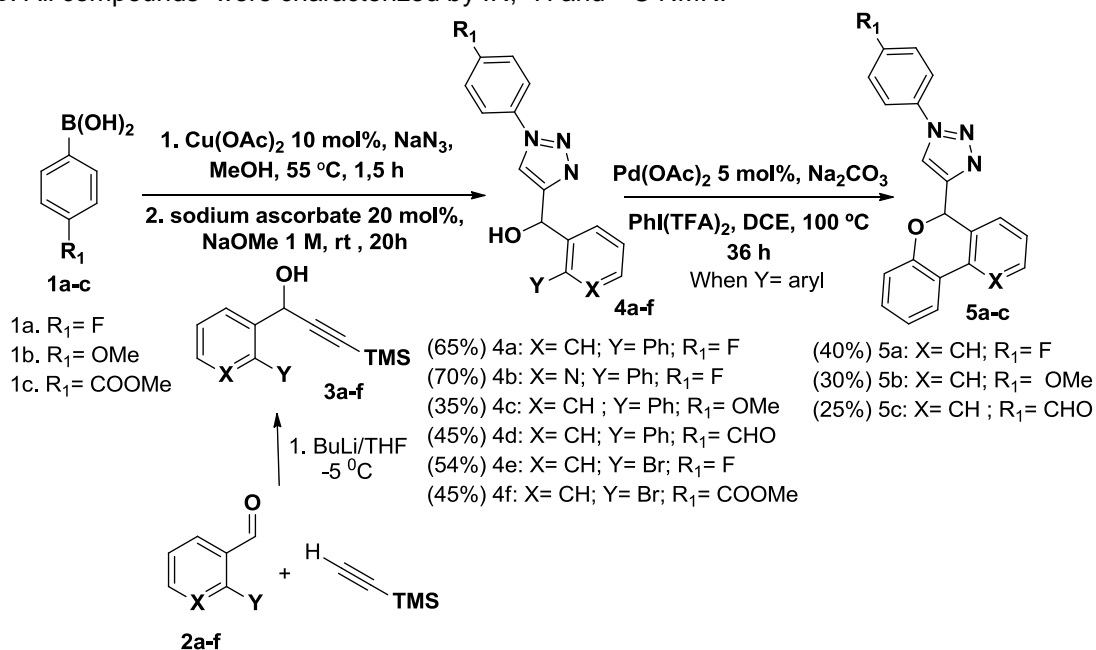
Verônica Diniz da Silva (PG),¹ Camilla D. Buarque (PQ).¹camilla-buarque@puc-rio.br; veronika.diniz@hotmail.com ¹Departamento de Química, Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro (PUC-Rio)Palavras Chave:(1,2,3-triazole, 2*H*-benzo[*c*]chromene, click chemistry, C-H activation).

Highlights

- 6*H*-benzo[*c*]chromenes triazoles hybrids were planned to improve pharmacological activities of some disorders by synergic effect of two pharmacophoric groups
- The key synthetic strategies are the click chemistry reaction and C-H activation (C-O bound)
- All compounds are being evaluated for schizophrenia, cancer and Alzheimer

Resumo/Abstract

Molecular hybridization is a powerful tool for the synthesis of new drugs. The presence of two or more pharmacophoric groups in a single molecule potentiates its therapeutic action [1]. 1,2,3-triazoles and benzochromenes are important pharmacophores that have been outstanding due to their therapeutic properties, such as: antivirals, anti-carcinogens, antimicrobials, anticonvulsants among others [1,2]. In this way, the present work aims at the planning and synthesis of biologically 6*H*-benzochromenes-triazoles hybrids. The key step for obtaining these benzochromene-triazoles **5a-c** from α -hydroxy-1,2,3-triazoles **4a-c** is the C-H activation catalyzed by Pd(OAc)₂ in the presence of PhI(TFA)₂ as oxidizing agent. The α -hydroxy-1,2,3-triazoles **4a-f** were obtained in *one pot* reaction through the treatment of aryl boronic acids **1a-c** with sodium azide (NaN₃) catalyzed by Cu(OAc)₂ followed by click chemistry reaction with propargyl alcohols **3a-f**. After deprotection of the trimethylsilane (TMS) group, the intermediates **4a-f** were obtained in yields ranging from 35% to 70%. 6*H*-benzo[*c*]chromene-triazoles were obtained in moderate yields (25-40%) at the last step. All compounds were characterized by IR, ¹H and ¹³C NMR.

[1] Kaoukabi et al. European Journal of Medicinal Chemistry **155**; 772-781, 2018.[2] Pratap, R. & Ram, V. J. Chem. Rev. **114**, 10476–10526, 2014.

Área: EDU

Nº de Inscrição: 00222

A Química das tendências infantis: a criança como protagonista na produção de *slime*

Jorge C. Messeder (PQ),^{1*} Hugo N. S. Barros (IC),¹ Ana C. O. Cardoso (IC),¹ Denise A. A. S. Oliveira (FM).²

jorge.messeder@ifrj.edu.br

¹ Curso de Licenciatura em Química IFRJ-Nilópolis; ²SME, Duque de Caxias/RJ.

Palavras Chave: Ensino de Química, Ensino Fundamental, Slime.

Highlights

Chemistry of infant trends: the child as protagonist in the production of slime. An analysis of chemical risks through the production of slimes. The child as protagonist in the construction of his knowledge. Promote critical development in the children of a municipal school.

Resumo

O presente trabalho é uma síntese dos resultados de um projeto maior, do Programa Institucional de Bolsas de Iniciação Científica (PIBIC), que buscou promover nos alunos da rede básica de educação um olhar crítico, por meio da Química, sobre a produção caseira de *slime* (atual “febre” entre as crianças). No decorrer das intervenções, preconizou-se estabelecer condições para que os alunos identificassem situações de riscos, por meio das análises de vídeos para a produção dessa substância disponíveis na internet. Proporcionou-se um ambiente em que as crianças relataram as experiências passadas ao tentarem produzi-las, além de uma oficina para a confecção das *slimes*.

Resultados e Discussão

As atividades ocorreram em dois momentos: no primeiro, buscou-se uma análise e discussão sobre os métodos de produção da *slime*, a partir da exibição de dois vídeos no quais os apresentadores mirins ignoravam ou desconheciam os riscos químicos ao manusear de forma imprudente alguns dos reagentes; as falas das crianças, obtidas em rodas de conversas, foram analisadas de acordo com os trabalhos já desenvolvidos por Oliveira e Messeder (2017)¹; no segundo momento, montou-se uma oficina para a produção de *slime* no laboratório de ciências da escola, com atenção aos procedimentos rotineiros de pesagens e dosagens, com ênfases às normas de segurança, e à introdução ao uso de equipamentos semianalíticos

(Figura 1). De acordo com Azevedo (2004)² essa atividade se faz muito importante, pois através das investigações científicas os alunos aprendem ciência e expandem melhor seus conceitos proporcionando uma experiência investigativa, de forma cautelosa e dinâmica, considerando o trabalho em equipe. Os resultados demonstraram que através desses tipos de atividades é possível promover a formação do pensamento crítico da criança de modo a torná-los protagonistas na construção do seu conhecimento.



Figura 1 - Aluno utilizando a balança semianalítica.

Conclusão

A intervenção pedagógica realizada corroborou que as buscas científicas permitem que os alunos aprendam ciências e expandam melhor seus conceitos, em experiências investigativas, de forma cautelosa e dinâmica, considerando o trabalho em equipe e as peculiaridades de cada dupla. Os alunos puderam investigar discutir e se posicionar de forma crítica em relação aos procedimentos executados, diante às situações vistas e relatadas na sala de aula, assim como a necessidade de se conhecer “segurança química” no cotidiano doméstico.

Agradecimentos/Acknowledgments



1 OLIVEIRA, D. A. A. S., MESSEDER, J. C. Da narrativa literária à produção textual coletiva: remontando temas químicos no Ensino Fundamental. *Revista Thema*, 14(2), 2017.

2 AZEVEDO, M. C. P. S. **Ensino por investigação: problematizado as atividades em sala de aula.** In: CARVALHO, A. M. P. (Org.). *Ensino de Ciências: unindo a pesquisa e a prática.* São Paulo: Pioneira Thomson Learning, p. 19-33, 2004.

Área: TEC

(Inserir a sigla da seção científica para qual o resumo será submetido. Ex: ORG, BEA, CAT)

Nº de Inscrição: 00226

(Inserir o número de inscrição do autor que fez a submissão)

Effect of CaCO₃/MgO nanoparticle and PHB solutions nebulization cycle, and PHB concentration on nitrogen release profile from coated urea.

André Romero da Silva (PQ),^{1*} João Filipi Lombardi Bosi (IC).²

aromero@ifes.edu.br

¹Coordination of the Industrial Chemistry Course, IFES; ²Coordination of Degree in Chemistry, IFES

Palavras Chave: Urea granules, Coated fertilizer, PHB, Release profile, Nitrogen.

Highlights

The effect of three parameters used in the preparation of coated urea on the nitrogen release profile was investigated by a factorial design. The binary combinatory effect of parameters was responsible to decrease the nitrogen release after 30 days of irrigation and increase the release after 60 days. The coating thickness was important to decrease the nitrogen release that was characterized by an anomalous fertilizer transport.

Resumo/Abstract

Growing demand for food and the soil impoverishment are increasing the use of agricultural fertilizers¹. However, any fertilizer can become a source of soil, water and air pollution if it is not correctly used². The fertilizer-controlled release has been showing an alternative to solve this problem³. Thus, we decided to evaluate the influence of the nebulization cycle of CaCO₃/MgO nanoparticle (from 3 to 5 cycles, Factor A) and the polyhydroxybutyrate (PHB) solution, a biodegradable polymer (from 3 to 5 cycles, Factor B), and the PHB concentration (from 2.5% to 5% m/v, Factor C) on the nitrogen release profile from coated urea granule using a factorial design 2³. The released nitrogen percentage was obtained using the official analytical methods for fertilizer and agricultural correctives from Ministry of Agriculture. The samples released nitrogen from 39.0 ± 0.8% (Exp 3) to 61.2 ± 0.4% (Exp 4). The coating thickness of Exp 3 was the major (0.160 mm) than that other experiments, causing the nitrogen smaller release. The release efficiency also changed from 65.4 ± 0.4% (Exp 3) to 93.3 ± 0.1% (Exp 2). The binary effect between factors A and C was the most significant in decreasing nitrogen release of 11.3% after 30 days of irrigation, while the binary effect between factors A and B was the most significant to release the nitrogen after 60 days of irrigation. The Peppas's mathematical model disclosed that the nitrogen release represents an anomalous fertilizer transport, characterized by a Fickian and relation mechanism together with a diffusion exponent of 0.2444, a correlation coefficient of 0.9585 and release rate coefficient of 20.92 (Figure 1). We thank CNPq and IFES for financial support. *Reference:* ¹Zuazo, V.H.D. *et al. Agron. Sustain. Dev.* **2008**, 28, 65–86. ²Donald L. Sparks, *Advances in Agronomy*, cap. 8, vol. 102, 267–322, **2009**. ³Guo, M. *et al. J. Appl. Polym. Sci.* **2006**, 99, 3230–3235.

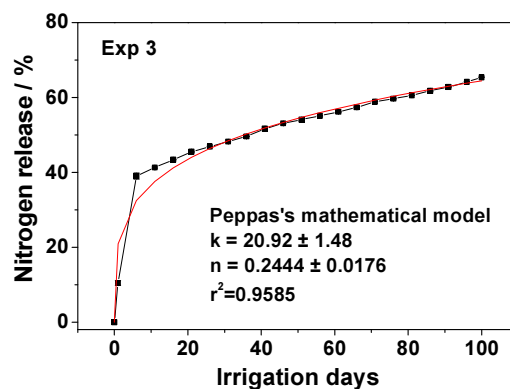


Figure 1 – Nitrogen release profile of the coated urea with CaCO₃/MgO nanoparticle, calcium lignosulfonate and PHB.

Relato de uma Oficina de fotocatalise como forma de conscientização ambiental e aproximação entre Ensino Superior e Educação Básica

Vanessa da Silva Reis (IC)^{1*} Lorena Mota Rebouças (PG),¹ Abraão Felix da Penha (PQ),¹ Marluce Oliveira da Guarda Souza (PQ).¹

mosouza@uneb.br; van.nessa2204@hotmail.com

¹Departamento de Ciências Exatas e da Terra – Campus I, Universidade do Estado da Bahia – UNEB. Rua Silveira Martins, nº 2555, Cabula – CEP 41150-000, Salvador – BA (Brasil)

Palavras Chave: *Poluição ambiental, Tratamento de efluentes, Resíduos de laboratório, Cristal de violeta*

Highlights

Report of a Photocatalysis Workshop as a form of environmental awareness and approximation between Higher Education and Basic Education
Promote awareness of environmental
To emphasize for students the importance of chemical knowledge
Dialogical relationship between University and Basic Education.

Resumo/Abstract

As ações humanas sobre o meio ambiente geram problemas de dimensões preocupantes, dentre esses destaca-se a contaminação dos corpos hídricos, que pode estar associada a maneira inadequada de descarte de resíduos domésticos e industriais por falta de conscientização. Nesse contexto a universidade pode contribuir por meio da tríade ensino, pesquisa e extensão, favorecendo a aproximação com a sociedade e possibilitando a reflexão e o debate sobre a preservação do meio ambiente. Nessa perspectiva, foi desenvolvida uma oficina experimental sobre fotocatalise heterogênea do resíduo de laboratório do corante cristal de violeta, visando contribuir para aumentar a percepção sobre os problemas ambientais a partir da interação entre as discentes de mestrado e graduação em Química (autoras) e estudantes da Educação Básica, ressaltando a importância da Química. Então, o objetivo deste trabalho é apresentar o relato de experiência da referida oficina. O desenvolvimento da proposta envolveu as seguintes etapas: apresentação do espaço físico do laboratório e vidrarias que seriam utilizadas; explicação do cenário ambiental decorrente dos descartes indevidos advindos das indústrias, residências e laboratórios; discussão sobre as possíveis remediações, com destaque para os processos oxidativos avançados; execução do experimento de fotocatalise (figura 1) e discussões sobre este processo. No decorrer da oficina, os estudantes foram observando o experimento com interesse e levantando questionamentos, enquanto as autoras explicavam os aspectos químicos e ambientais envolvidos. A oficina contribuiu para ampliar a consciência ambiental de estudantes da Educação Básica além de despertá-los para a importância do saber, especificamente químico e constituiu uma oportunidade de aproximar os universos acadêmicos e escolares.

Figura 1- Experimento de fotocatalise heterogênea



Agradecimentos/Acknowledgments

À CAPES e a PICIN/UNEB pelo apoio financeiro, ao PGQA pelo espaço concedido .

Área: MAT

Nº de Inscrição: 228

Kinetic investigations of the adsorption of Pb²⁺ ions from aqueous solutions using chitosan-g-poly(acrylic acid)/cellulose nanowhiskers

Ana Karen M. C. Farias (IC)¹, Wescley, S. Araújo¹(IC)¹, Alana A. Lourenço (IC)¹, Carlos E. de C. Magalhães (PQ)², Francisco Helder A. Rodrigues (PQ)^{1*}

karencastrofk@gmail.com; almeida_quimica@yahoo.com.br

¹Coordenação de Química, Laboratório de Polímeros e Compósitos (LAPOLICOM), UVA; ²Coordenação de Química, UECE

Keywords: Nanocomposite hydrogels, Kinetic, Cellulose nanowhiskers; Pb²⁺ ions; Wastewater remediation.

Highlights

The nanocomposite exhibited a remarkable adsorption capacity reaching up to 790 mg.g⁻¹ within 30 min. The interaction between the adsorbent and Pb²⁺ ions was primarily based on a chemisorption phenomenon, as suggested by the pseudo-second-order kinetic model.

Abstract

A series of superabsorbent hydrogels composites based on the biopolymer chitosan (CTS) grafted poly(acrylic acid) and cellulose nanowhiskers (CNWs) were synthesized by solution polymerization according to the procedure described Spagnol et al.¹, with the interest in the study of these systems as alternative adsorbents the of metal ions from aqueous solutions. The hydrogels were characterized by evaluated for adsorption kinetics for the Pb²⁺ ions. In order to examine the controlling mechanism of adsorption processes such as mass transfer and chemical reaction, the pseudo-first order and pseudo-second order equations were used to test the experimental data. Table 1 presents results obtained for the pseudo first-order and pseudo second-order model.

Table 1. Kinetics parameters of Pb²⁺ ions adsorption on CTS-g-poly(acrylic acid)/CNWs10 wt%.

| Model | Parameters | CTS-g-poly(acrylic acid)/CNWs |
|---------------------|-----------------------------------|-------------------------------|
| Pseudo-first order | q _{e,exp} | 790,21 |
| | q _{e,cal} | 66,33 |
| | k ₁ x 10 ⁻² | 2,86 |
| | χ ² | 11,09 |
| | R ² | 0,66062 |
| Pseudo-second order | q _{e,cal} | 806,45 |
| | k ₂ x 10 ⁻³ | 1,28 |
| | χ ² | 0,008 |
| | R ² | 0,99997 |

The correlation coefficients R² for the pseudo-second-order kinetic plots for all the hydrogels studied are above 0.999, suggest that the pseudo-second-order kinetic model can describe well the experimental data, and meaning that the adsorption process of Pb²⁺ onto these adsorbents is probably controlled by the chemisorption phenomenon². Moreover, the calculated equilibrium adsorption capacities q_{e,cal} also agree with the experimental data in the case of pseudo-second order kinetics. In addition, the low χ² values demonstrated by the pseudo-second-order model confirm its applicability to treat the adsorption kinetics of MB adsorption on the CTS-g-poly(acrylic acid)/CNWs10 wt% nanocomposites. Other studies using hydrogel composites for Pb²⁺ ions removal have found similar behavior^{2,3}.

Acknowledgments

To CNPq, FUNCAP (BP3-0139-00257.01.00/18), UECE and UVA.

¹Spagnol, C.; Rodrigues, F.H.A.; Pereira, A.G.B.; Farjado, A.R.; Rubira, A.F.; Muniz, E.C. *Carbohydrate Polymers*. **2012**, *87*, 2038.

²Junping, Z.; Yeling, J.; Aiqin, W. *Environmental Technology*. **2011**, *32*, 523.

³Junping, Z.; Aiqin, W. *Journal of Chemical & Engineering Data*. **2010**, *55*, 2379.

Synthesis and evaluation of non-clinical of a new chalcone (2E,4E)-1-(2-hydroxy-3,4,6-trimethoxyphenyl)-5-phenylpenta-2,4-dien-1-one

Priscila Teixeira da Silva (PG),^{1,5} José Ismael F. de Araújo (IC)², Jayze da Cunha Xavier (PG),⁵ Alexandre M.R. Teixeira (PQ),^{4,5} Francisco Ernani A. Magalhães (PQ)², Edson H. Teixeira (PQ)³, Paulo N. Bandeira (PQ),¹ Hélcio Silva dos Santos (PQ).^{1,5*}

pi.teixeiradasilva@gmail.com; helciodossantos@gmail.com

¹ Science and Technology Centre - Chemistry Course, State University Vale do Acaraú, Sobral, CE, Brazil, ²Laboratory of Bioprospecting of Natural Products and Biotechnology (LBPNB), State University of Ceará, CECITEC, Tauá, CE, Brazil; ³ Integrated Laboratory of Biomolecules (LIBS), Department of Pathology and Legal Medicine, Federal University of Ceará, Fortaleza, CE, Brazil, ⁴Department of Biological Chemistry, Regional University of Cariri, Crato, CE, Brazil, ⁵Department of Biological Chemistry, Regional University of Cariri, Crato, CE, Brazil

Palavras Chave: Chalcones, Zebrafish, locomotor activity

Highlights

Synthesis of a novel chalcone from 2-hydroxy-3,4,6-trimethoxyphenylacetophenone isolated from *Croton anisodontus*. Investigate of non-clinical safety of chalcone (2E,4E)-1-(2-hydroxy-3,4,6-trimethoxyphenyl)-5-phenylpenta-2,4-dien-1-one using adult zebrafish (*Danio rerio*)

Resumo/Abstract

Chemically, chalcones consist of open chain flavonoids in which the two aromatic rings are joined by a three carbon, unsaturated carbonyl system [1]. Locomotor activity is one of the parameters of behavioral analysis that has been used to evaluate the action of drugs that can act under the central nervous system of the adult zebrafish (*Danio rerio*) (ZFa) and cause locomotor or not [2]. Thus, this study aimed to evaluate the non-clinical safety of a new chalcone (2E,4E)-1-(2-hydroxy-3,4,6-trimethoxyphenyl)-5-phenylpenta-2,4-dien-1-one. The chalcone was synthesized by the condensation reaction of the Claisen-Schmidt using 2 mmol of acetophenone and cinnamaldehyde in ethanol and 10 drops of hydroxy sodium 50% under stirring for 48 hours. ZFa, wild, both sexes aged 60-90 days, sizes of 3.5 ± 0.5 cm and weight 0.4 ± 0.1 g were used. All experimental procedures were approved by the Animal Use Ethics Committee of the State University of Ceará (CEUA-UECE) under protocol nº 3344801/2017. As a result, the chalcone tested showed a sedative effect and/or locomotor impairment of the animals, significantly ($p > 0.05$) similar to the sedative effect of diazepam (DZP, 10 mg / kg, $p < 0.001$ vs. naive and vehicle), Fig.1. We also used ZFa to evaluate the acute toxicity (96 h) and was found that chalcone (1) was non-toxic, as no animal died ($LD_{50} > 10$ mg/kg).

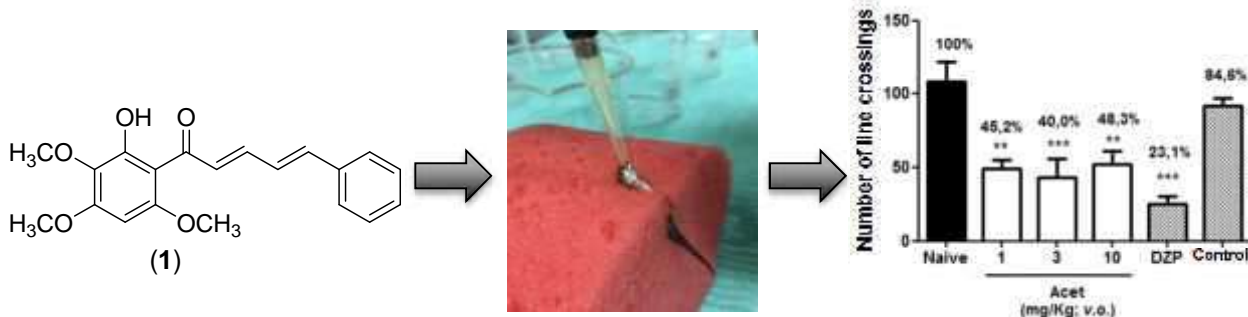


Figure 1. Effect of chalcone (1) under the locomotor activity of ZFa in the Open Field Test 0-5min). Naive - untreated animals.

[1] Abbas A., Naseer M.M., Hasan A., Hadda T.B. J. Mater. Environ. Sci., 5 (2014) 281 - 292.

[2] Taylor J.C., Dewberry L.S., Totsch S.K., Yessick L.R., DeBerry J.J., Watts S.A., Sorge R.E.. Physiology & Behavior 174 2017 83-88.

Immobilization of Human purine nucleoside phosphorylase on magnetic particles

Isabela A. T. Ximenes (PG),^{1*} Marcela C. de Moraes (PQ),^{1*}

isabela.ats@gmail.com; mcmoraes@id.uff.br

¹ Departamento de Química Orgânica, Instituto de Química, UFF

Palavras Chave: *Magnetic Particles, Enzyme Immobilization, Liquid Chromatography, Kinetic Studies, Screening*

Highlights

HsPNP enzyme was covalently immobilized on magnetic beads. The immobilized HsPNP activity was monitored in a liquid chromatography system. Immobilized HsPNP was kinetically characterized.

Resumo/Abstract

Purine Nucleoside Phosphorylase (PNP) enzymes play a key role in the purine salvage pathway. The relationship between deficiency of this enzyme in humans and T-cell mediated disorders has suggest that this enzyme is an important biological target for the development of new selective immunosuppressive agents [1]. Moreover, PNP inhibitors can also be used to avoid cleavage of anticancer and antiviral drugs. Thus, the development of new and reliable approaches to monitor its activity and screening inhibitors is crucial for the new drug discovery process. In this work, human PNP enzyme was immobilized covalently on the surface of magnetic beads and its activity was monitored by high performance liquid chromatography through direct quantification of the formed hypoxanthine. The chromatographic separation of inosine and hypoxanthine, substrate and product of the reaction catalyzed by PNP, was performed in an HPLC-DAD system, using an octyl column (Agilent, 15 × 0.46 cm, 5 μm) and triethylamine (1% in water, v/v, acidified with AcOH pH 6.0):MeOH (95:5), at a flow rate of 0.8 mL.min⁻¹ and detection at 249 nm. The chromatography method was validated with respect to linearity ($y=17226.8x-9805.8$, $R^2=0.99$), accuracy (90,8-115,1%), intermediate precision (0,48-15,37%) and limit of quantification (2,5 μM) . To optimize the activity assays, times of reaction of 30s and 60s, amounts of HsPNP-coated magnetic particles (2,5; 5,0; 25; 10; 25 and 500 μg.mL⁻¹) and time of magnetic extraction (30 and 60s) were investigated. The best condition evaluated was 30s of reaction, 2,5 μg.mL⁻¹ of HsPNP-coated magnetic particles and 30s of magnetic extraction. Kinect studies showed that the K_M valued for the immobilized enzyme was $488,2 \pm 49,1$ μM, while the K_M of $254.6 \pm 29,2$ μM is reported in the literature for another model of biochromatography assay [2]. The differences can be explained based on the peculiarities of those methods, like substrate diffusion and catalytic site accessibility. The HsPNP-coated magnetic particles retained the catalytic activity for over than 3 months. These results evidence that the HsPNP enzyme retained its catalytic efficiency with a high stability and that this approach could be employed in inhibitors screening.

References: [1] Bzowska, A.; Kulikowska, E.; Shugar, D. "Purine nucleoside phosphorylases: properties, functions, and clinical aspects". *Pharmacology & Therapeutics*, **2000**, 88(3), 349.
[2] Moraes, M. C.; Ducati, R. G.; Donato, A. J.; Basso, L. A.; Santos, D. S.; Cardoso, C. L.; Cass, Q. B. Capillary bioreactors based on human purine nucleoside phosphorylase: A new approach for ligands identification and characterization. *Journal of Chromatography A*, **2012**, 1232, 110–115.

Agradecimentos/Acknowledgments

CAPES, FAPERJ, CNPq and FIOCRUZ

Área: AMB

Nº de Inscrição: 00236

Ultrasound and disposable pipette assisted extraction techniques for the determination of fecal contaminants in sediments by GC-MS

Diogo C. Morelli (PG),^{1*} Luiz A. S. Madureira (PQ),²luiz.madureira@ufsc.br; diogocheremmorelli@outlook.com

Departamento de Química, UFSC

Keywords: Ultrasound, DPX, Sterols

Highlights

A green approach for the determination of fecal sterols in sediments is proposed with no in situ derivatization reagents and reduced sampling time compared to the usual Soxhlet procedure.

Resumo/Abstract

Given possible alterations in the physical-chemical characteristics of aquatic environments caused by anthropogenic inputs and the effects on the microorganism responses for fecal contaminations, alternative methods have been searched. The use of biomarkers, namely fecal sterols, is shown to be a reliable way of determination. Considering the properties of fecal sterols, the presence of these molecules in sediment samples taken from locations under investigation give a well founded framework of the environmental conditions. To cope with the green chemistry policy, in the present work an analytical methodology for the determination of fecal sterols in sediment samples using ultrasonic assisted extraction (UAE) followed by pre-concentration with disposable pipette extraction (DPX) procedure has been developed. Coprostanol, cholesterol, cholestanol and stigmasterol are the target analytes separated and quantified with GC-MS technique. From the multivariate experiments the extraction parameters were optimized. For UAE dichloromethane was selected as extracting solvent and the optimized DPX parameters were: 5 cycles of extraction with 700 μL of sample, 10 s each, and 2 cycles of desorption of 200 μL , 20 s each. Optimal desorption solvent was a mixture composed of ethyl acetate:acetonitrile (60:40 v/v). The detection limits were 7.6 $\mu\text{g kg}^{-1}$ for cholesterol and 75.8 $\mu\text{g kg}^{-1}$ for the other determined analytes. Limits of quantification were 25 $\mu\text{g kg}^{-1}$ for cholesterol and 250 $\mu\text{g kg}^{-1}$ for the other analytes with coefficient of determination ranging from 0.9908 to 0.9983. The accuracy of the method was evaluated by means of recovery at 3 levels of concentrations and ranged from 78 to 114%; the relative standard deviation extended from 0.5 to 10% and from 2 to 16% for intraday ($n = 3$) and interday values ($n = 9$), respectively. The developed method has been applied to lagoon samples from Santa Catarina state demonstrating the potential of UAE and DPX coupled to GC-MS to monitor fecal sterols in sediments.

Agradecimentos/Acknowledgments

Diogo Morelli is grateful to CAPES for scholarship and Luiz Madureira to CNPq grant number 307759/2016-4.

Manganese(III) porphyrin as catalysts for norfloxacin degradation in aqueous medium: products identification and cytotoxicity assay

Alexandre M. Meireles (PG),^{1*} Ana Luísa A. Lage (PG),¹ Juliana M. Ribeiro (PG),² Mirra A. N. Silva (TC),¹ Elaine M. Souza-Fagundes (PQ),² Dayse C. S. Martins (PQ).^{1**}

*alemoreira13@gmail.com; **daysequimica@ufmg.br

¹Departamento de Química - Instituto de Ciências Exatas (ICEx) - UFMG;

²Departamento de Fisiologia e Biofísica - Instituto de Ciências Biológicas (ICB) - UFMG.

Keywords: Fluoroquinilone; Hydrogen peroxide; Oxidation; Water treatment.

Highlights

A second-generation Mn(III) porphyrin was employed as catalyst for norfloxacin degradation by hydrogen peroxide. Four degradation products were identified by MS/MS analysis and it is were not cytotoxic to PBMC as model.

Abstract

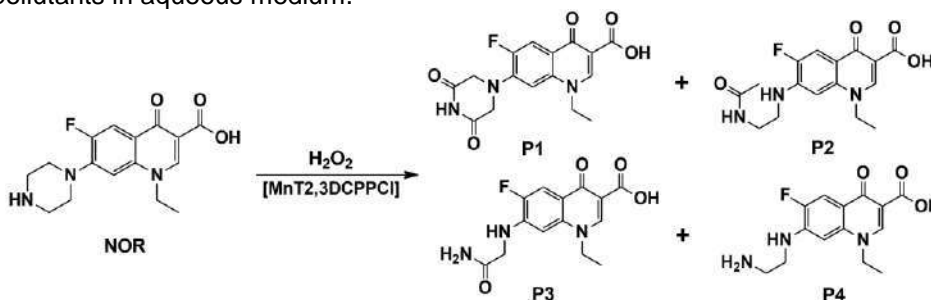
Norfloxacin (NOR) is a synthetic broad-spectrum fluoroquinolone antibiotic classified as an emerging contaminant. Although many works have described the degradation of NOR and other fluoroquinolones by advanced oxidative processes (AOPs), such as ozonization, Fenton-oxidation, and photolysis, the use of synthetic metalloporphyrins (MP) to catalyze antibiotic degradation still remains little explored. In this work, we evaluated the performance of the porphyrin [MnT2,3DCPPCI] as catalyst in the degradation reactions of NOR by hydrogen peroxide, in an aqueous medium. The degradation products were identified by tandem mass spectrometry analyses (MS/MS) and their cytotoxicity was investigated using Human Peripheral Blood Mononuclear Cells (PBMC), by the rezasurin method.

Control reactions were carried out in the absence of the catalyst, provided 20% of NOR degradation. In the presence of [MnT2,3DCPPCI] catalyst 49% of NOR degradation was achieved. This result could be justified by the presence of eight chlorine atoms in the aryl groups at the *meso*-positions of the porphyrin macrocycle which makes the MP more reactive and favoring the heterolytic H₂O₂ cleavage, to generate the high valence active species [Mn^VP(O)] and consequently increase NOR degradation.

Four degradation products (P1 – P4) were identified by MS/MS analysis, indicating the functionalization and/or cleavage of the piperazynil ring in the NOR structure (Scheme 1). These modifications were consistent with the fact of this group presents a higher electron density as compared to other functional groups in NOR structure. The piperazynil moiety is more susceptible to attacks by the OH[•] radicals or [Mn^VP(O)] species.

The cytotoxicity of all reagents and NOR degradation products were evaluated at different concentrations, by the rezasurin method, using PBMC. The samples containing reactants and/or degradation products were not cytotoxic under the evaluated conditions.

In this way, the studied Mn(III) porphyrin can be considered as an alternative catalyst to remediate emerging pollutants in aqueous medium.



Scheme 1: NOR degradation products in reactions with H₂O₂ and [MnT2,3DCPPCI].

Acknowledgments

CNPq, CAPES, and FAPEMIG.

Functionalized calixarenes working as ionic sensors

Janail Rodrigues da Silva (PG)*, Izilda A. Bagatin¹(PQ)

janailrodrigues@hotmail.com; ibagatin@gmail.com¹

¹ Departamento de Química, Instituto de Ciências Ambientais, Químicas e Farmacêuticas – UNIFESP-Diadema)

Palavras Chave: (Ionic Sensors, Calixarenes, Hydrogen Bonding).

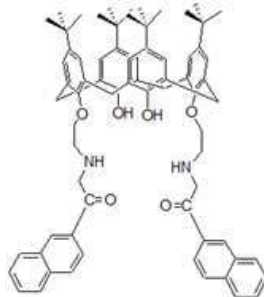
Highlights

Interaction of hazardous anions with ligand by hydrogen bonding
Use of chemical sensors coupled to amide groups and associated with luminescent groups.
Ligand development with the strong potential to recycle materials with high-added-value

Resumo/Abstract

A significant number of researchers are currently developing sustainable research in order to provide the requirements of the current generation without disturb future generations¹. In this context, we proposed to synthesize chemical sensors with the purpose of identifying toxic metals such as Hg²⁺, Cd²⁺ and Pb²⁺, and fluoride, chloride, dichromate and phosphate anions². At the first moment, a ligand was synthesized starting from the matrix calix[4]arene and associated with the 2-(bromoacetyl)naphthalene chromophore group, which did not present satisfactory results, regarding its interaction with the toxic species tested. Because of this, a first functionalization with the amino group (NH₂) on the matrix calix[4]arene was made and then condensing the 2-(bromoacetyl)naphthalene chromophore group (Fig. 1). The characterization was done by NMR, showing the following signals: (δ CDCl₃) 8.5 - 7.5 ppm (m, 14H, naph ring) 7.65 ppm (1s, 2H, NH), 7.17 ppm (1s, 2H, OH), 7.09 and 7.02 (2s, 8H, m-ArH), 5.70ppm (1s, 4H, NHCH₂C = O), 4.50 and 3.35ppm (d, 8H, spin AB), 2.75 ppm (1s, 8H, CH₂CH₂), 1.26 and 1.22 ppm (2s, 36H, t-Bu). The UV-Vis spectrum of this ligand showed bands at 236 nm, 281 nm, 290 nm, and 336 nm characteristic of typical $\pi \rightarrow \pi^*$ transitions. Preliminary results on titration using UV-Vis showed significant interactions with fluoride and dihydrogen phosphate anions, showing potential as an anionic sensor, and indicating that small modifications in the ligand can improve the interaction.

Fig. 1



Agradecimentos/Acknowledgments



References:

¹C. Baird, "Química Ambiental", 2a ed., São Paulo:Artmed Editora S.A., 2002, p. 404-437

²J. F. Ferreira, I. A. Bagatin Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy 189 (2018) 44–50

Belenmines B and C, new homoaporphines bearing an unprecedented 8-oxohomoaporphine sub-skeleton from the bark of *Duguetia surinamensis*: First report in the Annonaceae family

Weider Henrique Pinheiro Paz (PG),¹ Rodolfo Nascimento de Oliveira (PG),¹ Felipe Moura Araújo da Silva (PQ),¹ Hector Henrique Ferreira Koolen (PQ),² Emmanuel Vilaça Costa (PQ).^{1*}

* emmanuelvc@gmail.com

¹Department of Chemistry, Federal University of Amazonas – UFAM; ²Metabolomics and Mass Spectrometry Research Group, Amazonas State University – UEA.

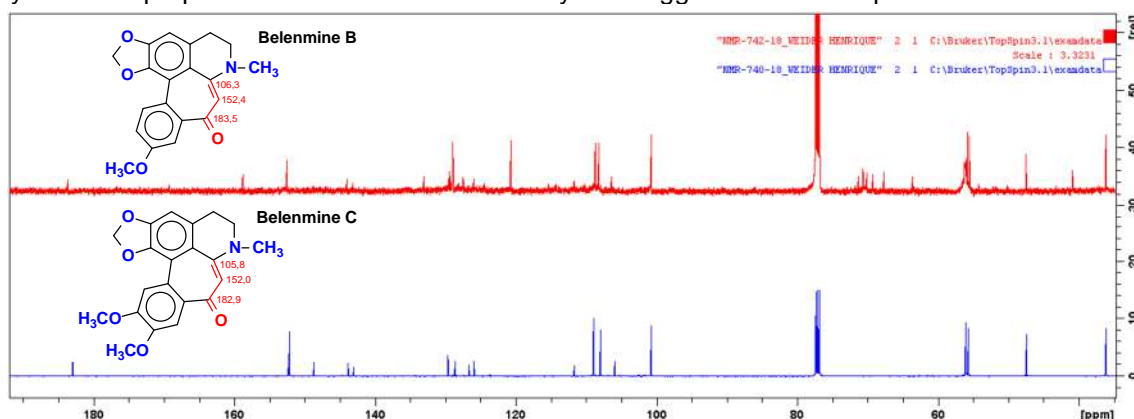
Keywords: *Duguetia surinamensis*, Phenethylisoquinoline alkaloids, Oxohomoaporphine alkaloids.

Highlights

1. Two novel alkaloids were isolated and characterized for the first time in *Duguetia surinamensis*.
2. The new alkaloids have an oxohomoaporphine skeleton unprecedented in the Annonaceae family.
3. The biosynthesis of new alkaloids suggests origin from phenylethylamine and an aldehyde with a C₆C₃ unit.
4. The results confirm another natural source of homoaporphine alkaloids as observed in Liliaceae family.

Abstract

Duguetia surinamensis (R. E. Fries), a presentative species of the Annonaceae family, which remains unknown from both, chemical and pharmacological points of view. It is endemic to the Amazon rain forest of Brazil, Colombia and Guianas. In a recent communication on the 41st RASBQ, we described for the first time in the bark of *D. surinamensis* the isolation of ten substances: five aporphinoids alkaloids (duguetine, dicentrine, 7-hydroxynordicentrine, duguetine-*N*-oxide, and dicentrinone), one morphinandienone (pallidine), one tetrahydroprotoberberine (tetrahydrojathrorrizine), two benzenoids (1,2,4-trimethoxybenzene and 1-(2,4,5-trimethoxyphenyl)-1,2-ethanediol), and one new alkaloid with an unprecedented oxahomoaporphine skeleton, named Belenmine A. The cytotoxicity activity of these substances were also reported. In continuation to the phytochemical study of the bark of *D. surinamensis* (SIGGEN N^o ACAA36) in search of new molecules with potential antitumor activity we describe in this work the isolation of two new alkaloids named Belenmines B and C with an unprecedented skeleton in the Annonaceae family. The isolation of these alkaloids were performed by means of classical chromatography techniques such as chromatography column (CC) and thin layer chromatography (TLC). For the structural elucidation, mass spectrometry and nuclear magnetic resonance spectroscopy (1D/2D) were employed. The new alkaloids have an 8-oxohomoaporphine skeleton described for the first time in the literature. Its biosynthesis suggest that the skeleton is formed in a similar way to that in the benzyltetrahydroisoquinolines from a phenylethylamine and an aldehyde, but a whole C₆C₃ unit rather than a C₆C₂ fragment functions as the reacting aldehyde generating the homoaporphine skeleton, as observed for alkaloids of Liliaceae family. The difference of the alkaloid isolated from *D. surinamensis* to the homoaporphine alkaloids of Liliaceae is the presence of a carbonyl- α,β -unsaturated group observed by the signals in the ¹³C NMR spectrum at δ 106.3/ δ 105.8, δ 152.4/ δ 152.0 and δ 183.5/ δ 182.9 for Belenmines B and C, respectively, and confirmed by HSQC e HMBC experiments. The results obtained in this work reinforces the chemosystematics proposed for the Annonaceae family and suggests more in-depth chemical studies.



Identificação de perfil de petróleos pesados pela análise de propriedades físico-químicas e PCA

Mayara da Silva* (PG),¹ Francine D. dos Santos (PG),¹ Rayane R. B. Corona (PG),¹ Juliéte S. D. Leite (PG),¹ Laine B. Pereira (PG),¹ Luana S. de Oliveira (IC),¹ Cristina M. S. Sad (PG),¹ Paulo R. Filgueiras (PQ),¹ Eustáquio V. R. de Castro (PQ),¹.

sna.mayara@gmail.com

¹ Universidade Federal do Espírito Santo, Laboratório de Pesquisa e Desenvolvimento de Metodologias para Análises de Petróleos (Labpetro), Departamento de Química, UFES, Av. Fernando Ferrari 514 – Vitória, Espírito Santo, Brasil, CEP: 29075-910

Palavras Chave:(petróleo pesado, caracterização físico-química, perfil composicional, análise por componentes principais).

Highlights

Identification of the profile of heavy oils by the analysis of physicochemical properties and PCA. The characterization associated with PCA makes it possible to verify the profile of heavy oils. The composition of heavy oils in terms of SARA is decisive for differentiating them.

Resumo/Abstract

Petróleos pesados possuem composição química com maiores proporções de compostos com alto ponto de ebulição, enxofre, nitrogênio, metais e compostos poliaromáticos. Apesar de serem pesados ($^{\circ}$ API entre 21,9 e 10) e apresentarem algumas características semelhantes, eles podem possuir diferenças em suas propriedades físico-químicas que são capazes de distingui-los. Assim, o presente trabalho teve como objetivo identificar o perfil de petróleos pesados a partir da análise das propriedades de caracterização (físico-químicas) e análise por componentes principais (PCA). Para a realização desse estudo foram selecionados 5 amostras de petróleos pesados (de diferentes reservatórios e campos), identificadas como A, B, C, D e E. Para verificar o perfil destes, foram analisadas as seguintes propriedades físico-químicas: densidade, viscosidade, índice de salinidade total (IST), número de acidez total (NAT), teor de metais níquel e vanádio, teor de saturados (S), aromáticos (Ar), resinas (R) e asfaltenos (As) (SARA). A fim de investigar o perfil dos óleos em termos composicionais, a análise de SARA foi avaliada e suas razões. Os dados obtidos foram avaliados pela ferramenta PCA. Os resultados mostraram que para a maioria dos petróleos analisados, à medida que o $^{\circ}$ API diminui, a quantidade de níquel aumenta. Para os óleos A ($^{\circ}$ API 19,9) B ($^{\circ}$ API 18,7) e C ($^{\circ}$ API 16,8) o teor de vanádio é superior ao de níquel, entretanto, essa relação se inverteu para o D ($^{\circ}$ API 13,7) e E ($^{\circ}$ API 10,8). Isso pode estar relacionado com os teores As e R desses óleos e suas razões As/R (0,23 para o óleo D e 0,75 para o E). Em relação ao NAT, observou-se que ele aumenta (0,80 mg·KOH·g⁻¹ no óleo D para 1,20 mg·KOH·g⁻¹ no óleo E) à medida que o $^{\circ}$ API diminui. Comparando os óleos D e A o NAT diminui de 3,35 para 0,45 mg·KOH·g⁻¹ óleo, respectivamente e isso pode ter ocorrido devido a maior razão R/Ar entre eles. A PCA mostrou que existe uma correlação entre teor de níquel e As, bem como para vanádio, teor de S e NAT. A propriedade SARA apresentou maior correlação (94,2%) com as outras, o que pode ser visto pelos valores de suas razões (Figura 1). Neste sentido, pela análise das propriedades físico-químicas e PCA foi possível verificar que os óleos apresentam diferentes perfis composicionais que podem afetar as etapas de produção, transporte e refino.

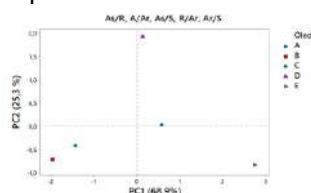


Figura 1. Gráfico de scores das razões do SARA dos óleos A, B, C, D e E, com PC1 vs PC2.

Agradecimentos/Acknowledgments

UFES, LABPETRO, PETROBRAS, ANP, CAPES E FAPES.

42ª Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química: Eixos Mobilizadores em Química

Área: AMB

Nº de Inscrição: 00247

Tratamento de água residuária de lavanderia: avaliação da adsorção de surfactante aniônico em óxido de grafite.

Rayane R. B. Corona (PG),^{*} Mayara da Silva (PG), Laine B. Pereira (PG), Francine D. dos Santos (PG), Juliéte S. D. Leite (PG), Cristina M. S. Sad (PG), Paulo R. Filgueiras (PQ), Eustáquio V. R. Castro (PQ).

rayane.boone@gmail.com

Universidade Federal do Espírito Santo; Laboratório de Pesquisa e Desenvolvimento de Metodologias para Análises de Petróleo (LabPetro), Departamento de Química, Av. Fernando Ferrari 514 - Vitória, Espírito Santo, Brasil, CEP: 29075-910.

Palavras Chave: *Tratamento, Águas residuárias, Surfactantes aniônicos, Adsorção, Óxido de grafite.*

Highlights

Wastewater treatment of laundry: evaluation of the adsorption of anionic surfactant in graphite oxide. Graphite oxide has good properties as an anionic surfactant adsorbent.

Resumo/Abstract

Os efluentes produzidos nas águas de lavanderias destacam-se como um dos resíduos gerados tanto em domicílio quanto em grandes empresas de lavanderia. Estes resíduos constituem uma proporção significativa da descarga de esgoto, pois no processo de lavagem de roupas são utilizados grandes quantidades de água tratada pela concessionária. Esse efluente contém altos teores de sólidos suspensos, surfactantes e elevada Demanda Química de Oxigênio (DQO), entre outros, que excedem os limites estabelecidos pela Resolução Conama nº 357 de 2005. Destes, destacam-se os surfactantes como os principais poluentes presentes, pois estão em maior quantidade nos detergentes para lavagem de roupas. Os surfactantes necessitam de atenção, uma vez que impactam o meio ambiente devido à formação de espumas e consequente redução na transferência de oxigênio à biota aquática, além de efeitos tóxicos (acima $1,0 \text{ mg.L}^{-1}$). Dessa forma, um tratamento eficiente para remoção dos surfactantes das águas residuárias antes do descarte se faz necessário para evitar os impactos ambientais nos corpos d'água. Segundo a literatura, esse tratamento pode ocorrer por tratamento físico (adsorção), químico e biológico. Destacando-se o tratamento por adsorção, este constitui um fenômeno físico-químico no qual o componente da fase líquida (adsorvato) é transpassado para superfície da fase sólida (adsorvente). O fenômeno conhecido como dessorção ocorre quando há transferência dos componentes do adsorvato no adsorvente, a partir da superfície, pela ação de diversos tipos de forças químicas, a exemplo, ligações de hidrogênio, interações dipolo-dipolo e forças de van der Waals. Neste trabalho foram utilizadas amostras de óxido de grafite (OG), preparado a partir de baterias íon-Li recicladas de aparelhos celulares, como uma proposta de material adsorvente de surfactantes aniônicos. Em seguida foi realizada análise de cinética de adsorção com o óxido de grafite preparado (OGB) e carvão ativado granular (CAG) em amostras de águas residuárias de lavanderia. As concentrações finais de surfactantes remanescentes na fase aquosa foram determinadas utilizando espectrofotômetro UV-vis modelo lambda 45, fabricante PerkinElmer. A duração de cada experiência cinética foi de 10, 20, 30, 40, 50, 60, 80, 100 e 120 min. Os resultados indicaram uma eficiência de adsorção máxima de surfactantes aniônicos em OGB e CAG de 44% e 54% respectivamente, e a cinética de adsorção foi bem representada pelo modelo de pseudo-segunda ordem com coeficientes de correlação de 0,9543 e 0,9291. Estes resultados demonstram a importância do estudo da cinética no processo de remoção de surfactantes aniônicos, a base de adsorção, para dimensionamento de um sistema de tratamento de água, pois permite a avaliação da eficiência de remoção aliada às características hidráulicas do projeto.

Agradecimentos/Acknowledgments

UFES, LABPETRO, CAPES, FAPES, SBQ.

Área: ANA

Inscrição: 00248

High-throughput system for determination of organic matter and clay in soil samples

Ronaldo B. dos Santos (PG)¹, Gilson A. Helfer (PQ)^{1,2}, Guilherme S. Machado (IC)³, Roberta O. Santos (PG)¹, Cristiane Pappis (IC)⁴, Luiza Baumann (IC)⁴, Marcia Librelotto (IC)⁴, Jorge Luis Victoria Barbosa (PQ)², Adilson Ben da Costa (PQ)¹

adilson@unisc.br; rbastos@mx2.unisc.br

¹Programa de Pós-Graduação em Sistemas e Processos Industriais (UNISC); ²Programa de Pós-Graduação em Computação Aplicada (UNISINOS); ³Departamento de Computação e ⁴Departamento de Química e Física, (UNISC).

Keywords: Soil analysis; Clay; Organic matter; Reflection spectroscopy; Chemometrics, Green chemistry.

Highlights

A new device for the determination of organic matter and clay in soil samples. Green analytical methods for soil analysis. Direct analysis using vis-NIR diffuse reflectance spectroscopy.

Abstract

The use of Precision Agriculture (PA) is already a reality in farms, resulting in a significant increase in agricultural productivity. However, PA requires a great deal of analytical information on soil fertility, resulting in high demand from soil analysis laboratories and, consequently, waste generation. In this way, the objective of this work was to develop an analytical equipment and methodology for the determination of organic matter and clay, simultaneously and with high analytical frequency. For this, a robotic movement system type XYZ (Fig. 1) was used for the movement of a fiber optic cable (OCF-103611, OCEAN OPTICS, US), connected to an optical system consisting of an NIR spectrometer (NIERQUEST 512-2.5, OCEAN OPTICS, US) and VIS-NIR (FLAME-S-VIS-NIR-ES, OCEAN OPTICS, US) and a halogen source with opto-mechanical shutter system (HL-2000-FHSA, OCEAN OPTICS, US).

This equipment produces a scanning spectrum of a surface of 4 cm², in the region between 450-2450 nm, with a capacity of 40 samples and analytical frequency of the order of 10 analyzes (scans) per minute. The interferences of the moisture conditions of the samples, ambient illumination, distance between the sensor and the surface of the samples, and the position of the samples were investigated and optimized for the repeatability of the spectra. A total of 367 samples of different concentrations of organic matter and clay, analyzed by the official methodology¹, were used for the development of the calibration models. After adjust equipment settings, the spectra (n = 5) originated the multivariate calibration models by *Partial Least Square* (PLS). A software called Soil Data Analysis (SDA) was developed using the C # (C-Sharp) programming language, for application of the models and presentation of the results in real time. The prediction results obtained a good agreement with the official methodology, presenting R²_{pred} 0.938 and 0.927; RMSEC 0.50% and 4.35%; and RMSEP 0.41% and 4.32%, for organic matter and clay, respectively. The results indicate that automated molecular spectroscopy is a viable alternative to replace conventional methods for soil analysis, eliminating waste generation, reducing energy consumption and meeting the current demands of the sector.

References

1 Tedesco, M.J; Gianello, C; Bissani C.A.; Bohnen, H; Volkweiss, S.J. Análise de solo, plantas e outros materiais. 2° ed. Ver. e Ampl. – Porto Alegre UFRGS Departamento de Solos, 1995. 174p.



Figure 1 – Image of the equipment for soil analysis.

Área: ELE

Nº de Inscrição: 000249

Voltammetric Study of the New Chalcone Synthesized of a Natural Isolated Acetophenone from *Croton anisodontus*

Murilo S. S. Julião (PQ),^{1*} Priscila T. Silva (PG),² Jayze C. Xavier (PG),² Alexandre M. R. Teixeira (PQ),² Hécio S. Santos (PQ),¹ Paulo N. Bandeira (PQ).¹

murilosan@gmail.com

¹Centro de Ciências Exatas e Tecnologia, UVA/CE; ²Departamento de Química Biológica, URCA.

Palavras Chave: Electrochemistry behavior, HYTPHENYL, Natural compounds.

Highlights

Chalcones are important intermediates in the synthesis of biologically active compounds. The oxidation mechanism of HYTPHENYL in aqueous medium involves two electrons, in an irreversible process.

Abstract

Introduction: The chalcones and their derivatives have received a great deal of attention from the scientific community because of their simple structures and because they present a great diversity of pharmacological activities.¹ The main objective of this work was to study the electrochemical behavior in aqueous medium of a new chalcone, 2E-1-(2'-hydroxy-3', 4', 6'-trimethoxyphenyl)-3-(phenyl)-prop-2-en-1-one (HYTPHENYL) (structure 3), synthesized from an acetophenone isolated of stem bark of *Croton anisodontus* Müll. Arg., the 2-hydroxy-3,4,6-trimethoxyacetophenone (HTMCX) (structure 1), Figure 1.

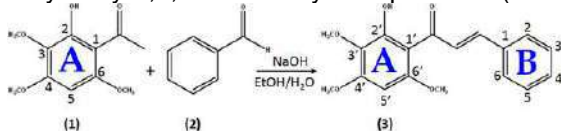


Figure 1: Scheme of the synthesis of chalcone HYTPHENYL.

Materials and methods: The chalcone used in this work was synthesized by the Research Group on Chemistry of Natural Products of UVA/CE. The voltammetric study of chalcone HYTPHENYL was performed in a conventional electrochemical cell for three electrodes coupled to a potentiostat/galvanostat μ Autolab III (Metrohm Autolab). Glassy carbon (GCE), $\phi = 3,0$ mm; Pt and Ag/AgCl, KCl (3.0 M) were used as working, auxiliary and reference electrodes, respectively. The oxidation processes were performed by adding of stock solution HYTPHENYL 0.25 mM or HTMCX 3.0 mM to an electrochemical cell containing Sorensen buffer (pH = 6.96) or phosphate 0.20 M (pH = 7.14). The technique used was cyclic voltammetry. All measurements were recorded in triplicate at room temperature and mean values were considered for further calculations.

Results and discussion: For the two compounds a single oxidation peak at positive potentials was recorded, which did not disappear and the peak current did not decrease. In all recorded voltammograms, the results obtained on GCE in the presence of HYTPHENYL and HTMCX were compared to those recorded with blanks under the same conditions. In Sorensen (pH 6.96) and phosphate (pH 7.14) buffers and in the scan rate (v) range: 10.0 to 100 mVs⁻¹, HYTPHENYL and HTMCX produced a well-defined anodic peak at approximately 650 and 720 mV, respectively, on first scan cycle, Figure 2.

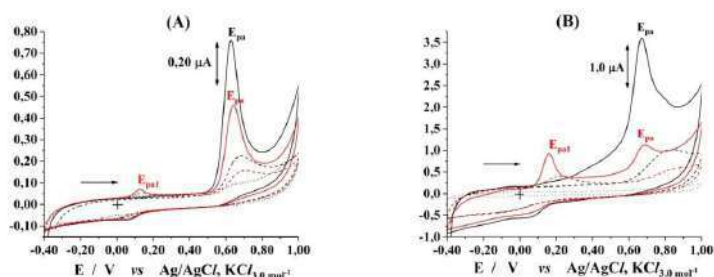


Figure 2: Cyclic voltammograms recorded on GCE for HYTPHENYL 25 μ M (A) and HTMCX 300 μ M (B) in Sorensen buffer (pH 6.96), 1st (—) and 2nd cycle (—) and phosphate buffer (pH 7.14), 1st (- - -), 2nd cycle (- - -).

The proposed oxidation mechanism for the HYTPHENYL involves the formation of a phenoxyl radical resulting from the removal of one electron from the 2'-hydroxyl group followed by the one H⁺ ion abstraction. In the sequence, this phenoxyl radical most likely forms a dimer.² The introduction of ring B into the structure of HTMCX appears to facilitate the oxidation of HYTPHENYL, as this compound is more easily oxidized than HTMCX.

References:

- SINGH, P.; ANAND, A.; KUMAR, V. *Eur. J. Med. Chem.*, 85, 758, 2014.
- COTELLE, N.; HAPIOT, P.; PINSON, J.; ROLANDO, C.; VEZIN, H. *J. Phys. Chem. B*, 109, 23720, 2005.

Acknowledgments

To CNPq and FUNCAP: PQ/CNPq-2015 (303963/2015-8); PQ-BPI/FUNCAP (BP2-0107-00026.01.00/15).

Platinum(II)-pyrazole complexes: structure and DNA binding evaluation

Ana Luiza de Andrade Querino^{1*}(PG), Carolina Hahn da Silveira² (PG), Renata Diniz¹ (PQ), Bernardo Almeida Iglesias² (PQ), Heveline Silva¹ (PQ)

analuzadeandradeq@gmail.com

¹Departamento de Química, UFMG, Belo Horizonte-MG, Brazil; ²Departamento de Química, UFSM, Santa Maria-RS, Brazil

Palavras Chave: *Platinum(II)*, *Pyrazole*, *DNA*, *Anticancer*, *Fluorescence*.

Highlights

Structure description of new disubstituted pyrazole-platinum(II) complexes with biological potentiality. *In vitro* study of cytotoxic activity of ligands and their complexes in tumor cells. UV-vis and fluorescence studies of DNA interaction using different dyes.

Abstract

Cisplatin is the most widely used anticancer drug with a Pt(II) center, though it presents a number of inherent limitations. It binds to DNA majority through N7 of guanine or adenine after hydrolysis of its labile chloride ligands, which leads to unwinding of the double helix and consequent inhibition of transcription¹. Since DNA is the primary target for many anti-cancer drugs, including cisplatin and its analogues, it is of great value to understand the nature of this interaction. Several interactions can arise from covalent binding of the compound to the DNA, intercalation, major or minor groove binding, among others².

In this work, two new platinum(II)-pyrazole complexes are described. The structural and electronic properties were assessed by single crystal X-ray diffraction (figure 1), NMR, electronic absorption and emission spectroscopy. *In vitro* cytotoxic activity of ligands and complexes against two tumor (4T1 and B16F10) and normal cell lines (BHK21) was evaluated. Both complexes presents higher cytotoxicity than ligands. The binding interaction between the platinum(II)-pyrazole complexes and DNA was studied as both complexes presents strong fluorescence at 330 nm, under physiological condition (pH = 7.4) in a DMF/Tris-HCl buffer (figure 2). It was also evaluated the ability of ligands and complexes to displace known molecules that intercalate (ethidium bromide) or bind to major (methyl-green) and minor (DAPI) grooves of DNA by competition and quenching of fluorescence.



Figure 1 – Crystal structure of compound 1.

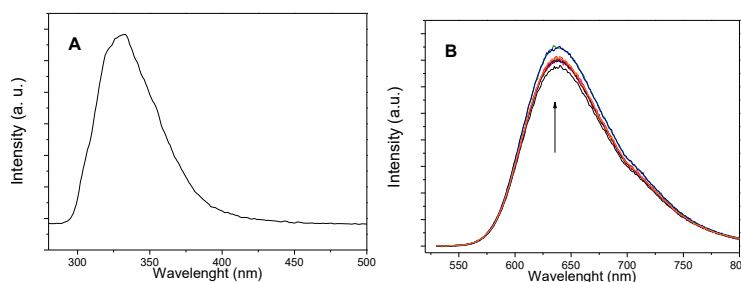


Figure 2 - Fluorescence spectrum of compound 1 (6,8 x 10⁻⁶M; excited at 269 nm) in DMF solution (A); Quenching of ethidium bromide fluorescence (B)

References:

1. A. P. Neves, *et al.*, *Revista Virtual de Química*, **3**, 196, 2011;
2. Pages, B. J. *et al.* *Dalton Trans.*, **44**, 3505, 2015;

Acknowledgments

Capes, CNPq, FAPEMIG, PPG-Química UFMG.

Synthesis and structural analysis of new trinuclear complexes containing yttrium and first row transition metals

Artur L. Hennemann (IC),¹ Felipe D. da Silva (PG),¹ Ernesto S. Lang (PQ),¹ Ulrich Abram (PQ),² Hung H. Nguyen (PQ)³ and Sailer S. dos Santos. (PQ)^{1*}

sailer.santos@ufsm.br

¹Department of Chemistry, Federal University of Santa Maria - UFSM; ²Institut of Chemistry and Biochemistry, Freie Universität Berlin; ³ Department of Inorganic Chemistry, VNU University of Science Hanoi.

Palavras Chave: Mixed metal compounds, Yttrium complexes, Pyridine-2,6-bis(β-diketonato) ligands, X-ray structures.

Highlights

Mixed-metal trinuclear complexes containing yttrium and first row transition metals were prepared in a one-pot reaction.

Pyridine-2,6-bis(β-diketonato) ligand with two sets of different chelating sites provided a self-assembly structure which is built up by hard-soft interactions.

Resumo/Abstract

The *N*-benzoyl(*N,N'*-dialkylthiourea) ligands are known for more than a hundred years and several metal complexes have been reported by researchers.¹ Despite being “old” ligands, their potential as building blocks for host-guest assemblies started to be exploited just recently.² In this work, we report the synthesis and structure of two new trinuclear complexes containing yttrium(III) and cobalt(II) (**1**) or nickel(II) (**2**) using the 2,6-dipicolinoylbis(*N,N*-diethyl-thiourea) ligand (**H₂L**) as building block for the molecular skeleton. This ligand presents two sets of different chelating sites: *i*) two “arms” with a “soft” κ-O,S system from the benzoylthiourea groups, and *ii*) a “hard” κ-O,N,O' system from the central picolinoyl moiety (Figure 1).

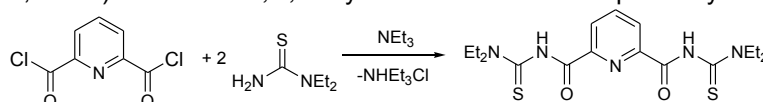


Figure 1. Synthetic route for the preparation of **H₂L**.

This molecular skeleton leads to a self-assembly structure where “hard” 3+ metal ions, with appropriate size, are preferably directed to the central void formed by two (or three) anionic ligands {L₂}²⁻, while octahedral 2+ first transition metal ions coordinate to the lateral κ-O,S chelating units. Figure 2 depicts the molecular structure of complexes **1** and **2**.

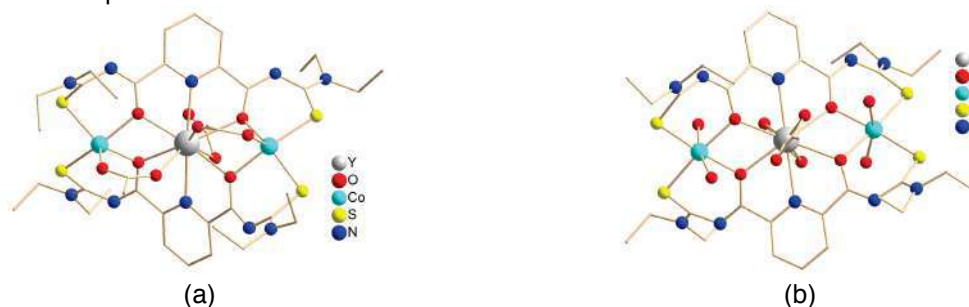


Figure 2. Molecular structure of (a) [Co₂Y(L)₂μ₂-(OAc)₂(OAc)] (**1**) and (b) [Ni₂Y(L)₂(MeOH)₄(OAc)₂] (**2**). Hydrogen atoms are omitted for clarity.

¹K. R. Koch, *Coord. Chem. Rev.* **2001**, 473, 216-217.

²C. T. Pham, H. H. Nguyen, A. Hagenbach, and U. Abram *Inorg. Chem.* **2017**, 56, 11406–11416.

Agradecimentos/Acknowledgments

Brazilian agencies CAPES, CNPq and FAPERGS supported this work. S.S.S. and A.L.H. thank the FIFE ARD/UFSM-2016 for research fellowships.

Azobenzene Dyad with Selective Photoisomerization: An Example of Photocontrolled Molecular Bit

Adrian Kreuz (PG),¹ Gianluca C. Azzellini (PQ),^{1*}

akreuz@usp.br; gcazzell@iq.usp.br

¹ Instituto de Química, Universidade de São Paulo.

Keywords: Photoswitch, Azobenzene dyad, Selective isomerization, Molecular logic.

Highlights

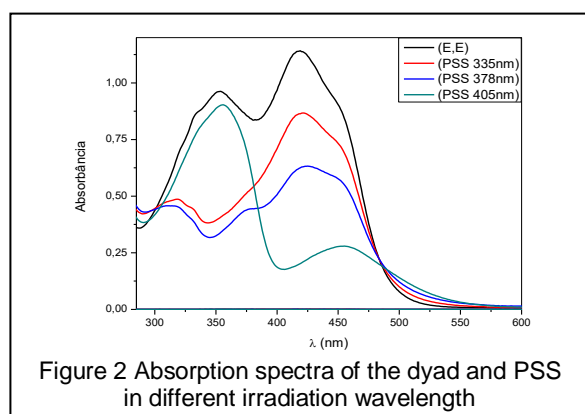
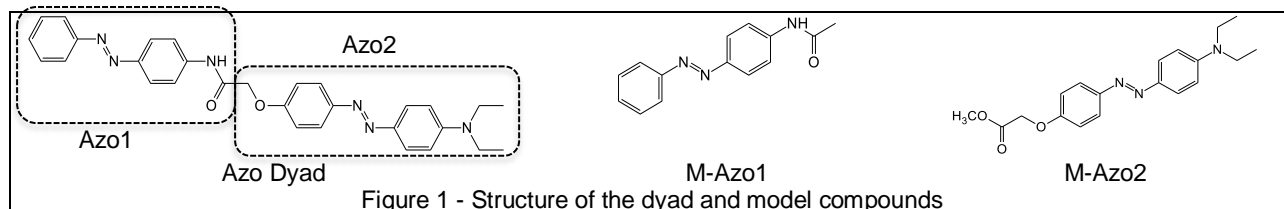
An azobenzene dyad with absorption bands separated by 60 nm enables four isomeric states by selective irradiation. First example of a photocontrolled azobenzene-based *bit* of molecular information

Resumo/Abstract

Azobenzenes are widely used as photo-switches, due to its convenient and reversible photochemical *E-Z* isomerization. For practical applications in molecular logics is desired to covalently assemble several photochromic units, that can be selectively excited.¹

In this work, an azobenzene dyad was obtained with each azobenzene unit corresponding to a different spectroscopic class (azobenzene – Azo1 and aminoazobenzene – Azo2). This strategy resulted in a 60 nm separation between the absorption maxima of Azo1 and Azo2, enabling selective excitation of the units.

Its spectral and photochemical isomerization properties were compared with model compounds M-Azo1 and M-Azo2.



| Azoderivative | $\Phi_{E \rightarrow Z}$ |
|---------------|--------------------------|
| M-Azo1 | 0,22 ^{371 nm} |
| M-Azo2 | 0,34 ^{402 nm} |
| Azo1 | 0,21 ^{371 nm} |
| Azo2 | 0,34 ^{402 nm} |

All four isomeric states are achieved by varying irradiation wavelength: *E,E* (initial state, no light); *E,Z* (405 nm); *Z,E* (335nm); *Z,Z* (378 nm). Photoisomerization quantum yields of each unit are identical to the model compounds, showing that Azo1 and Azo2 have independent spectroscopic and photochemical behavior.

In conclusion a novel azo dyad is presented with independent photoisomerization and four obtainable logic states, representing a good candidate for molecular logic applications.

¹ Fihey, A.; Perrier, A.; Browne, W. R.; Jacquemin, D. **Chem. Soc. Rev.**, (2015), 44, 3719.

Acknowledgement: CNPq and IQ-USP

Micro-extração assistida por ultrassom em reator *cup horn* em amostras de manjericão (*Ocimum basilicum* L.) para determinação multielementar por ICP-MS

Vania L. G. Teles (PG)^{1*}, Giselle V. Souza (PG)¹, Rodinei Augusti (PQ)², Letícia M. Costa (PQ)¹

vaninhateles@yahoo.com.br

¹Laboratório de Espectrometria Atômica e Química Analítica e Ambiental - LEAQUAA, Departamento de Química, Instituto de Ciências Exatas, Universidade Federal de Minas Gerais; ²Departamento de Química, UFMG

Palavras Chave: micro-extração, *cup horn*, manjericão, planejamento experimental.

Highlights

Ultrasonnd-assisted microextraction using a *cup horn* reactor in basil samples (*Ocimum basilicum* L.) for multielement determination by ICP-MS

- Simple, fast and accurate green method for quantification of metals in basil samples;
- Appreciable recoveries were obtained for all samples;
- Microextraction procedure was applied to leaves, stem and roots samples.

Resumo

O objetivo deste trabalho foi desenvolver, otimizar de forma multivariada e validar um método para determinação de Ba, Be, Cd, Cu, Fe, K, Li, Mg, Mn, Sr e Zn em amostras de manjericão por ICP-MS. As amostras foram fracionadas em folha, caule e raiz e submetidas ao procedimento de micro-extração assistida por ultrassom (MUS) empregando um procedimento miniaturizado em sonoreator tipo *cup horn*. Para isso, sementes de manjericão foram germinadas em papel *germitest*, dentro de um dessecador por 3 dias, até aparecimento de radículas com cerca de 0,5 cm. Em seguida, 13 radículas foram alocadas sobre papel alumínio e separadas por no mínimo 2 cm de distância. O cultivo foi realizado em solução de *Hoagland* a 5% (v v⁻¹) com adição de solução de Cd(NO₃)₂.4H₂O nas concentrações de 0; 1,0; 3,6; 5,0; 10,0; 25,0; 50,0 e 100,0 µM. O experimento foi realizado em triplicata para cada nível de concentração e a suplementação de Cd²⁺ feita a cada 3 dias. Após 15 dias de cultivo, para cada concentração de Cd, separaram-se as partes da planta em raiz (R), caule (C) e folha (F). Em seguida, as amostras foram liofilizadas por 24 horas e maceradas. Para otimização do método MUS, 5 mg de F e 3 mg de C e R de um *pool* de cada matriz foram empregados no planejamento experimental 2_{IV}⁴⁻¹ com triplicata no ponto central, cujos fatores e níveis avaliados foram: amplitude máxima da onda US (25 a 75%), volume de H₂O₂ (25 a 50 µL), concentração de HNO₃ (25 a 75%) e tempo de aplicação US (5 a 15 min). As respostas ao planejamento foram obtidas no ICP-MS, em concentração (mg kg⁻¹). A partir da correlação positiva entre estas respostas foi feito um planejamento composto central (CCD) e as condições foram otimizadas para 3 mg de amostra, 8 µL de HNO₃ 14 mol L⁻¹, 292 µL de H₂O, 100µL de H₂O₂, amplitude 50 % e tempo de 5 min. Em todos os procedimentos o volume final foi aferido para 2 mL e os extratos centrifugados antes da introdução no equipamento. Para validação do método, avaliou-se a linearidade, LD e LQ, seletividade, veracidade e adição e recuperação dos analitos. Além disso, foi feita uma comparação da digestão assistida por radiação micro-ondas (MW) com MUS para a determinação de Cd por FAAS. O estudo de adição e recuperação apresentou recuperações entre 90 a 110 % nos três níveis de concentração para a maioria dos analitos. Os resultados obtidos pela digestão por MW não apresentaram diferença estatística com o método MUS, ao nível de confiança de 95 % aplicando-se o teste t. De modo geral, os teores dos elementos comprovam que o Cd interfere na translocação dos metais na amostra de manjericão e que, assim como o Cd, a maioria dos metais se acumula na raiz. O método proposto é uma alternativa atrativa para procedimentos cuja quantidade de amostra é um fator limitante, pois mostrou-se afinado com os requerimentos da Química Verde, além de ser rápido, preciso, exato e promissor na determinação multielementar em amostras de tecidos vegetais.

Agradecimentos

CAPES, CNPq, FAPEMIG, PPGQ-UFMG e UERR.

Área: AMB

Nº de Inscrição: 00265

Speciation of Antimony in the Natural Waters: Development of a Device of the Diffusive Gradients in Thin Film using Biomass as Binding Phase

Renata Martins da Silva (PG),¹ Adriano Gonçalves Viana (PQ),¹ Vanessa Egéa dos Anjos (PQ).^{1*}*veanjos@uepg.br; silvarenata.martins@hotmail.com¹Departament of Chemistry, State University of Ponta Grossa – UEPG.

Palavras Chave: Speciation, Inorganic Antimony, DGT, Cyanobacteria, Seaweed.

Highlights

A binding phase containing biomass was evaluated in this work, which employed diffusive gradients in thin film (DGT) device to determine the lability of Sb in the surface water.

Abstract

Antimony is a priority environmental contaminant present in the two oxidation state – Sb(V) and Sb(III) – in natural waters. The behavior, mobility and toxicity of Sb in aquatic environments depend on its speciation. Thus, the development of methods *in situ* for determining the concentration and lability of Sb in natural waters is essential. Diffusive Gradients in Thin Film (DGT) is a dynamic technique for speciation analysis, and it has many advantages. However, the classical binding phase used in the DGT device (Chelex-100) is not adequate for inorganic antimony. Thus, we proposed the development of DGT device for Sb speciation in natural waters using dry biomass as binding phase. Two inactive and biomass in powder form, a cyanobacteria (*Spirulina platensis*) and a seaweed (*Porphyra tenera* – Nori), were evaluated for Sb(III) and Sb(V). Biomass exhibit low cost, wide availability, ease of handling, and can simulate the interaction of Sb with the aquatic biota. The biomass were treated with acid washes (HNO₃), dried (50 °C) and macerated with mortar. The treated biosorbents were characterized by X-ray diffraction, scanning electron microscopy (SEM), infrared spectroscopy technique (FTIR), N₂ physisorption (BET), zeta potential. To evaluate the applicability of biomass as the sorbent phase of Sb, sorption and desorption studies have been carried out in batch and with trivalent and pentavalent Sb (5.0-15.0 µg L⁻¹). In sorption studies, parameters such as biomass concentration, contact time, pH, and ionic strength were studied. The desorption were carried out with acid solution (0.5 - 6.0 mol L⁻¹ of HNO₃ and HCl). The treatment of the biomass altered their superficial structures (SEM) and the surface area (BET). The both sorbents are mesoporous materials containing pores with diameter between 2 and 50 nm. However, the absence of Sb in these materials, and the presence of the same chemical groups present (FTIR) that can interact with Sb was observed. In addition, positive charges were determined in the surface of the biomass by Zeta potential. These charges can be important for the sorption with antimony (oxy-anionic species). In general, the sorbents exhibited excellent sorption properties for Sb(III) and Sb(V). The content of absorption obtained was higher than 70% for all conditions studied. The trend observed was that pH and ionic strength did not significantly influence the interaction with Sb species. These results indicate that both biosorbents can be widely used in several experimental conditions without loss of efficiency. This behavior for inorganic Sb sorption onto both biomass, together with FTIR studies, suggested that the mechanism for biosorption was the formation complexes with protonated functional groups such as carboxylic, hydroxyl and amines. The results of desorption experiments indicated that the extraction with HNO₃ and HCl was sufficient for the recovery of Sb species with values ranged 76% to 100%. Based on the results obtained, it can be concluded that *Porphyra tenera* and *Spirulina platensis* were suitable biosorbents for Sb(III) and Sb(V), acting as binding phase for DGT devices.

Acknowledgments

UEPG, CNPq (448270/2-14-5), CAPES.

Avaliação da contaminação antropogênica por esteróis em sedimentos do Rio Capibaribe nos municípios de Santa Cruz e Toritama/PE

Bruna Ramos de Souza Gomes (PG),¹ **Rebeca dos Santos França (IC)**,² **Adalberto Luis Val (PQ)**,³ **Giovana Anceski Bataglion (PQ)**,² **Alex Souza Moraes (PQ)**,¹ **Jandyson Machado Santos (PQ)**¹

brunaramosquimica@gmail.com; jandyson.machado@ufrpe.br

¹Departamento de Química, UFRPE; ²Departamento de Química, UFAM; ³Instituto Nacional de Pesquisas da Amazônia
Palavras Chave: Biomarcadores geoquímicos, Sedimentos, Contaminação, Esteróis, Rio Capibaribe.

Highlights

Evaluation of anthropogenic contamination by sterols in sediments of the Capibaribe River in Santa Cruz and Toritama/PE cities

- Sterols were used to assess the contamination of Capibaribe River/PE sediments;
- Sterols were quantified by LC/MS-MS;
- The diagnostic ratios of sterols indicated areas with a strong sewage input and fecal contamination.

Resumo/Abstract

Os impactos ambientais ocasionados por atividades antropogênicas tem sido causa frequente dos principais danos nocivos a variados ecossistemas, assim, é cada vez maior a necessidade de estudos que avaliem se há contaminação, qual sua proveniência, como também, o grau de contaminação de diferentes áreas. A identificação e quantificação de biomarcadores ambientais vêm sendo cada vez mais utilizada para avaliar os impactos ambientais em um sistema natural. Em nosso estudo, os biomarcadores da classe dos esteróis foram escolhidos pelo fato de serem amplamente utilizados como marcadores de poluição de esgoto em amostras de sedimentos. Nosso trabalho tem como objetivo realizar a avaliação da contaminação antropogênica, por meio da determinação dos biomarcadores da classe dos esteróis, presentes na matéria orgânica (MO) sedimentar do sistema aquático do Rio Capibaribe na altura dos municípios de Santa Cruz e Toritama/PE, regiões historicamente importantes para o estado devido à presença de intensas atividades urbanas e industriais. Onze amostras foram coletadas no curso principal do Rio (profundidade superficial 0-10 cm), em regiões de baixa e alta ocupação populacional e com visível atividade industrial, principalmente com indústrias têxteis. Após a coleta e o tratamento preliminar dos sedimentos, os mesmos foram submetidos ao procedimento de extração dos compostos orgânicos, como proposto por Frena *et al.* (2016)¹. As análises de esteróis e triterpenoides foram realizadas por cromatografia líquida acoplada à espectrometria de massas sequencial (LC-MS/MS) seguindo o método desenvolvido por Bataglion *et al.* (2015)². Os resultados até aqui obtidos mostram a presença de altas concentrações de coprostanol ($> 100 \text{ ng g}^{-1}$) e valores da razão diagnóstica coprostanol/colesterol $> 0,5$ para a maioria das amostras, sendo considerados sedimentos altamente contaminados por fezes humanas³. Além disso, nessas mesmas amostras foram determinados valores entre 0,5 e 1,0 para a razão diagnóstica coprostanol/(coprostanol + colestanol), sugerindo sedimentos com alta contaminação por esgotos⁴. Avaliando os pontos de coleta no campo de estudo, essas elevadas razões diagnósticas foram obtidas para sedimentos coletados em localizações do Rio que estão nos centros urbanos de ambos os municípios, sendo os menores valores para sedimentos coletados fora das zonas urbanas e/ou industriais. Fazendo a comparação dos resultados obtidos neste trabalho com outros estudos, podemos concluir a partir das razões diagnósticas para os esteróis, que os níveis de contaminação dos sedimentos estudados estão maiores do que foi apresentado, por exemplo, para sedimentos do Complexo Estuarino Cananeia-Iguape/SP⁵, Estuário de Santos/SP² e do Estuário Itajaí-Açu/SC¹. Assim, esse é o primeiro estudo que avaliou a presença de biomarcadores da classe dos esteróis no sistema aquático que compreende o Rio Capibaribe em Pernambuco, mostrando resultados que indicam um alto nível de contaminação ocasionada por atividades antropogênicas.

REFERÊNCIAS: 1. Frena, M. *et al.* *Sci. Total Environ*, 544, 432–438, 2016. / 2. Bataglion, G. A. *et al.* *Anal. Chem*, 87, 7771–7778, 2015. / 3. Frena, M. *et al.* *Marine Pollution Bulletin*, 139, 111–116, 2019. / 4. Leeming *et al.* *Water Sci. Technol.*, 38, 15–22, 1998. / 5. Bataglion, G. A. *et al.* *International Journal of Analytical Chemistry*, Article ID 8361375, 2016.

Agradecimentos/Acknowledgments

CNPq, CAPES, CLQM/UFS, PETROBRAS, LABMAQ/UFRPE, PRPPG/UFRPE

Área: MED

Nº de Inscrição: 00271

Hotspots relationship to affinity and other ligand binding efficiency metrics

Pedro S. Lacerda (PG),¹ Marcelo Santos Castilho (PQ),¹

pslacerda@gmail.com; castilho@ufba.br

¹Faculty of Pharmacy, Federal University of Bahia, Rua Barão de Jeremoabo, s/n - Campus Universitário de Ondina, Ondina, 40170-115, Salvador, Brazil.

Keywords: hotspots, FTmap, ligand efficiency, PDBind.

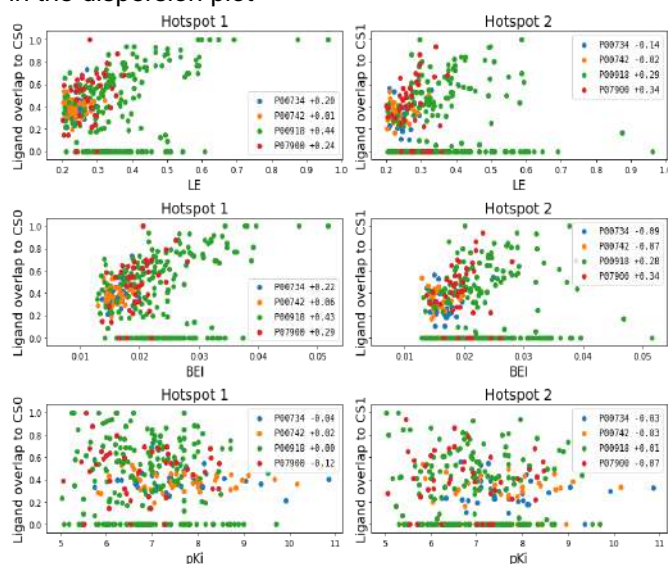
Highlights

Hotspots relationship to affinity and other ligand binding efficiency metrics: hotspots occupancy is correlated to ligand efficiency metrics, but not to ligands affinity. Hotspots occupancy pattern may be useful to guide docked poses analysis.

Resumo/Abstract

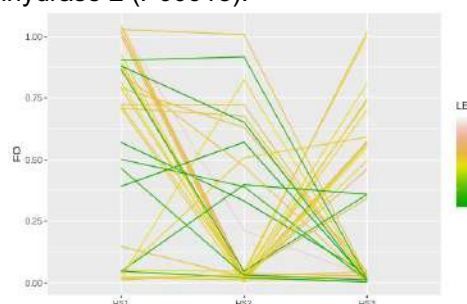
Hotspots can be defined as regions within binding pockets that have a significant contribution to binding affinity. For that reason, their identification is instrumental to identify orthosteric and allosteric sites, as well as to assess if those pockets are druggable. FTMap is a freely available server (<http://ftmap.bu.edu/>) that identifies clusters of probe molecules (Consensus Sites - CS) on the protein surface. Wherever 16 or more probes are found together, there is a hotspot. Kozakov and coworkers (2015) proposed that hotspots occupancy is correlated to ligands potency. In order to investigate this hypothesis, we employed this server to calculate the hotspots for 316 X-ray structures, which were obtained in the presence of ligands that have $K_i < 1\mu\text{M}$ and have at least 25 known ligands, available in PDBBind database (<http://www.pdbbind.org.cn>). Our results contradict Kozakov's hypothesis (R^2 varies from -0.12 to 0.04 for the strongest hotspot), but reveal that ligand efficiency (LE) and binding efficiency index (BEI) are correlated to hotspots occupancy in several cases (up to 0.44 for carbonic anhydrase 2 – UNIPROT code P00918) (Figure 1).

Figure 1: Correlation between affinity (pKi), LE and BEI and predicted hotspots occupancy for 4 proteins, identified by their UNIPROT code. R^2 values are depicted in the dispersion plot



It is reasonable to assume the correlation would improve if more than one hotspot is considered in the analysis. However, compounds with $LE > 0.5$ (orange lines) have a hotspot occupation pattern that differs from those with $LE < 0.15$ (green lines) in Figure 2. Then it is not straightforward to identify which hotspot combination best correlates to LE in advance. Another point that must be considered is whether the combined hotspots lead to a druggable binding site.

Figure 2: Hotspot (HS) occupancy pattern for selected compounds that bind to carbonic anhydrase 2 (P00918):



In order to gain further insight into this matter, the ligands' overlap to druggable combinations of up to 4 hotspots, with at least 5 probes, is being investigated. Our current results suggest that hotspots occupancy pattern is useful to predict ligands complementarity to their binding sites. This information shall be employed to guide docking studies (i.e narrow the search space) and shed light on lead-optimization strategies (i.e increase compounds overlap to hotspots as a strategy to improve LE).

Agradecimentos/Acknowledgments

UFBA, CNPQ and Dr. Sandor Vadja for providing access to Boston University SCC facility

Synthesis, structural and spectroscopy characterization of a new Quercetin-In^{III} metal complex

Vanessa F. Favero (PG),^{1,2} Michele M. da Cruz (PQ)^{1,2}, Leandro O. Biscoli (PQ)^{1,2}, Alice Gonçalves (PQ)^{1,2}, Natalia Ap. Cabeza (PG)^{1,2}, Janaina T. Facco (PG)^{1,2}, Ademir dos Anjos (PQ)^{1,2}.

va_nessa210@hotmail.com; piu_floripa@yahoo.com.br.

¹GBBTEC. Universidade Estadual de Mato Grosso do Sul, Rua Emilio Mascoli, 275, CEP 79950-000, Naviraí;

²PGRN. Universidade Estadual de Mato Grosso do Sul, Cidade Universitária, CEP 79804-970, Dourados.

Palavras Chave: Flavonoids, Indium(III), Bioactivities.

Highlights

Metal complexes obtained from bioactive ligands, such as flavonoids, tend to potentiate their pharmacological properties.

Resumo/Abstract

Flavonoids are one of the most important groups of compounds applied as medicaments because of their varied biological properties, among which the antioxidant, whose most relevant example is quercetin. Quercetin may also be used as a coordination ligand for metal ions which may increase its activities. The indium presents two radioisotopes, In¹¹¹ and In¹¹³, which are important in nuclear medicine, acting in the diagnosis of diseases. Thus, this work describes the synthesis, structural and spectroscopic characterization of a new quercetin-indium (III) metal complex. By the differences in the melting point values and the solubility profile of the compounds (ligand and complex) the complexation process is indicated. Infrared vibration spectroscopy (Fig. 1A) shows the elimination of the $\nu(\text{O-H}_{\text{phenol}})$ band at 3407 cm^{-1} and the displacement of the $\nu(\text{C}=\text{O})$ band at 1666 cm^{-1} , which may indicate that the chelation occurs via phenolic and carbonyl oxygen. Elemental analysis of CHN and conductimetry indicate that the complex was obtained with a 3: 1 ligand/metal stoichiometry, with formula $[\text{In}^{\text{III}}(\text{C}_{15}\text{H}_{10}\text{O}_7)_3] \cdot 8\text{H}_2\text{O}$ and molecular weight $1162.64\text{ g mol}^{-1}$. The electron absorption profile after coordination shows (Fig. 1B) the appearance of a new band with maximum absorption at 455 nm, possibly attributed to: i) electronic redistribution between the ligand and the In^{III} ion, making a system of extended π bonds or; ii) to an $\pi \rightarrow \pi^*$ electronic process, which is attributed to the color of the compound, which absorbs in the blue region of the electromagnetic spectrum. The results indicate the success in the synthesis of the new coordination compound between the indium (III) ion and the flavonoid quercetin, which may present future bioactivities of pharmacological interest.

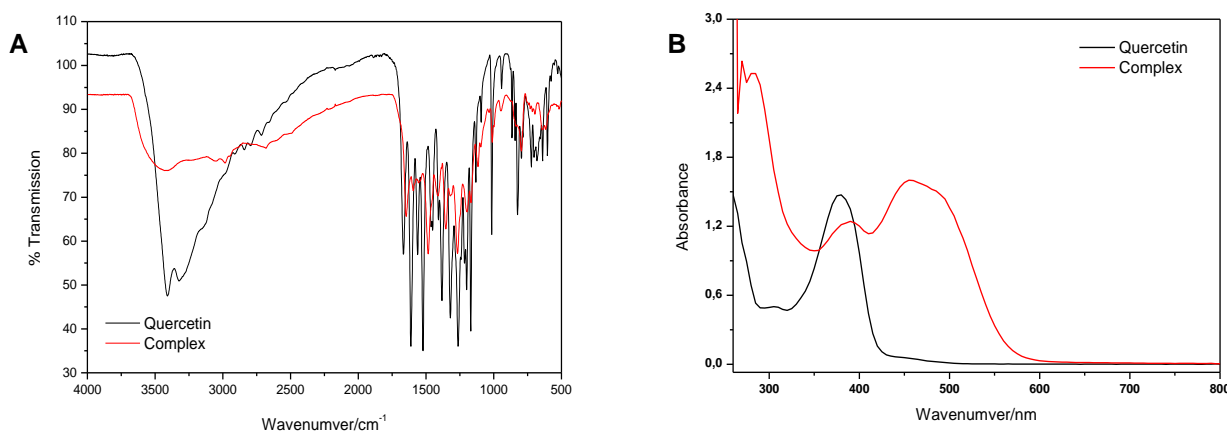


Fig 1: Spectra of quercetin and complex: (A) FT-IR and (B) UV-Vis.

Desenvolvimento de dispositivos analíticos em plataformas de papel com caneta 3D para detecção de nitrito e glicose em amostras clínicas

Lucas Rodrigues de Sousa (PG),¹ Lucas da Costa Duarte (PG),¹ Wendell K. T. Coltro (PQ),^{1,2}

l.rod.sousa@gmail.com

¹Instituto de Química, UFG, Goiânia, GO; ²Instituto Nacional de Ciência e Tecnologia em Bioanalítica (INCTBio), Campinas, SP.

Palavras Chave: Microfluídica, papel, detecção colorimétrica, caneta 3D.

Development of analytical devices on paper platforms with 3D pen for detection of nitrite and glucose in clinical samples

This paper presents a methodology for the fabrication of microfluidic paper-based device using a polymer of a 3D pen for confection of the hydrophobic barriers. Once the parameters of zone diameter, channel width and chemical resistance was optimized, the applicability of these devices was evaluated by the colorimetric detection of nitrite in saliva of patients with periodontitis and by the colorimetric detection of nitrite and glucose in artificial human serum, saliva and artificial urine. The detection was performed using a smartphone with an application designed for this type of detection.

Resumo

Os sistemas fabricados em plataformas de papel tem recebido destaque como alternativa instrumental devido sua simplicidade operacional, versatilidade e baixo custo.¹ Associado a esses dispositivos, a detecção colorimétrica tem sido utilizada através de diferentes ferramentas de captura de imagem como scanners e smartphones, por exemplo. Os dispositivos de papel (μ PADS) podem ser fabricados por diferentes metodologias incluindo a impressão a cera e corte a laser.² Este trabalho apresenta uma metodologia de fabricação alternativa utilizando uma caneta 3D, que contém um fotopolímero que após o processo de cura induzido por uma fonte luminosa portátil, permite a confecção de barreiras hidrofóbicas no papel. Os dispositivos foram fabricados pela estampagem manual dos canais com auxílios de moldes impressos em uma impressora 3D e com a caneta 3D em papel cromatográfico. O diâmetro das microzonas de detecção e a largura das barreiras para o transporte microfluídico foram otimizados, bem como também a resistência química das barreiras poliméricas foi avaliada na presença de vários solventes orgânicos e inorgânicos. A aplicabilidade desses dispositivos foi avaliada pela determinação de nitrito em amostras de saliva de pacientes diagnosticados com periodontite e de pacientes saudáveis. Além disso, também foram feitas análises simultâneas de nitrito e glicose em amostras artificiais de soro humano, urina e saliva. As análises de nitrito e glicose foram realizadas por detecção colorimétrica utilizando-se os reagentes sulfanilamida e n-(1-naftil)-etilenodiamina para detecção de nitrito e uma mistura das enzimas glicose oxidase e peroxidase de rábano, ácido 3,5-dicloro-2-hidroxibenzenosulfônico (DHBS), 4-aminoantipirina (AAP) para glicose. O desempenho analítico foi avaliado por uma curva de calibração obtida através do aplicativo colorimétrico PhotoMetrix® obtendo-se uma boa linearidade nas faixas de concentrações analisadas (0 a 1000 μ mol/L). O limite de detecção (LD) calculado pela curva analítica foi de 6,28 μ mol/L para o nitrito e 166,88 μ mol/L para glicose. Para pacientes diagnosticados com periodontite obteve-se valores de concentração de nitrito entre 302 e 315 μ mol/L, estando coerente com resultados obtidos pelo método oficial. A exatidão do método foi avaliada através de ensaios de recuperação, obtendo valores entre 105 e 118% para o nitrito e 98 e 104% para glicose em três diferentes níveis de concentração. Diante do exposto, os dispositivos desenvolvidos em papel utilizando a caneta 3D apresentaram boa funcionalidade como plataformas *point-of-care*, além da acessibilidade de fabricação. Para etapas futuras as análises de outros analitos serão realizadas.



Figura 1. Esquema sequencial de fabricação dos dispositivos e resposta colorimétrica.

1. Martinez, A. W., et al., *Angew. Chem. Int. Ed.*, 2007, 46, 1318-1320.

2. Cate, D. M., et al, *Anal. Chem.* 2015, 87, 19-43.

Agradecimentos/Acknowledgments

CNPq, CAPES, FAPEG, INCTBio.

42ª Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química: Eixos Mobilizadores em Química

Área: EDU

Nº de Inscrição: 00276

Experimentando Ciência: formação continuada de professores(as), da teoria à prática.

Bruna G. Dias (IC),^{1*} Amanda P. Serpe (IC),¹ Débora C. Santos (IC),¹ Jaqueline Ramos (IC),¹ Joana C. Biazzi (IC),¹ João G. Inácio (IC),¹ Joelma T. Machado (IC),¹ Laís Juliatto (IC),¹ Leticia A. Silva (IC),¹ Leticia C. Silva (IC),¹ Leticia Tereski (IC),¹ Milena M. Sachi (IC),¹ Renata Hellinger (IC),¹ Yana P. Santos (IC),¹ Francisco A. Marques (PQ).¹

b.gomesdias@ufpr.br

¹Departamento de Química, Universidade Federal do Paraná.

Palavras Chave: *Formação continuada, Experimentação, Ciência, Ensino, Extensão, Educação pública.*

Highlights

Experiencing Science: continuing teacher formation, from theory to practice.
Teaching Science by Experimentation. Scientific divulgation: getting university and external community closer. Continuing teacher formation as a process of constant improvement.

Resumo/Abstract

O projeto "Experimentando Ciência", elaborado pelo PET Química da UFPR, surgiu a partir do projeto "Cientistas na Escola" desenvolvido junto à Secretaria Municipal de Educação de Curitiba (SMEC). Ao levar para as escolas experimentos relacionados com o cotidiano das crianças e vinculados com o conteúdo programático do ensino fundamental, o grupo constatou a demanda pela qualificação das(os) professoras(es) que não utilizavam a estratégia de explorar experimentos como ferramenta adicional para o ensino de ciências. A experimentação de forma contextualizada e problematizada é de extrema importância para o ensino de ciências e é essencial que o professor tenha clareza sobre o papel da experimentação, a qual se trata de uma iniciativa que possibilita a relação entre fenômenos e teorias¹. É a partir de reflexões críticas que o educador consegue criar relações entre as partes teóricas, práticas e pedagógicas. Assim, a formação continuada parte da necessidade de contínuo aprimoramento profissional e de reflexões críticas sobre a própria prática pedagógica². A partir disto, o curso foi dividido em módulo presencial e à distância, assim buscando uma análise conjunta dos desafios da prática docente e estratégias de ensino. Uma apostila foi confeccionada como material de apoio, contendo experimentos e explicações, sendo que os experimentos selecionados englobaram temas relacionados com os conteúdos didáticos do ensino fundamental. Enquanto forma de avaliação, foi solicitado às professoras para que desenvolvessem atividades experimentais em sala de aula e que as mesmas fossem encaminhadas para o grupo. Como primeira avaliação do projeto, foi disponibilizado às professoras um questionário. Os resultados expressaram um ótimo efeito do curso para com a realidade das professoras, oferecendo maior confiança e segurança para desenvolverem as atividades de forma adequada. Alguns relatos foram: professora A - "O curso é esclarecedor, de linguagem simples e planejado com coerência à realidade da escola."; Professora B - "O curso tem mostrado a praticidade de aplicar ciência com pequenos". Embora tenha sido oferecido pela primeira vez, o "Experimentando Ciência" foi a atividade mais solicitada pelos(as) professores(as) do ensino fundamental em pesquisa realizada pela SMEC ao final de 2018 e terá continuidade em 2019.

¹ SILVA, R. R.; MACHADO, P. F. L.; TUNES, E. Experimentar sem medo de errar. In: SANTOS, W.L.; MALDANER, O. A.: Ensino de Química em foco. Ijuí (RS): Unijuí, 2010. p. 231-261

² MACHADO, B. C.T.; FARINHA, M. A. R.; DEIMLING, N. N. M.; O que dizem os artigos da revista Química Nova na Escola sobre a formação inicial e continuada de professores de Química: algumas considerações. In: CARGIN, C.; DEIMLING, N. N. M.; FONTES, A. S.: A formação de professores em foco. Assis, SP. Storbem, 2013. p. 96-104

Agradecimentos/Acknowledgments

À UFPR, particularmente ao Departamento de Química e a PROGRAD. Ao MEC e à SMEC.

Synthesis of Lawsone derivatives using ionic liquid

Andreia Ribeiro dos Santos (PG),^{1*} Luciana Machado Ramos (PQ),¹ Jhonathan Renner N. dos Santos,¹ (PG), Juliana Gonzaga de Moraes (PG). andreiasantos2494@gmail.com

¹Universidade Estadual de Goiás

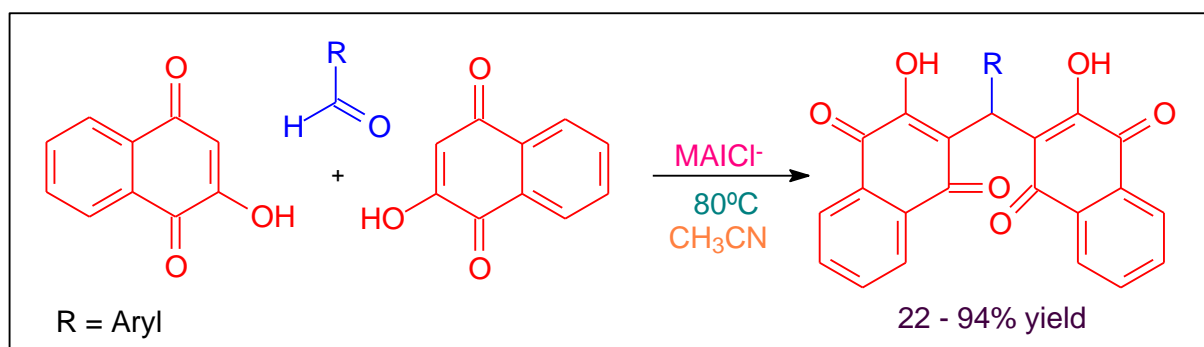
Palavras Chave: *Lawsone, Liquid ionic, multicomponent reaction.*

Highlights

Compounds derived from lawsone via multicomponent reactions employing ionic liquids as a catalytic medium, in order to develop biologically active molecules.

Resumo/Abstract

Lawsone or 2-Hydroxy-1,4-naphthoquinone constitute the natural and synthetic naphthoquinone species of the quinone class. These organic compounds have several biological activities: antioxidant, antitumor, anti-inflammatory and antiviral^[1,2]. The synthesis of these compounds was carried out via multicomponent reaction (MCR), this methodology that presents flexibility in the production of compounds with several functional groups. Thus, the following objective work the synthesis of derivatives of lawsone, according to Scheme 1 employing different aryl groups.



Scheme 1. General route for the synthesis of benzoxanthene derivatives.

Several factors were evaluated: catalyst, solvent, amount of catalyst, temperature and reagent concentration. The optimized reaction conditions (Scheme 1) which obtained the best yields were obtained using acetonitrile (CH₃CN) as the solvent and the ionic liquid catalyst MAI·Cl⁻. The use of ionic liquids as a catalytic medium presents an interesting alternative from the point of view environmental, since they are recyclable compounds, non flammable and of low toxicity^[3].

These obtained compounds showed yields of 22-94% and are being characterized by IR, ¹H NMR, ¹³C NMR and MS. For further analysis of the synthetic route, other reaction conditions and biological assays of the synthetic derivatives will be evaluated.

References

- [1] Mahal, K., Ahmad, A., Schmitt, F., Lockhauserbäumer, J., Starz, K., Pradhan, R., Ersfeld, K. *European Journal of Medicinal Chemistry*. **2017**, v. 126, p. 421-431.
- [2] Jordao, A. K., Vargas, M. D., Pinto, A. C., da Silva, F. D. C., Ferreira, V. F. *Lawsone in organic synthesis*. *RSC Advances*. **2015**, v. 5, n. 83, p. 67909-67943.
- [3] El-Nagar, R. A., Nessim, M., El-Wahab, A. A., Ibrahim, R., & Faramawy, S. *Journal of Molecular Liquids*. **2017** v. 237, p. 484-489.

Ca²⁺/serpentinite: a catalyst for the transesterification reaction of vegetable oils

Sara Silveira Vieira (PQ),* Benson A. Vieira (IC), Anna Júlia F. Santos(IC), Ana Paula de C. Teixeira (PQ),¹ Maria Helena Araújo (PQ), Rochel Montero Iago (PQ).

sarasilveiravieira@yahoo.com.br

Departamento de Química, Universidade Federal de Minas Gerais

Keywords: Ca²⁺/Mg₃Si₂O₅(OH)₄, Impregnation, Transesterification, Heterogeneous catalysis.

Highlights

We have developed an efficient heterogeneous catalyst for biodiesel production. We have studied aspects of preparation, characterization and commercially applicable environmental catalysts.

Abstract

The intercalation of metal cations in serpentinite is a potentially versatile mild route to prepare different metal oxides for a variety of applications.^{1,2} Solid state reaction of serpentinite Mg₃Si₂O₅(OH)₄ with Ca²⁺ was investigated to produce new Ca_xSiO_y oxide phases with basic properties for application in catalysis. XRD showed that Ca(OH)₂ impregnated on serpentinite, treated at 700 °C, led to the formation of new crystalline phases, Ca₃SiO₅ and Ca₂SiO₄ (Fig 1a). Temperature programmed reaction and desorption experiments with 20Ca₇₀₀ and 10Ca₇₀₀ combined with XRD results suggested a strong basicity of the materials with high CO₂ uptake likely due to diffusion and interaction with the basic sites in the material structure. These materials were tested as catalysts for the transesterification of soybean oil with methanol. These reactions were conducted in the molar ratio of 1:9, using 5% catalyst at temperatures of 60 and 100 °C (Fig 1b). For 20Ca₇₀₀, at 60 °C, the reaction reached equilibrium at ca. 60 min with maximum conversion of 45%. On the other hand, at 100 °C the conversion further increased to 98% reaching equilibrium at ca. 180 min.

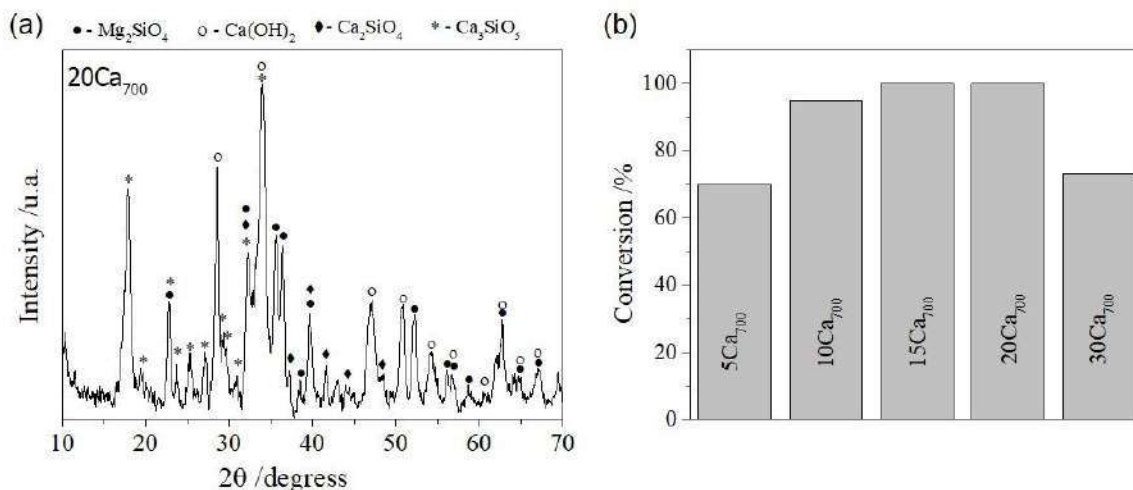


Fig. 1. (a) X-ray diffraction patterns. (b) Transesterification results of soybean oil with methanol (molar ratio of 1:9, 5wt% catalyst at 100 °C for 4 h).

Acknowledgments

The authors thank Pedras Congonhas LTDA for the samples, INCT MIDAS, CAPES, FAPEMIG and CNPq for financial support and scholarships granted.

¹ Paz *et al.* J. Braz. Chem. Soc. 29 (2018) 1823-1829.

² Ballotin *et al.* J. Mol. Catal. A Chem. 422 (2016) 258-265.

Imidazol como co-catalisador na oxidação de ciclohexano mediada pelo catalisador metaloporfirínico [Mn^{III}T(2,6CFPP)Cl]

Marina H. M. Silva (IC),^{1*} Alexandre M. Meireles (PG),² Dayse C. S. Martins (PQ),^{2}**

***marina.helena.1993@gmail.com; **daysecsm@yahoo.com.br**

¹Departamento de Química, CEFET/MG; ²Departamento de Química, UFMG

Palavras Chave: Catálise, Hidroxilação, Porphirinas de manganês, Ligante axial, Constantes de formação.

Highlights

Imidazole as co-catalyst for cyclohexane oxidation mediated by metalloporphyrins catalyst [Mn^{III}(2,6CFPP)Cl]. Spectrophotometric titrations were carried out to investigate the axial coordination equilibrium between imidazole and porphyrin. A higher catalytic efficiency in the PhIO systems was achieved with the use of imidazole.

Resumo

O grupo prostético dos citocromos P450 é formado pela ligação entre o íon ferro central do grupo heme e um átomo de enxofre (de um resíduo de cisteína), ou seja, o grupo proximal age como um ligante axial (L) do heme. Isso desperta o interesse em investigações sobre o efeito de ligantes axiais nos modelos biomiméticos envolvendo metaloporfirinas, porque esses ligantes (co-catalisadores) tem a capacidade de se coordenar ao centro metálico, aumentando a eficiência do catalisador. No presente trabalho, a proposta envolve a avaliação do efeito do ligante axial na oxidação de ciclohexano por uma porfirina de manganês (Mn^{III}P), [Mn^{III}(T2,6CFPP)IO₃] (Fig. 1a) na presença do ligante imidazol (Fig. 1b). Realizaram-se titulações espectrofotométrica na região do UV-Vis e, para análise das espécies de coordenação formadas, foi utilizado o programa computacional SQUAD. As modificações espectrais foram acompanhadas a cada adição de alíquota de solução de imidazol. Inicialmente, observou-se um deslocamento hipocrômico da banda Soret e, em seguida, um deslocamento hipsocrômico dessa banda de maior intensidade. Pode-se sugerir que ocorra a coordenação do imidazol à Mn-porfirina, por meio do estabelecimento de um equilíbrio entre as espécies Mn^{III}P, Mn^{III}P(L) e Mn^{III}P(L)₂ com constantes de formação das espécies com 1 ou 2 ligantes L, iguais a 2,45 x 10³ e 6,94 x 10³, respectivamente.

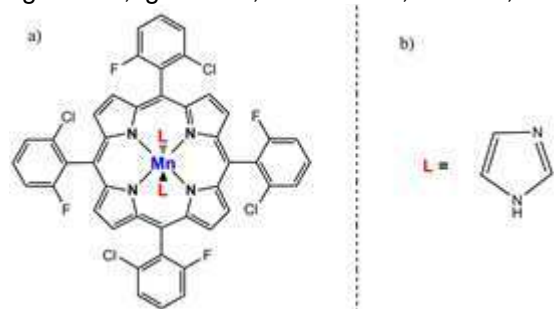


Figura 1. Estrutura da Mn^{III}P estudada (a) e do imidazol (b).

Neste trabalho, o PhIO foi utilizado como oxidante nas reações de oxidação do ciclohexano por Mn^{III}P, na presença ou ausência de imidazol, em dois solventes diferentes. As reações de oxidação do ciclohexano por PhIO, em diclorometano ou etanol, levaram à obtenção do ciclohexanol (C-ol) como produto principal. Nas reações em diclorometano, observou-se um aumento do rendimento do C-ol, na presença de imidazol (de 29 para 82%). Esse aumento no rendimento pode ser justificado pela coordenação do imidazol ao centro metálico do catalisador metaloporfirínico facilitando a formação da espécie [Mn^V(O)P].

Nas reações em etanol, a adição de imidazol ao sistema promoveu um aumento mais discreto na formação de C-ol (de 20% para 26%). O etanol pode competir com o co-catalisador pelo sítio ativo dos catalisadores. O solvente também pode inativá-los, por meio de ligações de hidrogênio, impedindo a coordenação do co-catalisador ao centro metálico. Quanto à destruição, pode-se perceber que no sistema com diclorometano o catalisador precipitou parcialmente no meio de reação. Devido à presença de sólido de coloração verde escura nos frascos de reação, não foi possível proceder a sua quantificação. Nas reações realizadas em etanol, o grau de destruição do catalisador também não pode ser determinado, visto que o co-catalisador pode encontrar-se coordenado ao átomo de manganês, alterando o valor do coeficiente de absorvidade molar da banda Soret da Mn^{III}P.

Agradecimentos

CAPES, CNPq e Fapemig

Área: **MAT**Inscrição: **00282**

Anti-scaling performance of SLIPS produced onto electrochemically-textured 1020 carbon steel

Maria de Fátima B.Sousa (PQ), Celso A. Bertran (PQ),

mfabr@igq.unicamo.br

Instituto de Química, Universidade Estadual de Campinas

Keywords: (SLIPS, Anti Scaling Surface, Electrochemical Texturing, 1020 Carbon Steel).

Highlights

SLIPS are designed surfaces with self-regeneration and self-cleaning properties.
SLIPS are based on the embedding of a lubricant non-polar fluid in textured or porous material.

Resumo/Abstract

The formation of scale from the deposition of inorganic salts is a major problem for ducts and equipment in the oil and gas industry, leading to operational complications and affecting production efficiency, therefore the development of surfaces called SLIPS (Slippery Liquid Infused Porous Surface) that may be able to inhibit this phenomenon is a subject worth investigation. These type of surfaces have the ability to repel aqueous and / or oily liquids and have rather unique properties, eg self-regeneration and self-cleaning, which makes them very promising for a wide range of applications [1]. In order to produce SLIPS with adequate performance, it is first necessary to develop a textured hydrophobic surface that can be impregnated with low surface tension lubricating liquids. The development of SLIPS from substrates with adequate mechanical resistance to field conditions in oil and gas industry is crucial in view of the abrasion to which equipment and pipelines are subjected during operation. This work will present the results related to evaluation of electrochemically textured 1020 carbon steel, functionalized with 3,3,4,4,5,5,6,6,7,7,8 acid, 8,9,9,10,10-heptafluorodecylphosphonic acid (HDFDPA), the following formation of one SLIPS with Krytox oil, and the performance of this modified material against scaling brine. The obtained results were promising, since the modified material presented a much lower degree of fouling than the unmodified substrate (Figure 1).

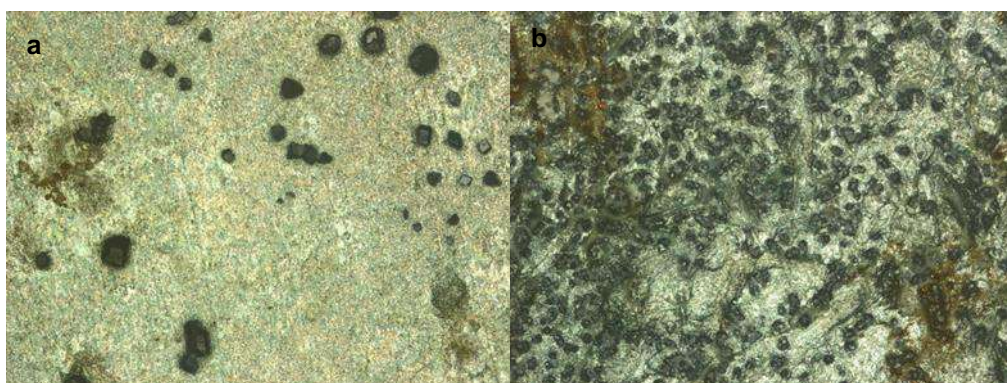


Figure 1 – Optical microscopy images of carbon steel SLIPS (a) and unmodified carbon steel (b) after 3 h immersion in scaling brine.

[1] Wong, T. S.; Kang, S. H.; Tang S. K. Y.; Smythe, E. J.; Hatton, B. D.; Grinthal, A.; Aizenberg, J.; Nature, 2011, 477, 443 - 447.

Área: ANA

Nº de Inscrição: 00283

Caracterização química de produtos do coprocessamento de bio-óleo e resíduo de vácuo por desasfaltação a solvente

*Nathália S. Pontes (PG)¹, Raquel V. S. Silva (PQ)¹, Victor L. Ximenes (PG)², Andrea R. Pinho (PQ)²,
*Débora A. Azevedo (PQ)¹.

nathaliadspontes@gmail.com; debora@iq.ufrj.br

¹Laboratório de Geoquímica Orgânica Molecular e Ambiental (LAGOA-LADETEC), Instituto de Química, Rio de Janeiro, RJ; ²PETROBRAS, Centro de Pesquisas e Desenvolvimento Leopoldo A. Miguez de Mello (CENPES), Ilha do Fundão, Rio de Janeiro.

Palavras Chave: Bio-óleo, Resíduo de vácuo, GC×GC-TOFMS, Orbitrap-MS.

Highlights

Chemical characterization of coprocessed products from bio-oil and vacuum residue in a solvent deasphalting process. Bio-oil and vacuum residue introduced into the refining chain. The fractions were analyzed by GC×GC-TOFMS and Orbitrap-MS. The chemical characterization is essential to define the uses in a refinery.

Resumo/Abstract

As grandes mudanças ambientais e climáticas que vem ocorrendo no mundo, incentivam a procura por substituintes dos combustíveis fósseis e, a biomassa vem ganhando destaque como uma fonte renovável de energia. Assim, o uso de biomassa na indústria de refino é uma opção promissora, podendo reduzir o uso de petróleo. O bio-óleo produzido a partir de biomassa é uma mistura complexa de várias substâncias orgânicas, além de ser uma matéria-prima renovável, sustentável e de baixo custo¹. Desta forma, bio-óleo e resíduo de vácuo foram utilizados como carga em um processo de desasfaltação a solvente, sendo obtidas duas frações: óleo desasfaltado (ODES) e resíduo asfáltico (RASf)². Este trabalho trata da caracterização química destas frações utilizando cromatografia gasosa bidimensional abrangente acoplada a espectrometria de massas por tempo de voo (GC×GC-TOFMS) e espectrometria de massas de alta resolução do tipo Orbitrap (Orbitrap-MS), visando definir a melhor aplicação futura do uso de bio-óleo em uma refinaria. O conjunto de colunas utilizado para as análises por GC×GC-TOFMS foram uma DB-5 na primeira dimensão (¹D) e uma DB-17 na segunda dimensão (²D). As condições cromatográficas utilizadas foram avaliadas de modo a melhorar a separação e a qualidade dos produtos obtidos e o processamento dos dados foi feito com seleção dos picos de razão sinal/ruído (S/N) superior a 500 e apenas os compostos com espectros de massas com similaridade maior que 80% foram considerados. As análises por Orbitrap-MS foram feitas com ionização do tipo Eletrospray nos dois modos, positivo e negativo. Os espectros de massas foram adquiridos pelo programa Xcalibur 2.2 (Thermo Scientific, Bremen, Alemanha) e o processamento dos dados foi feito programa Composer 1.5 (Sierra Analytics, USA), onde as restrições composicionais foram ajustadas com erro máximo de 5 ppm. Nas análises por GC×GC-TOFMS foi identificada uma série homóloga de parafinas de cadeia longa (C₁₈-C₃₂) na fração ODES que além disso, é rica em alquilbenzenos. A fração RASf tem a classe dos benzenodióis como majoritária, enquanto os fenóis são abundantes em ambas as frações. As análises feitas por Orbitrap-MS no modo positivo possibilitaram a identificação de classes nitrogenadas (N e N₂), oxigenadas (O₃), sulfuradas (S) e mistas (SO, SO₂, SO₃). Já as classes oxigenadas O₂, O₃, O₄ e a mista N₂O foram detectadas nas análises no modo negativo. Assim, a caracterização química dessas frações se faz importante na determinação do processo em refinaria no qual estas frações serão melhor aplicadas.

¹ XIU, S.; SHAHBAZI, A. Bio-oil production and upgrading research: A review. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, v.16, p. 4406-4414, 2012.

² XIMENES, V. L. Coprocessamento de bio-óleo e resíduo de vácuo no processo de desasfaltação a solvente. 2017. 157f. Dissertação (Mestrado em Engenharia de Biocombustíveis e Petroquímica) – Escola de Química, Universidade Federal do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, 2017.

Agradecimentos/Acknowledgments

Os autores agradecem ao CENPES/PETROBRAS, CAPES, FAPERJ, CNPQ, PGQU (IQ-UFRJ) e ao LADETEC-IQ/UFRJ pelo apoio e financiamento do trabalho.

Área: ANA

Nº de Inscrição: 00284

Evaluation of normal versus reversed phase columns set for pyrolysis bio-oil analysis via GC×GC-TOFMS

Raquel V.S. Silva (PQ),^{1*} Vinícius B. Pereira (IC),¹ Gilberto A. Romeiro (PQ),² Débora A. Azevedo (PQ).¹

raquelvieira@iq.ufrj.br

¹Laboratório de Geoquímica Orgânica Molecular e Ambiental (LAGOA-LADETEC), Instituto de Química, UFRJ;

²Laboratório de Síntese, Cromatografia e Meio Ambiente (SINCROMA), Instituto de Química, UFF.

Palavras Chave: GC×GC-TOFMS, column set, slow pyrolysis, bio-oil.

Highlights

Bio-oil was analysed by GC×GC-TOFMS. Normal and reverse phase column set were compared to obtain a better identification. For bio-oil analysis, a reversed phase column combination was more adequate.

Resumo/Abstract

Bio-oil is a complex mixture of organic compounds (mainly oxygenated) and its composition depends of the raw material and the parameters used, leading to different applications.¹ In this way, a more complete structural elucidation is essential to determine the best application or treatment of bio-oil. Comprehensive two-dimensional gas chromatography with time-of-flight mass spectrometry (GC×GC-TOFMS) is a widely applied analytical approach for the qualitative investigation of bio-oils due to the greater capacity of separation and resolution. The most traditional form of orthogonal separation in bio-oil analyses by GC×GC is the use of a low polarity column in the first dimension and a mid-polar column in the second dimension,²⁻⁵ and an evaluation of the best column configuration for the complete analysis of bio-oils has never been described before in the literature. This work aims to evaluate the effects and benefits of normal and reverse phase column set to improve and optimize the separation, and consequently, obtain a more accurate identification of all organic compounds that constitute bio-oils via GC×GC-TOFMS.

In the total ion chromatograms of crambe bio-oil using normal and reversed phase column set, some homologous series were identified, and the major compound families are: alkanes, olefins, alkylbenzenes, acids, nitriles and phenols. The elution order of these groups for the second dimension is inverse. In general, the reverse phase combination enhances the best separation and more dispersed distribution due to a longer retention on the second dimension, mainly of the alkane and olefin isomers present in greater quantity (67.5% of the total identified). For phenols, however, it was observed a lower separation. These aromatic compounds are compressed in a smaller region of the total separation space, but the use of TOFMS as a third dimension of separation provides a clear identification. The better distribution in the chromatographic plane using reversed phase column set due the increment of resolution promoted a significant increase in the number of peaks detected and for the quantitative analysis, shows significant advantages in evaluated regarding the efficiency of the group-type separation and the accuracy of the quantification. Furthermore, the sensitivity for the quantification of polar compounds improved due to smaller peak width.

This study underlines how important it is to carefully select the chromatographic conditions to adapt the separation system to sample dimensionality. The works usually report orthogonality as a fundamental principle for the structuring of chemical classes in chromatographic plan and increased resolution and selectivity in GC×GC.⁶ However, the efficiency of the separation depends on the type of sample and the column set used in the first and second dimensions and not necessarily on the orthogonality of the two-dimensional system. For crambe seed bio-oil, the use of a polar/non-polar column set was more adequate.

¹ Guedes R.E. et al., Journal of Analytical and Applied Pyrolysis 129 (2018), p. 134–149.

² Silva R.V.S. et al., Journal of Analytical and Applied Pyrolysis 106 (2014), p. 152–159.

³ Barros J.A.S. et al., Microchemical Journal 137(2018), p. 30-36.

⁴ Toraman H.E et al., Journal of Chromatography A 1359 (2014), p. 237–246.

⁵ Silva R.V.S. et al., Talanta 164 (2017), p. 626–635.

⁶ Ryan D. et al., Journal of Chromatography A 1071 (2005), p. 47-53.

Agradecimentos/Acknowledgments

The authors thank National Council for Scientific and Technological Development [Grant number 305046/2015-2 PQ_1C] and Carlos Chagas Filho Foundation for Research Support of the State of Rio de Janeiro [Grant number E-26/202.783/2017] for fellowships and financial support.

Use of cellulose nanocrystals with phosphate groups as template to produce bioactive glass scaffolds

Carina O. Fontes (IC),¹Mariana de O. Silva (PG),²Celso A. Bertran (PQ).¹

c168562@dac.unicamp.br

¹Departamento de Físico-Química, Instituto de Química, Unicamp ²Department of Chemistry, University of Oxford.

PalavrasChave: Cellulose nanocrystal, Bioactive glass, Scaffolds.

Highlights

Use of the self-organization of cellulose nanocrystals, containing phosphate on its surface. As a template for the production of a bioactive glass scaffolds.

Abstract

Cellulose nanocrystals (CNCs) have properties that highlight them from other materials originated from biomass. In addition to their structural properties, such as the self-assembling ability, they have low toxicity and are biodegradable.¹ These characteristics allow their use as a template for the synthesis of several porous materials, including biocompatible scaffolds.¹ One of the obstacles found in the use of CNCs as a porous agent is the presence of sulfate groups on its surface, contaminating the bioactive glass.² This problem can be overcome by using phosphoric acid instead of sulfuric to hydrolyze cellulose and produce the CNCs. Also the presence of phosphate groups helps in the binding of phosphorus and calcium to the structure of the bioactive glass. The self-assembled surface of the CNCs was influenced by several parameters, such as silica/CNCs ratio, the modification of the CNCs surface charge with CTAB, the centrifugal force "g" the number of washes during centrifugation and the drying method². The results showed that the CNCs self-assembling process involves two mechanisms: first the formation of pore walls, due to the assembly of chiral nematic phases; second the flocculation of these CNCs aggregates, resulting in macroscopic structures that were copied by the silica nanoparticles, generating a result close to that obtained using sulphate CNCs, as shown in Figure 1.

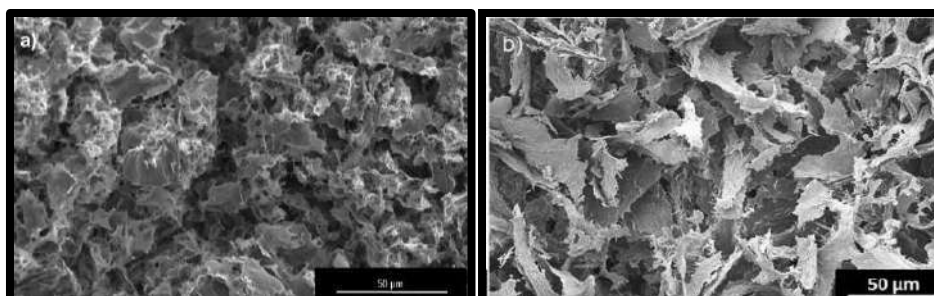


Figure 1. a) FESEM images of the material prepared by the silica dispersion / CNCs with phosphate on the surface. b) FESEM images of the material prepared by the silica dispersion / CNCs with sulfate on the surface.²

¹ De Lima, R.; Feitosa, L. O.; Maruyama, C. R.; Barga, M.A.; Yamawaki, P. C.; Vieira, I. J. Teixeira, E. M.; Correa, A.C.; Caparelli Mattoso, L. H.; Fraceto, L.F. *Int J. Nanomedicine* 2012, 7, 3555-3565

² Longo B. Ch. *Síntese de Scaffolds de Vidros Bioativos Utilizando Nanocristais de Celulose como Template*. Campinas, 2018. 93p. Dissertação [Mestrado] – Instituto de Química, Universidade Estadual de Campinas.

Acknowledgments



Área: ELE

Nº de Inscrição: 00286

Electrochemical characterization of PEDOT and PEDOT-AuNPs modified electrodes and its application as an impedimetric sensor

Débora P. Soares (IC),¹ Ana Letícia Soares (PG)^{1*}, Luis F. Marchesi², Marcio Vidotti (PQ)¹.

deborapaulussoares@gmail.com; analeticiasoaresals@gmail.com; mvidotti@gmail.com

¹Departamento de Química, UFPR.

² Universidade Tecnológica Federal do Paraná, Ponta Grossa, PR, Brazil

Palavras Chave: *impedimetric sensor, eletrochemical impedance spectroscopy (EIS), PEDOT, AuNPs.*

Highlights

This study aimed to characterize the electrochemically modified electrodes of PEDOT and to study their electrocatalytic properties aiming the development of an impedimetric sensor for detection of CEC.

Resumo/Abstract

Poly(3,4 - ethylenedioxythiophene) (PEDOT), is a conducting polymer with interesting electrochemical behavior and excellent physical and chemical properties.¹ Due to the different chemical structure in comparison with other conductive polymers the PEDOT can be applied to detection of several analytes, as for example, contaminants of emerging concern (CEC). Therefore, it is required a straightforward and simple methodology for the detection of these compounds, to do so, the conductive polymers doped with metal nanoparticles are very attractive for the development of sensors. The development of this devices has as basic premise the evaluation of interfacial and superficial processes, consequently it is necessary an electrochemical characterization of the modified electrode studied and its behavior in the presence of the analyte. For this reason the electrochemical impedance spectroscopy (EIS) contributes to this development because it allows obtaining a large number of information in a single experiment.² Recently, studies have showed that the application of EIS as a detection method allows a linear response with the analyte concentration increase.³ In this way, this study aimed to characterize electrochemically the steel mesh electrodes modified with PEDOT and PEDOT-AuNPs to study its electrochemical properties intending the development of an impedimetric sensor for the detection of Butylparaben and Triclosan.

Both electrodes, PEDOT and PEDOT-AuNPs did not show electrochemical response for Butylparaben and Triclosan, however the in the voltammetric response occur some changes that induce to say that there are morphology changes. So to better understand the interfacial process, EIS measure was done and it was observed a linear increase of the R_{ct} values with analyte additions. This behavior is characteristic of an impedimetric sensor, and the sensitivity values were obtained. The metallic nanoparticles promote more amounts of active sites thus the interaction between analytes molecules with electrode surface is more effective. The higher sensitivity was obtained with Triclosan in comparison with Butylparaben, possibly due to the interaction between the chlorine atoms in the analyte structure with the sulfur atom in the polymer structure. Besides that also considering the n_{dl} variation values, can be confirmed the morphology changes due to the adsorption of Butylparaben and Triclosan onto electrode surface, and that the metallic nanoparticles promote a rougher morphology than only PEDOT. The polymer degradation also was studied by EIS in which it was done one measure with interval of five minutes, with and without the analytes. In the course of measures occurred an increase in the R_{ct} values, at the same time we can observe a decrease in the Q_f values, this behavior can considered characteristic of morphological degradation, because the charge transfer is hampered together with the loss of charge intercalation capacity. Finally, this work showed a remarkable capacity to develop sensors to CEC detection using PEDOT and PEDOT-AuNPs modified electrodes in addition to several information about the interfacial process.

[1] C.V. Amanchukwu, M. Gauthier, T.P. Batcho, C. Symister, Y. Shao-Horn, J.M. D'Arcy, P.T. Hammond, J. Phys. Chem., 2016.

[2] J. Jiang, A. Kucernak., J. Electroanal. Chem., 2002.

[3] I. Bakas, A. Hayat, S Piletsky, E Piletska, M. M. Chehimi, T. Noguier, R. Rouillon, Talanta, 2014.

Agradecimentos/Acknowledgments

We would like to thank GPMIn, Departamento de Química-UFPR, CAPES, CNPq and CME-UFPR.

Stability of silica nanoparticles modified with both hydrophobic and hydrophilic silanes

Beatriz P. A. Santos (PG),^{1*} Celso A. Bertran (PQ).¹

beatriz.santos@iqm.unicamp.br

¹Departamento de Físico-Química, Instituto de Química, Unicamp.

Palavras Chave: *Silica nanoparticles, Surface modification, Stability, Hydrophobicity, Wettability.*

Highlights

Modification of silica nanoparticles with silanes containing amino and octyl groups causes a decrease in the absolute value of zeta potential of the particles.

Resumo/Abstract

Silica nanoparticles can be easily modified through hydrolysis and condensation reactions with silanes. The nanoparticles synthesis and their surface modification can be performed in the same vessel, with few steps and simple experimental procedure.

The properties of the modifying agent dictate the behavior of the final nanoparticle suspension or powder. Parameters such as stability, surface activity and hydrophobicity of the product can be chosen and played with by altering the type and the quantity of silanes added to the reaction. Therefore, it is possible to synthesize particles with different physicochemical properties that can be used for several purposes and applications. By controlling the hydrophobicity of the material, the particle can act on interfaces between immiscible substances and alter a solid wettability, for example.

In this work, silica nanoparticles with diameter of hundreds of nanometers were synthesized and modified with both silanes, 3-aminopropyl-triethoxysilane (APTES) and trimethoxy-octyl-silane (TMOcS), in two different molar fractions. The success of surface modification is confirmed by contact angle measurements with droplets of water over flat surfaces of the dried suspensions.

The supernatants of the resulting suspensions were analyzed with dynamic light scattering (DLS) for size and zeta potential information. It was found that the surface modification causes agglomeration of the particles, as can be observed both visually and through field emission scanning electron microscopy (FESEM) micrographs (Figure 1), as well as verified by a decrease in zeta potential absolute values.

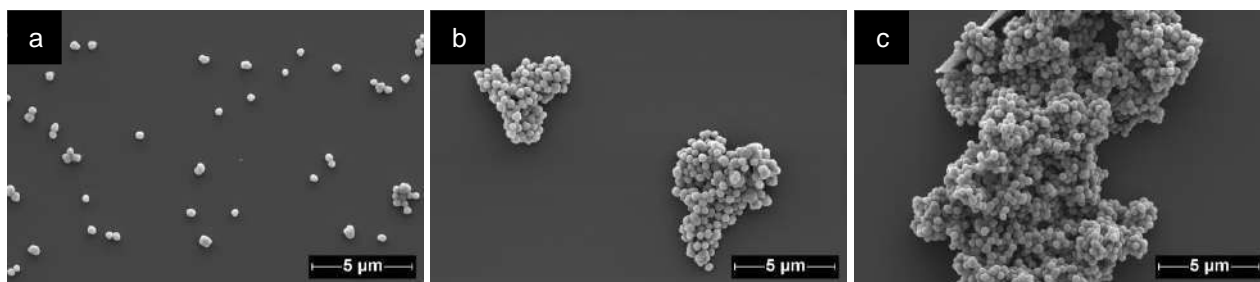


Figure 1 – FESEM micrographs of dried dispersions of silica nanoparticles a) with no surface modification; b) modified with TMOcS (20 mol%) and APTES (80 mol%); and c) modified with TMOcS (80 mol%) and APTES (20 mol%).

Agradecimentos/Acknowledgments



Área: MED

Nº de Inscrição: 00290

Theoretical and experimental studies on the inhibition of human acetyl and butyrylcholinesterases by aflatoxin M1 (AFM1).

Joyce S. F. D. de Almeida (PQ),¹ Samir F. A. Cavalcante (PQ),² Rafael Doležal (PQ),³ Kamil Kuča (PQ),^{1,3} Kamil Musilek (PQ),³ Daniel Jun (PQ),⁴ Tanos C. C. França (PQ).^{1,3}

tanosfranca@gmail.com; joycesfdalmeida@gmail.com;

¹Laboratory of Molecular Modeling Applied to Chemical and Biological Defense, Military Institute of Engineering, Rio de Janeiro/RJ, Brazil; ²Institute of Chemical, Biological, Radiological and Nuclear Defense, Technological Center of the Army, Rio de Janeiro/RJ, Brazil; ³Department of Chemistry, University of Hradec Kralové, Czech Republic; ⁴Department of Toxicology, University of Defense, Czech Republic.

Keywords: Aflatoxin M1, Acetylcholinesterase, Butyrylcholinesterase, Surface screening, Docking, Molecular dynamics.

Highlights

Aflatoxin M1 (AFM1) is a mycotoxin that can be found in contaminated milk and dairy products; AFM1 inhibits the enzyme acetylcholinesterase, being a potential neurotoxic agent; AFM1 does not inhibit the enzyme butyrylcholinesterase.

Abstract

Aflatoxin M1 (AFM1) is a mycotoxin that contaminates specially milk and dairy products. In humans and other mammalian species contaminated by aflatoxin B1 (AFB1), AFM1 can also be produced as a metabolite by hydroxylation. Through recent molecular modeling (MM) studies we have found out that AFM1 may also be an inhibitor of acetylcholinesterase (AChE), capable of binding to its catalytic anionic site (CAS)^{1,2}, and, like AFB1, also act as a potential neurotoxic agent. Moving forward on this investigation, we performed surface screening (SS) and molecular dynamics (MD) studies of AFM1 on human acetyl and butyrylcholinesterases (*HssAChE* and *HssBChE*), with the goals of corroborating previous data on the preferential binding sites inside *HssAChE*, and verifying the affinity of AFM1 for *HssBChE*. Besides, *in vitro* inhibition tests of AFM1 on *HssAChE* and *HssBChE* were also performed to corroborate the theoretical studies. SS results for *HssAChE* showed that most of the poses bind preferentially to the CAS, confirming the previous docking and MD data^{1,2}, while the MD simulation of the best pose selected from SS, showed stabilization inside the enzyme, surrounded by residues Gln71, Pro88, Trp86, Gly121, Leu130, Tyr124, Ala127 and Ser129. For *HssBChE*, the theoretical studies showed poorer interaction energies and less stabilization inside the enzyme, suggesting that, like AFB1,^{1,2} AFM1 is not a good inhibitor. Experimental results corroborated theoretical ones, showing that AFM1 is capable of inhibiting *HssAChE*, although not as strongly as AFB1, and unable of inhibiting *HssBChE*.

References:

1. Almeida, J.S.F.D.; Cavalcante, S.F.A.; Doležal, R.; Kuča, K.; Musilek, K.; Jun, D.; França, T.C.C. *J. Biomol. Struct. Dyn.* 2018,1,8. DOI: <https://doi.org/10.1080/07391102.2018.1475259>
2. Almeida, J.S.F.D.; Doležal, R.; Kuča, K.; Musilek, K.; Jun, D.; França, T.C.C. *Toxins.* 2018, 10, 389. DOI: <https://doi.org/10.3390/toxins10100389>

Acknowledgments



Study of the Catalytic Potential of the Hybrid Silicas and Calixarenes in the Conversion of Glycerol to Glyceryl Carbonate.

Daniela Machado (PG),¹² Gustavo Barbosa dos Reis (IC),³ Eliezer L. Gomes (PQ),¹ Diogo de Oliveira Silva (PQ),³ Izilda A. Bagatin (PQ),² Raphael Rodrigues (TC).

machado.daniela23@gmail.com;

¹ Departamento de Engenharia Química, Laboratório de Catálise Heterogênea e Química Verde. Universidade Federal de São Paulo – Campus Diadema. Rua Prof. Artur Riedel, 275. Diadema - São Paulo – SP – Brasil. CEP 09972-270;

² Departamento de Química, Laboratório de Química de Calixarenos, Espectroscopia Molecular e Catálise. Universidade Federal de São Paulo – Campus Diadema. Rua Prof. Artur Riedel, 275. Diadema - São Paulo – SP – Brasil. CEP 09972-270.

³ Departamento de Química, Laboratório de Bio-Orgânica e Bioanalítica. Universidade Federal de São Paulo – Campus Diadema. Rua Prof. Artur Riedel, 275. Diadema - São Paulo – SP – Brasil. CEP 09972-270;

Palavras Chave: Basic Catalysis, Glycerol, Calixarenes, Hybrid Silicas

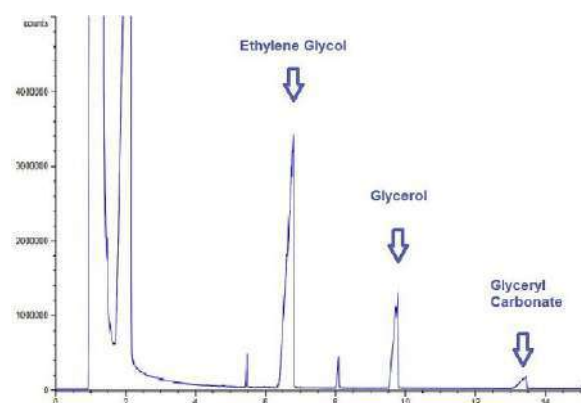
Highlights

Synthesis and characterization of basic catalysts.
Basic catalysis as hybrid silicas and calix[n]arenes.
Conversion of glycerol to glyceryl carbonate by basic catalysis.

Resumo/Abstract

Biofuels production is a process that is of great importance in the Brazilian economy, which are formed from a transesterification reaction. In this reaction a co-product is produced, the glycerol, commonly used in several sectors. However, the quantity produced is not absorbed by the market, making it a potential environmental liability. In this sense, routes have been created in order to add value to the glycerol, and one of them is through its transformation into glyceryl carbonate. For this reaction to occur quickly and efficiently it is necessary to use a catalyst. The development of materials capable of being applied as catalysts has been the subject of studies, such as the hybrid silica and calixarene derivatives. Hybrid silicas were synthesized, and the calixarenes were modified, being characterized by XRD and FTIR, in order to verify their characteristics in terms of phases and composition. The initial tests demonstrated effectiveness when applying the materials studied in the glycerol transcarbonation reaction, according to Figure 1, which shows a typical chromatogram, where the product of interest appears in approximately 13 min.

Figure 1. Chromatogram of the reaction of Glycerol with Dimethylcarbonate using hexagonal phase silica, where the peaks of the internal standard, glycerol and the glyceryl carbonate product are identified.



Agradecimentos/Acknowledgments



IFUSP
IFUSP lab de cristalografia
LOBA

Evaluating nucleation process on inorganic scaling

Filipe Signorelli (PG),^{1*} Celso A. Bertran (PQ).¹

f086338@dac.unicamp.br

¹Departamento de Físico-Química, Instituto de Química, UNICAMP.

Palavras Chave: *Inorganic scaling, Nucleation, Calcium carbonate.*

Highlights

Does the inorganic scaling take place mainly by homogeneous or heterogeneous nucleation?

Resumo/Abstract

Nucleation is the aggregation of molecules from a phase to form a new one. This process has a minimal size, below the critical radius, and cannot be directly detected. It is not well understood whether in the inorganic scaling the crystals are heterogeneously nucleated onto the surface or homogeneously nucleated in the bulk and then adhered onto the surface.

Measuring the pH of a calcium carbonate based scaling medium, it is possible to track and differentiate nucleation and growth processes along the time axis.¹ Performing this analysis together with a crystal quartz microbalance, it is possible to assess the inorganic scaling formation profile along the time and connect it with the crystallization processes.

Experiments were carried out in a gold surface electrode of a crystal quartz microbalance along with pH measurements of a solution containing carbonate anions that was slowly titrated with a solution containing calcium cations. Results are shown in Figure 1. The inflexion in the frequency curve indicates change in the microbalance crystal mass and coincides with the peak in the pH measurements, that indicates the start of nucleation process. After nucleation starts, the inflexion of frequency curves slightly changes and seems to be constant until the end of the test. This result indicates that there is no variation in the kinetics of scaling after nucleation starts, which probably means that the velocity of nucleation and growth is controlled by diffusion of ions from the beginning to the end of the crystallization process, and not by the diffusion of crystal particles.

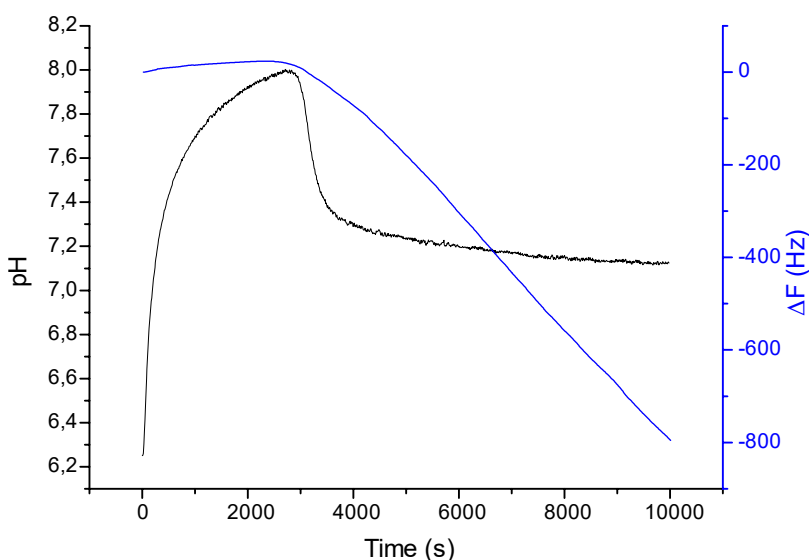


Figure 1. Curves of pH (black) and frequency of crystal quartz oscillation (blue), both versus time, during calcium carbonate crystallization and scaling processes.

References:

1. Sousa, M. F. B.; Signorelli, F.; Bertran, C. A.; *J. Petrol. Sci. Eng.* **2016**, 147, 468-473.

Agradecimentos/Acknowledgments

The authors wish to thank CAPES, PETROBRAS and IQ-UNICAMP for the financial support.

Área: AMB**Inscrição: 00295**

Water and sediment recovery from water-based drilling fluid waste

Laine B. Pereira* (PG), **Cristina M. S. Sad** (PG), **Mayara da Silva** (PG), **Francine D. dos Santos** (PG), **Rayane R. B. Corona** (PG), **Juliéte S. D. Leite** (PG) **Luana S. de Oliveira** (IC), **Eustáquio V. R. de Castro** (PQ), **Paulo R. Filgueiras** (PQ), **Valdemar Lacerda Jr.** (PQ)

lainebadaro@gmail.com

LABPETRO – Laboratório de Caracterização e Processamento Primário de Petróleos - CCE, Universidade Federal do Espírito Santo, Av. Fernando Ferrari 514, Goiabeiras, Vitória, ES – CEP: 29075-910

Palavras Chave: *Drilling Fluid Waste, Recovery, Treatment, Characterization.*

Highlights

Reduction of environmental impact caused by water-based drilling fluid waste.
Possibility to recovery all the separate phases from the waste.
The separate sediment can be reused in several ways.

Abstract

Water-based drilling fluids are widely used in the petroleum exploration and production stage. After this stage, the residue has several compounds with potential contaminants for the environment, especially hydrocarbons. The Brazilian Association of Technical Standards (NBR) identifies it as Class 1 waste (dangerous) by NBR 10004 (2004) because it has high toxicity, corrosivity and reactivity. Usually, these wastes are disposed in industrial landfills for treatment, thus raising the industrial operational costs in the production process. In a recent research, was developed a separation process of the residual oil, water and sediment from water-based drilling fluids waste with the combination of physical and chemical methods. Results showed that the increase in centrifugal force and temperature associated are essential for the phase's separation. The use of demulsifiers improved the process efficiency with complete removal of the oil from the residue (oil content before removal was 20% v/v). The recovered oil from water-based drilling fluid waste presented great physical-chemical properties, allowing its incorporation into the primary oil processing stage, thus avoiding disposal with the possibility of reducing operating costs and environmental impact. However, the water and sediment phases, that represent about 80% v/v from the residue, also have potential contaminants. Therefore, the characterization and possibility to recover these phases becomes interesting, to make full use of the waste. In this work, the characterization of the water and sediment phases from the residue was carried out. The separated water (60% v/v) showed an alkaline pH (9.20), high turbidity (464 NTU) and high salinity (89.65 %wt), which can also be observed by X-ray diffraction and fluorescence analysis of fixed solids which represented 91.27 %wt of the total solids present in the water phase. In the fixed solids, Na (35.00 %wt) was predominant, followed by small amounts of K (2.00 %wt) and Ca (3.30 %wt). These results are not in accordance with the parameters of quality and discharge of effluents in water bodies established by resolutions nº 357/2005 and nº 430/2011 from CONAMA. Therefore, water separated from the waste would require treatment to conform to established standards before being discarded. In the sediments phase, that represented 20% v/v from the residue, the amount of fixed solids represented 71.52 %wt of the total solids, and in the fixed solids was predominantly Ba (31.20 %wt) and Ca (30.50 %wt), followed by Fe (9.20 %wt), Si (8.90 %wt) and K (1.20 %wt). All these metals are widely used in the formulation of water-based drilling fluid in the form of sulphates (BaSO_4 and CaSO_4), oxides (Fe_2O_3 and SiO_2) and K, can be in the form of KOH and KCl. In this way, after the separation process these sediments can be reused in several ways, like in the formulation of new drilling fluids, in the production of bricks and paving works. Thus avoiding the environmental impact caused by water-based drilling fluid waste that with the water separation, predominant phase, reduces in 60% v/v the residue volume, in addition to enabling the reuse of oil and sediment separated phases.

Acknowledgments

UFES, LABPETRO, LMC, CNPq, CAPES, FAPES, TANAC S.A. and BMA ambiental

Área: MAT

(Inserir a sigla da seção científica para qual o resumo será submetido. Ex: ORG, BEA, CAT)

Inscrição:00296

(Inserir o número de inscrição do autor que fez a submissão)

Structural and morphological characterization of cerium doped niobium oxides for photocatalysis**Bruno A. T. Menezes* (PG)¹, Daiane R. Siqueira (IC)², Marcos V. Colaço (PQ)², Juliana F. Lima (PQ)¹****Brunoantonio0591@gmail.com**¹Departamento de Química Geral e Inorgânica, Instituto de Química -UERJ, campus Maracanã, Rio de Janeiro – RJ.²Departamento de Física Aplicada e Termodinâmica, Instituto de Física -UERJ, Maracanã, Rio de Janeiro – RJ.

Palavras Chave: Niobium, Cerium, Titanium, Nanomaterial.

Highlights

Nanostructured cerium doped niobium oxides were synthesized by hydrothermal method;
 The effect of reactional pH was evaluated (pH = 1.0, 3.0 and 9.0);
 XRD patterns confirm the presence of monoclinic and orthorhombic phases;
 Bandgap values (2.0 – 3.0 eV) for solar absorption was reached;
 Materials are promising for photocatalysis.

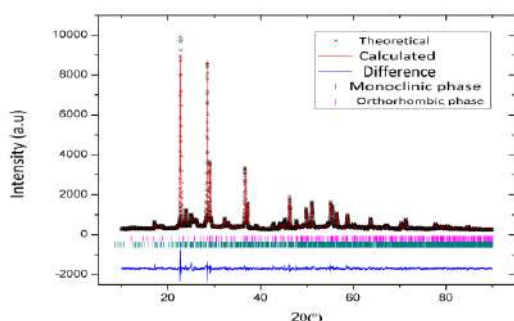
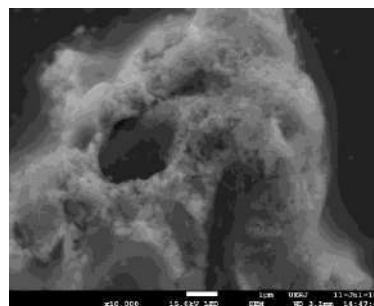
Resumo/Abstract

Solar energy is of great importance for the development and existence of life on Earth, it stands out among the so-called alternative or renewable sources of energy, also in heterogeneous photocatalysis, to remove pollutants from wastewater. Therefore, studying materials that absorb solar energy is interesting for the technological development and maintenance of life.

Materials containing niobium have gained prominence in recent decades. Niobium oxides are a group of highly versatile materials, since they can provide interesting and different properties, especially in technological applications.¹ Addition of dopants that can introduce different electronic levels in the semiconductor band structures will lead to changes in their properties. In this way, it is important to control the impurities and defects of the solids and the synthetic route.

One of the tactics employed to increase the photochemical activity of semiconducting oxides is the insertion of doping elements that improve their electronic properties. Doping may reduce the rate of charge recombination, improving the photocatalytic activity, besides acting on the decrease of the semiconductors' bandgap.²

The hydrothermal syntheses were carried out in a stainless steel reactor containing Nb precursor (niobium ammonium oxalate) at 150 °C during 20 h. Different pH conditions (1.0; 3.0 and 9.0) and the incorporation of cerium were evaluated. The solid materials were calcined at 800 °C for 5 h. Niobium oxides were characterized concerning their structural (FTIR, XRD, and BET) in Figure 1, morphological (SEM) in Figure 2 and optical properties (DRS).

Figure 1: X-Ray diffraction pattern of Nb₂O₅Figure 2: SEM image Nb₂O₅ pH = 3

[1] YASMINA, Mokhbi *et al.* Treatment Heterogeneous Photocatalysis; Factors Influencing the Photocatalytic Degradation by TiO₂. **Energy Procedia** v. 50, p. 559–566, 2014.

[2] HU, Bin; LIU, Yinghua. Nitrogen-doped Nb₂O₅ nanobelt quasi-arrays for visible light photocatalysis. **Journal of Alloys and Compounds** v. 635, p. 1–4, jun. 2015.

Estudo do comportamento reológico de *blends* de petróleo.

Juliéte da S.D. Leite (PG)^{1*}, Luana S. de Oliveira (IC)¹, Rayane R. B. Corona (PG)¹, Mayara da Silva (PG)¹, Francine D. dos Santos (PG)¹, Laíne B. Pereira (PG)¹, Cristina M. S. Sad (PG)¹, Paulo R. Filgueiras (PQ)¹, Eustáquio V. R. de Castro (PQ)¹.

julietediasleite@hotmail.com

¹Universidade Federal do Espírito Santo, Centro de Ciências Exatas – CCE, Núcleo de Competências em Química do Petróleo (NCQP)

Palavras Chave: Petróleo, *Blends*, Propriedades físico-químicas, Reologia.

Highlights

Study of rheological behavior of petroleum blends

The production of heavy oil presents some problems related to mobility and processing.

Improvement in physicochemical properties are required for heavy oil processing demand.

Resumo/Abstract

A utilização de petróleos pesados é crescente dado o aumento na demanda por energia. Este tipo de óleo apresenta elevada densidade e viscosidade, podendo também apresentar maior teor de acidez e de enxofre, onerando o transporte, tratamento e o processo de refino. Devido sua complexidade, o monitoramento das propriedades físico-químicas, destacando-se a densidade e a viscosidade, é de fundamental importância para permitir sua comercialização. Outras propriedades também são de grande valor informativo para o processamento primário e valoração do petróleo nas etapas de produção e refino, sendo elas: teor de água e sedimentos, ponto de fluidez, reologia, densidade, °API, Número de Acidez Total (NAT), teor de enxofre, teor de Saturados, Aromáticos, Resinas e Asfaltenos (SARA). Uma solução para melhoria da mobilidade ou escoamento dos óleos pesados e extrapesados é a redução da viscosidade, que pode ser realizada por: diluição com solventes, condensado de gás e mistura de óleos intermediários e leves. Neste sentido, no presente trabalho foram selecionados 3 óleos com características distintas, variando de óleo leve a pesado, com °API 56, 27 e 16, dos quais foram preparadas 37 misturas (*blends*) tendo sido feito um estudo reológico dos óleos e suas misturas em um reômetro rotacional cilíndrico.

Os resultados obtidos demonstram que a maioria dos *blends* produzidos apresentaram comportamento de fluido newtoniano, no entanto, para 33% dos *blends* os valores destoaram desse perfil. Para tais misturas, o comportamento apresentado para valores de taxa de cisalhamento menores a aproximadamente 170 s⁻¹ foi newtoniano, a partir deste, houve um aumento da viscosidade com aumento da taxa de cisalhamento, que pode ser um indicativo do comportamento de fluido dilatante. As análises realizadas demonstraram que a presença do petróleo de maior °API (mais leve), a partir de quantidades mínimas de 10 % adicionadas nas misturas, foi o principal fator de influência nas mudanças características dos óleos. O estudo em questão é promissor, pois permitiu o monitoramento da contribuição de cada óleo nos *blends* para verificar em que momento ocorreu mudança de perfil reológico pela alteração da curva de fluxo.

Agradecimentos/Acknowledgments



Área: ORG N° de Inscrição: 00299

Otimização da síntese, separação enantiomérica e determinação da configuração de enantiômeros de acridinona com atividade anticâncer.

Marina Brandão da Fonseca (PG),¹ Luma Godoy Magalhães (PG),² Ralph da Costa Gomes (PG),³ Fernando Antônio Santos Coelho (PQ),³ Adriano Defini Andricopulo (PQ),² Cedric Stephan Grebin (PQ).¹

marinabrandao17@ufrj.br

¹ Laboratório de Diversidade Molecular e Química Medicinal, Departamento de Química Orgânica, UFRRJ; ² Laboratório de Química Medicinal e Computacional, Instituto de Física de São Carlos, USP; ³ Departamento de Química Orgânica, UNICAMP.

Palavras Chave: *Reação multicomponente, Hantzsch, Tubulina, CLAE, Dicroísmo circular.*

Highlights

Optimization of the synthesis, enantiomeric separation and determination of the configuration of acridinone enantiomers with anticancer activity. Optimization of the synthesis of a racemic acridinone, with strong inhibitory activity of tubulin in vitro. Chiral separation by HPLC and determination of configurations by circular dichroism.

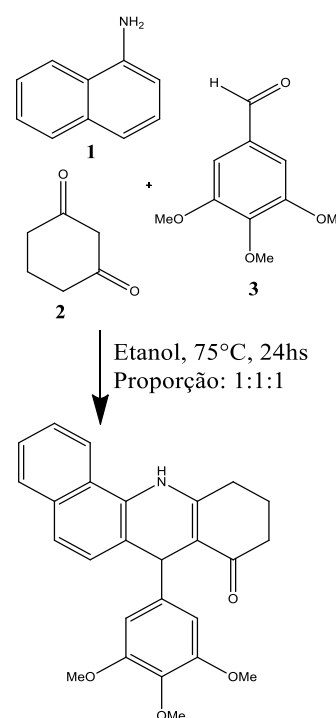
Resumo/Abstract

Reações multicomponentes têm três ou mais reagentes adicionados em um único recipiente gerando um único produto com características de todos reagentes.¹ Uma das reações multicomponentes mais clássicas é a de Hantzsch, originalmente utilizada na síntese da 1,4-dihidropiridina.

De acordo com trabalhos anteriores de nosso grupo de pesquisa, o produto da síntese descrita ao lado mostrou-se ativo na inibição da polimerização da Tubulina¹, logo, buscou-se otimizar a síntese, que tinha um rendimento de 24%, além de separar os enantiômeros presentes e definir suas respectivas configurações absolutas. Em geral, misturas racêmicas são obtidas nestas reações e é importante estudar as atividades biológicas de cada enantiômero isolado. A cromatografia líquida de alta eficiência com coluna de fase estacionária quiral é a forma mais empregada na literatura para separação da classe de compostos, e o dicroísmo circular foi a técnica utilizada para determinação da configuração dos centros assimétricos presentes.

A otimização foi realizada, quando utilizada proporção dos reagentes **2:1:1**, isopropanol, morfina como catalisador, por 24 horas à 82°C, obteve-se o maior rendimento, 42,3%, satisfatório comparado com o rendimento original. A CLAE com fase estacionária quiral separou os enantiômeros de forma eficiente. A análise de dicroísmo circular foi realizada, seguindo-se a regra do octante, considerando-se o anel naftalênico como plano principal, observou-se que a maior contribuição para o efeito Cotton, no enantiômero (*S*), é negativo, logo, pode-se associar essa configuração ao enantiômero com menor tempo de retenção na CLAE e o enantiômero (*R*) ao com maior tempo de retenção. A avaliação da atividade dos enantiômeros isolados está em andamento.

¹ MAGALHAES, L.G.; MARQUES, F.B.; DA FONSECA, M.B.; ROGÉRIO, K.R.; GRAEBIN, C.S.; ANDRICOPULO, A.D. Discovery of a Series of Acridinones as Mechanism-Based Tubulin Assembly Inhibitors with Anticancer Activity. PLoS ONE, v. 11, n. 8, p. e0160842, 2016.



Agradecimentos/Acknowledgments

A FAPERJ, FAPESP, CNPq e UFRJ pelos auxílios financeiros. Ao LQMC da USP/São Carlos e ao Dep. Química da UNICAMP pela colaboração. Aos professores Mário Geraldo de Carvalho e Luciano Suzart do PPGQ-UFRJ por toda colaboração. O presente trabalho foi realizado com apoio da Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior – Brasil (CAPES) – código de financiamento 001.

Área: AMB

Nº de Inscrição: 00300

Application of the rotational composite central design in the removal of hexavalent chromium by sugarcane straw

Caio R. Salata (IC),^{1*} Talita S. Vicentini (IC),¹ Gener T. Pereira (PQ),² Luciana M. Saran (PQ)¹caio.salata.cs@gmail.com; lm.saran@unesp.br

¹Departamento de Tecnologia, Faculdade de Ciências Agrárias e Veterinárias, Universidade Estadual Paulista (UNESP); ²Departamento de Ciências Exatas, Faculdade de Ciências Agrárias e Veterinárias, Universidade Estadual Paulista (UNESP).

Keywords: response surface methodology; lignocellulosic material; biosorption; potentially toxic metal.

Highlights

Sugarcane straw removes Cr(VI) from solution.
The design adopted allows the prediction of the best experimental conditions.
The best removal rate was obtained in acid solution (pH 2.00).

Abstract

Several industrial activities produce wastewaters which contain potentially toxic elements as hexavalent chromium, Cr(VI) whose removal can be carried out by biosorption process with low cost biosorbents as lignocellulosic residues from the agroindustry.¹⁻³ Sugarcane straw is among these residues being a potential biosorbent for the removal of Cr(VI) from effluents. However, there are no reports at the literature of studies with sugarcane straw as biosorbent for Cr(VI). Considering the above, it was evaluated the potential of sugarcane straw for the removal of Cr(VI) from solutions prepared with potassium dichromate (K₂Cr₂O₇). The rotational central composite design was adopted to the study of the influence of factors such as initial pH of the Cr(VI) solution, contact time, initial concentration of Cr(VI) and dose of the biosorbent in the biosorption process aiming at the optimization of them. After the biosorption assays carried out in batch at 30 °C and 150 rpm of agitation the total chromium concentration remaining in the solution was analyzed by atomic absorption spectroscopy with air-acetylene flame. To evaluate the efficiency of removal of the chromium by the sugarcane straw, the biosorption capacity of the sugarcane straw and the removal rate of the interest element were calculated. Although the results for the variables responses biosorption capacity and removal rate did not allow the proposition of a predictive mathematical model, because for both variables the lack of adjustments was statistically significant ($p \leq 0.05$), it was possible to predict the best value for each factor studied from the analysis of the response surface graphs obtained. It was concluded that initial pH 2.00; 5.00 g L⁻¹ of sugarcane straw, Cr(VI) initial concentration of 125 mg L⁻¹ and 150 min of contact time between straw and Cr(VI) are the experimental conditions that will result in greater removal of Cr(VI) by sugarcane straw.

References

- ¹Ali, A.; Saeed, K.; Mabood, F. *Alexandria Engineering Journal*. **2016**, 55(3), 2933.
- ²Owalude, S.O.; Tella, A.C. *Beni-suef university journal of basic and applied sciences*. **2016**, 5(4), 377.
- ³Ullah, I.; Nadeem, R.; Iqbal, M.; Manzoor, Q. *Ecological Engineering*. **2013**, 60, 99.

Acknowledgments

The authors thank Research Support Foundation of the State of São Paulo (FAPESP) by the scholarship of scientific research awarded (FAPESP process n. 2018/10850-5).

Experimentos para gostar de Química: uma abordagem científica para alunos do Ensino Fundamental anos finais

Guilherme de A. Coelho (IC)^{1,2*}, Luiz R.S. da Silva (FM)², Juliana F. de Lima (PQ)¹

¹Departamento de Química Geral e Inorgânica, Universidade do Estado do Rio de Janeiro - Instituto de Química. Rua São Francisco Xavier, 524 - Maracanã, Rio de Janeiro - RJ; CEP: 20550-900.

²Moderna Organização Pedagógica Infantil (Colégio MOPI). Rua Dom Rosalvo Costa Rêgo, 542 - Itanhangá, Rio de Janeiro - RJ; CEP: 22641-040.

*E-mail: guilhermedeazeredo@gmail.com

Palavras Chave: *Ensino Fundamental, Ensino de Química, Experimentos, Materiais Alternativos.*

Highlights

Experiments to enjoy Chemistry: a scientific approach for students at final years of Basic School. The purpose of the work is to bring ludic experiments that contextualize with the daily life of the student, in order to motivate and sensitize the content of Chemistry, exposing its basic concepts.

Resumo/Abstract

A precarização do Ensino de Ciências no Brasil pode estar relacionada a um currículo desatualizado e não contextualizado¹, bem como metodologias que não dialogam com o desenvolvimento cognitivo do estudante². Esses fatores acarretam na dificuldade do ensino/aprendizagem, diminuindo a percepção da importância dessa área do conhecimento para construção de uma sociedade contemporânea e tecnológica. Além disso, a falta de protagonismo dos estudantes dentro de sala torna cada vez menos palatável o interesse pelo que é estudado, distanciando esse aluno dos ambientes escolares³.

Dentre as disciplinas estudadas na área de ciências da natureza está a Química, que é introduzida no currículo nos anos finais do Ensino Fundamental. Dessa forma, o presente trabalho tem como proposta a criação de oficina lúdica, de condução dos estudantes de Ensino Fundamental anos finais para o desenvolvimento da aprendizagem de conceitos químicos a partir da experimentação, vivência e contextualização.

Os experimentos (Tabela 1) foram selecionados de acordo com o baixo custo e fácil acesso dos materiais, de forma que os alunos pudessem realizá-los em algum ambiente extraescolar, sendo assim replicadores do gosto pela Química.

| Nome do experimento | Referência |
|---|-----------------------------------|
| Produção de sabão líquido ⁴ | GALVANI, F; et al. EMPRABA, 2014. |
| Limpeza da água por eletrofloculação ⁵ | PINTO, AC; et al. SBQ, 2010. |
| Construindo o extintor de incêndio caseiro ⁵ | PINTO, AC; et al. SBQ, 2010. |

Essas práticas foram realizadas em 3 semanas no Colégio MOPI, durante 1 h e 30 min, com 22 alunos. De forma a avaliar o interesse dos alunos e entendendo que os questionários serão abertos para textos longos que serão analisados dentro de um contexto específico, utilizaremos o referencial sociocultural e a teoria da enunciação bakhtiniana para orientar as análises.

¹ NASCIBEM, FG; et al. *XV Encontro Nacional de Educação em Ciências* - Vol. 11, n.º 39, **2015**.

² MILARÉ, T; et al. *Química Nova na Escola* – Vol. 32, n.º 1, p. 43-52, **2010**.

³ DEMO, P. *Revista Brasileira de Docência, Ensino e Pesquisa em Educação Física* – Vol.1, n.º.1, p.53-75, **2009**.

⁴ GALVANI, F; et al. *Embrapa Pantanal*, **2014**. Disponível

<http://ainfo.cnptia.embrapa.br/digital/bitstream/item/114122/1/FOL179.pdf>. Acesso em: 04/10/2018.

⁵ PINTO, AC; et al. *Edit-SBQ* – Edição 1, Brasil, **2012**.

em:

Área: FIS

Inscrição: 00303

Estudo da composição química do líquido extraído da mandioca – manipueira.

Ingrid K. L. Melo (IC)¹ **Maria C. Tavares (PG)**¹ **Janesmar C. M. Cavalcanti (PQ)**² **José G. da S. Júnior (PQ)**³ **Wander G. Botero (PQ)**¹ **Vinícius Del Colle (PQ)**^{1*}

Ingrid-karen@live.com; delcolle@arapiraca.ufal.br

¹Universidade Federal de Alagoas – Campus Arapiraca, UFAL; ²Universidade Estadual de Alagoas – UNEAL – Campus Arapiraca; ³Instituto Federal de Alagoas – Campus Marechal Deodoro.

Palavras Chave: Manipueira, Metais, Caracterização físico-química, Meio Ambiente.

Highlights

Study of the chemical composition of the liquid extracted from manioc.

The residual water, obtained from Cassava processing, is rich in organic compound and toxic metals and represents a dangerous risk for body water and soil near to house of flour. Then is relevant analyze chemically this material in order to advise the farm worker about the environmental risk of human consumption and production manipueira. besides improving the applicability in the human activity of consumption and production.

Resumo/Abstract

A mandioca (*Manihot esculenta*) tem espaço importante na agroindústria brasileira. Seu processamento gera um efluente líquido denominado manipueira, cuja composição química abrange desde macro e micronutrientes, matéria orgânica e elementos tóxicos.¹ O descarte desse efluente é, muitas vezes, feito de forma inadequada e pode levar a contaminação de corpos d'água ou do solo nas proximidades das 500 casas de Farinha existentes no estado de Alagoas.² Nesse sentido, estudos de caracterização da manipueira são importantes, pois contribuem para o manuseio, descarte e aplicação adequados. Esse trabalho teve como objetivo comparar as características físico-químicas da manipueira filtrada em 0,45 µm e em filtro comum. A manipueira foi coletada em uma casa de farinha na cidade de Arapiraca – AL e armazenada a 4°C. Logo após, centrifugada para separação dos sólidos, passada em filtro qualitativo e membrana nitrocelulose de 0,45 µm. Os filtrados foram caracterizados quanto: pH, condutividade, carbono orgânico total (COT) por combustão e de metais por MP AES (Espectrômetro de Emissão Atômica com Plasma por Microondas) com digestão prévia com HNO₃ 65% (v/v) e H₂O₂ 35 % (v/v). Os resultados da caracterização estão apresentados na Tabela 1.

Tabela 1 – Resultados da caracterização da manipueira passada em filtro comum e em 0,45 µm.

| Efluente | COT (g L ⁻¹) ¹ | pH | mS cm | Ba mg L ⁻¹ | Cd mg L ⁻¹ | Cr mg L ⁻¹ | Ni mg L ⁻¹ | Pb mg L ⁻¹ | Zn mg L ⁻¹ |
|----------------|---------------------------------------|------|-------|-----------------------|-----------------------|-----------------------|-----------------------|-----------------------|-----------------------|
| Filtro comum | 24,6 | 3,48 | 24,4 | 0,60 | 0,08 | 0,51 | 0,14 | 0,86 | 18,3 |
| Filtro 0,45 µm | 23,9 | 3,55 | 20,1 | 0,47 | 0,05 | 0,22 | 0,17 | 0,48 | 2,12 |

Como observado na Tabela 1, a filtração em 0,45 µm leva a uma retenção de 2,8% de COT e, conseqüentemente, dos metais presentes na manipueira, seja por estarem associados ao mesmo ou por agregação até entupimento do poro. Essa redução é significativa tendo em vista as duas membranas utilizadas. O pH para os efluentes estudados estão fora do padrão estabelecido pela Resolução n° 430 CONAMA (entre 5 e 9) para o descarte de efluente.³ Já os valores referentes ao Ba, Cd, Ni e Pb e Zn do filtrado em 0,45 µm estão dentro dos limites máximos estabelecidos pelo CONAMA, enquanto Cr nos dois filtrado e Zn do efluente de filtro comum estão acima dos limites máximos, representando um problema ambiental como consequência do descarte inadequado. A filtração em 0,45 µm reduziu em 88% os valores de Zn no efluente, apresentando-se como alternativa para a remoção de Zn da manipueira.

Referências

1 AVANCINI, S.R.P.; FACCIN, G.L.; TRAMONTE, R.; ROVARIS, A.A.; PODESTA, R.; SOUZA, N.M.A.; AMANTE, E. R. Cassava starch fermentation wastewater: Characterization and preliminary toxicological studies. Food and Chem. Tox., v. 45, pp. 2273–2278, 2007.

2 DUARTE, A. S.; ROLIM, M. M.; SILVA, E. F. DE F.; PEDROSA, E. M. R.; ALBUQUERQUE, F. S.; MAGALHÃES, A. G. Alterações dos atributos físicos e químicos de um Neossolo após aplicação de doses de manipueira. Rev. Bras. de Eng. Agr. e Amb., v. 17, n. 9, p. 938-946, 2013.

3 CONAMA, Conselho Nacional do Meio Ambiente, Resolução n° 430 de 2011.

Síntese de novos derivados da piperidona com potencial atividade anticâncer

Ruth Pereira Paulino (PG),¹ Rosemeire Brondi Alves (PQ),¹ Rossimiriam Pereira de Freitas (PQ).^{1*}

ruth_paris_90@hotmail.com; rossipfreitas@gmail.com

¹Departamento de Química, UFMG.

Palavras Chave: Piperidona, Atividade anticâncer, Anel triazólico, Química click.

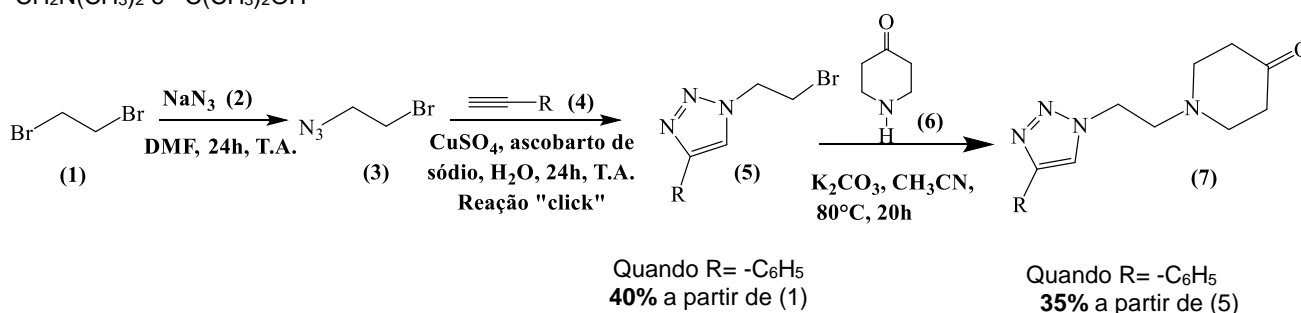
Highlights

Synthesis of new derivatives of piperidone with potential anticancer activity. Alkylation of piperidone with 1-azide-bromoethane followed by click reaction with different alkynes gave new triazole-piperidone analogues, which will be evaluated as cytotoxic agents.

Resumo

O câncer é a doença com maior taxa de mortalidade da atualidade e a síntese de novas drogas que possuem atividade citotóxica são de interesse mundial para a descoberta de tratamentos mais eficientes. Estudos recentes apontam que derivados de piperidona apresentam atividade citotóxica contra diversos tipos de células cancerígenas como leucêmicas,¹ de mama² e de pulmão.³ Uma estratégia de síntese usual para a obtenção de novos análogos é a modificação da piperidona através das reações de *N*-alquilação. O anel 1,2,3-triazólico destaca-se como grupo funcional para a síntese de novos derivados da piperidona, pois apresenta diversas aplicações biológicas, como atividade anticâncer, antimicrobacteriana, antiprotozoária, citotóxica, dentre outros.⁴ Este trabalho descreve a síntese de análogos triazólicos inéditos da piperidona (Esquema 1). Inicialmente realizou-se a monossustituição do dibromoetano (1) na presença de azida de sódio (2) e DMF. Várias condições foram testadas para otimização desta etapa. Em seguida, o produto (3) foi submetido à reação "click" utilizando 3 alcinos distintos (4). Após a síntese do anel triazólico (5), sucedeu-se a reação de *N*-alquilação, com o ataque nucleofílico da piperidona (6) ao carbono eletrofílico do composto bromado, formando o derivado (7). Os compostos (5) e (7) foram purificados via coluna cromatográfica em sílica *flash*, e caracterizados via RMN de ¹H e ¹³C.

Esquema 1: Rota sintética empregada para a obtenção de novos compostos derivados da piperidona. R = -C₆H₅, -CH₂N(CH₃)₂ e -C(CH₃)₂OH



¹Nunes, L.M. *et al.* *Oncol. Lett.* 11, 3842-3848, **2016**.

²Robles-Escajeda, E. *et al.* *Cell. Oncol.* 39, n. 3, 265-277, **2016**.

³Li, N. *et al.* *Eur. J. Med. Chem.* 155, 531-544, **2018**.

⁴Freitas, L.B. de O. *et al.* *Quim. Nova* 34, n. 10, 1791-1804, **2011**.

Agradecimentos

CAPES, CNPq, FAPEMIG, Departamento de Pós-Graduação UFMG.

Área: MED

Nº de Inscrição: 00306

Mechanism-based design of anti-virulence drugs against *Pseudomonas aeruginosa*

Thamires Q. Froes (PG),¹ Andressa Alves Pinto (TM)³, Kamel Metwally (PQ),² Marcelo Santos Castilho (PQ),^{2*}

thamiresquadros@hotmail.com; castilho@ufba.br

¹Faculty of Pharmacy, Federal University of Bahia, Rua Barão de Jeremoabo, s/n - Campus Universitário de Ondina, Ondina, 40170-115, Salvador, Brazil, ²Department of Medicinal Chemistry, Zagagiz University, Egypt, ³ Physics institute of São Carlos- USP, São Carlos, São Paulo, Brazil.

Keywords: *PhzS*, *Pyocyanin biosynthesis pathway*, *Thermo Shift Assays*, *Microscale THERMOPHORESIS*.

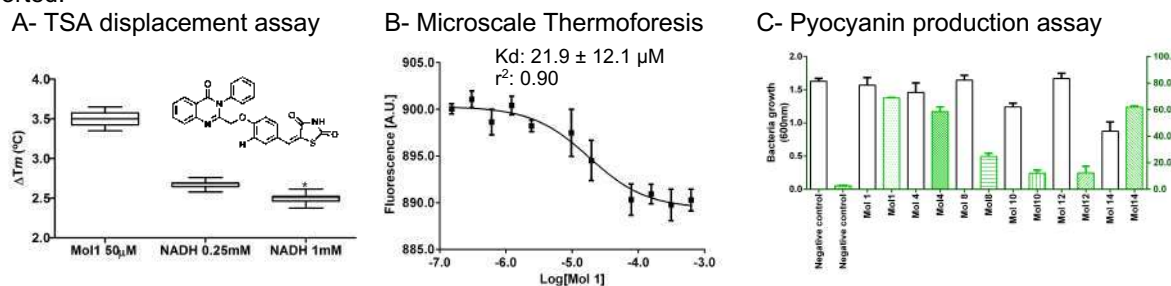
Highlights

Mechanism-based design of anti-virulence drugs against *Pseudomonas aeruginosa*: *In vitro* and celular assays lead to the identification of thiazolidinone derivates that bind *PhzS* with micromolar affinity and reduce pyocyanin production.

Resumo/Abstract

The investment of the pharmaceutical industry towards the development of new antibacterial drugs is decreasing, despite bacterial resistance is growing and poses serious threat to public health and the world economy. The possibility of wasting millions of dollars to develop a drug that becomes useless within months is one of the roots for this paradoxical scenario. A promising alternative to replace bactericidal drugs is to develop drugs that modulate bacterial virulence factors, without killing it. Hence, the enzymes responsible for the pyocyanin biosynthesis, one of the major *P. aeruginosa* virulence factors, can be considered promising targets for anti-virulence drugs development. *PhzS* is a flavin-dependent hydroxylase that catalyzes the final step in pyocyanin biosynthesis using PCA (Phenazine-1-carboxylic acid) as a substrate and NADH as a cofactor. Previous studies from our research group have shown that the thiazolidinone ring mimics the binding profile of the purine ring from NADH/NADPH. Therefore, we evaluated a series of 16 thiazolidine-2,4-dione derivatives as putative *PhzS* inhibitors. Thermal shift assays (TSA) reveal that 6 compounds increase the melting temperature (T_m) $>2^\circ\text{C}$ ($p < 0.01$), at $50\mu\text{M}$ concentration. NADH displacement studies, carried out by TSA, confirm that these compounds show a competitive mechanism towards NADH (Figure 1A). Despite useful, TSA do not afford a quantitative measurement of potency or affinity. To make matters worse, *PhzS* is only catalytic active in the presence of *phzM*, rendering the kinetic assay expensive and error prone. In order to overcome this drawback, the compounds affinity to *PhzS* was assessed by Microscale THERMOPHORESIS (MST), using *PhzS* labeled with Fluorescein Isothiocyanate (FTIC) (Figure 1B). According to our results Mol1 (5-(4-(4-oxy-3-phenyl-3,4-dihydroquinazolin-2-methoxy-benzylidene-thiazolidine-2,4-dione)) has micromolar affinity towards its *PhzS* ($K_D = 21.9 \pm 12.1\ \mu\text{M}$). Cellular assays suggest that thiazolidine-2,4-dione derivatives decrease pyocyanin production up to 60% without any effect over cell growth at $100\ \mu\text{M}$ concentration (Figure 1C).

Figure 1: Target-based and phenotypic assays carried out with Mol1, the first micromolar *PhzS* inhibitor ever reported.



In conclusion, the bioisosterism concept was successfully applied to identify compounds that have micromolar affinity to *PhzS* and interact within the NADH binding pocket. This work lays the ground for the structure-based design of *PhzS* inhibitors. Mol1 is the first inhibitor of this target to be reported

Agradecimentos/Acknowledgments

Ppgbiotec UEFS, CAPES, CNPQ, FAPESB and Dr. Rafael Guido for providing access to MST equipment at IFSC

KMnO₄ as an alternative to K₂Cr₂O₇ for the Evaluation of Organic Carbon (OC) in Environmental Samples – Recovery Tests

Caroline C. Azevedo (IC);^{1*} Cristina M. Barra (PQ);¹ José G. Rocha Jr.,¹ (PQ);¹ Leila M. C. Quinteiro (PQ);¹ Otavio R. Lã (PQ)¹

cmbarra@ufrj.br; carool_campos@live.com

¹Departamento de Química Analítica, UFRRJ

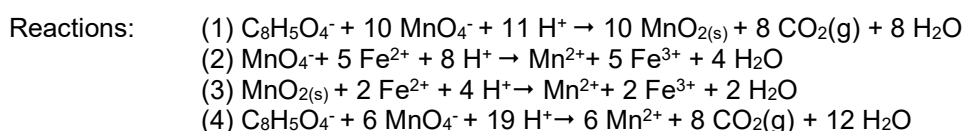
Keywords: Potassium acid phthalate; Organic matter; Titrimetric Analysis, Redox.

Highlights

The goal of this work is to study the stoichiometry involved in the determination of OC by titration with KMnO₄ in excess and retro titration with Fe²⁺.

Abstract

K₂Cr₂O₇ in acid medium has been used in the determination of organic carbon (OC) in soils,¹ although generating a relevant amount of toxic waste. In the search for a cleaner chemistry, to use KMnO₄ as a substitute to oxidize OC under optimized reaction conditions (temperature, time and acidity) is the purpose of this work. The method consists in the digestion of OC (the primary standard Potassium hydrogen phthalate – KHP was employed as a source of OC) with KMnO₄ in acidic medium under optimized digestion conditions (H₂SO₄ 0.250 mol L⁻¹ or 0.125 mol L⁻¹, 70 °C and 30 minutes), resulting in the formation of MnO₂ (reaction 1). The residual KMnO₄ (reaction 2) and the MnO₂ (reaction 3) formed were titrated with a standard solution of Fe²⁺, in acidic medium. The main issue with this method is that both, MnO₄⁻ and MnO₂, can be titrated by Fe²⁺. Thus, by applying the appropriate stoichiometry, and including reaction 4 to the previous set of reactions, it is possible to determine the amount of OC (recovery of KHP, in this case). The strategy employed in this case was the use of known masses of KHP (10, 30, 40 and 50 mg) in triplicate. % REC (equations 1, 2 and Table 1) for KHP masses of 10 and 30 mg were not significantly different (test-t, α = 0.05, compared to the theoretical %REC). For KHP masses of 40 and 50 mg, in the two acidic conditions, the amount of KMnO₄ added was insufficient to oxidize the entire amount of OC (KHP). Despite the lower recovery of KHP, the experimental results correlate with the theoretical ones, confirming that the reaction of permanganate with KHP leads to the reduction of KMnO₄ to MnO₂ under the experimental conditions used in this work.



Equations: (1) $m_{(\text{PAP})\text{experimental}} = \frac{[(\text{MV})_{\text{Fe(II)}}]}{5} \times \frac{204.24}{6}$ (2) $\% \text{REC} = \frac{m_{(\text{KHP})\text{experimental}}}{m_{(\text{KHP})\text{theoretical}}} \times 100$

where: V= volume (mL); M = molar concentration (mol L⁻¹); MM (KHP) = 204.24 mg mmol⁻¹

As in the YB method,¹ the volume of Fe²⁺ (equation 3) associated with the permanganate that reacts with the organic carbon was found by considering the blank titration (permanganate only), with and without heating.

Equation: (3) $V_{\text{Fe(II)}} = \frac{(V_{bc} - V_a) \times (V_{bs} - V_{bc})}{V_{bs}} + (V_{bc} - V_a)$

where: V_{bc}=volume Fe²⁺/KMnO₄ titration under heating; V_{bs}=volume Fe²⁺/KMnO₄ titration without heating; V_a=volume Fe²⁺/sample titration.

Table 1: Percentage Recovery (%REC) of theoretical and experimental KHP.

| KHP (mg) | H ₂ SO ₄ 0.125 mol L ⁻¹ | | H ₂ SO ₄ 0.250 mol L ⁻¹ | |
|----------|--|--------------|--|--------------|
| | % REC | | % REC | |
| | Theoretical | Experimental | Theoretical | Experimental |
| 10 | 100 | 106±3 | 100 | 99±7 |
| 30 | 100 | 104±2 | 100 | 103±3 |
| 40 | 96 | 94±2 | 93 | 91±3 |
| 50 | 79 | 82±1 | 72 | 73±1 |

References:

¹Yeomans, J.C.; Brenner, J.M., *Comm. Soil Plant Anal.*, **1988**, v 19, 1467.

Acknowledgments

UFRRJ/Programa de Iniciação Científica Voluntária (PICV-UFRRJ)

Cartridge identification and classification of gunshot residues by x-ray fluorescence spectrometry and chemometric analysis

Fernanda B. Madeira (PG),^{1*} Martha T. P. de O. Castro (PQ),¹ Cristina M. Barra (PQ),¹ André V. dos S. Canuto (PQ),² Matthieu Tubino (PQ),³ José G. Rocha Jr. (PQ)¹

geraldorochoa@ufrj.br; fernandabmadeira111@gmail.com

¹Instituto de Química, UFRRJ; ²Perícia Criminal, PCERJ; ³Instituto de Química, UNICAMP.

Keywords: Forensic ballistics, HCA, PCA, WDXRF, GSR.

Highlights

X-ray dispersion data from Wave-Dispersion X-ray Fluorescence Spectrometry (WDXRF) and chemometrics techniques as tool to provide information about identification and classification of GSR.

Abstract

X-ray fluorescence (XRF) is a rapid technique for the determination of inorganic constituents¹ and has been employed for qualitative analysis based on organic compounds.² In this work, WDXRF was used to discriminate gunshot residues. For such, swabs containing residues collected from the hands of people who performed and did not firearm (control group) and brake were analyzed directly by the WDXRF and the data were treated by chemometric methods (PCA and HCA). The residues were discriminated according to their type (GSR or not) and the cartridge, showing that the use of X-ray fluorescence spectrometry has potential to be another tool in GSR non-destructive classification. The score plot of PC1 (49%) versus PC2 (29%) (Figure 1A) showed the formation of three clusters: one for GSR samples and two for samples from the control group. Figure 1B shows that automotive mechanic and breaking pad formed a single group. It is worth mentioning that the mechanic who was making the brake pad change (M3) was classified in the same group as the brake pad (Bp). The painters, gas station attendants, electrician and trucker mechanic formed the other control group and the Tm2 was grouped together with GSR samples, suggesting that the residues collected from these professionals present chemical similarity in relation to the GSR constituents and attention must be given in applying this model to these people. The WDXRF technique proved to be adequate to discriminate each of the cartridges used in firing firearms by analyzing the GSRs collected from the hands of shooters and after processing the data through PCA. The fact that this is a non-destructive method allows its use together with other methods in collected samples, which leads to a better characterization and preservation of the evidence.

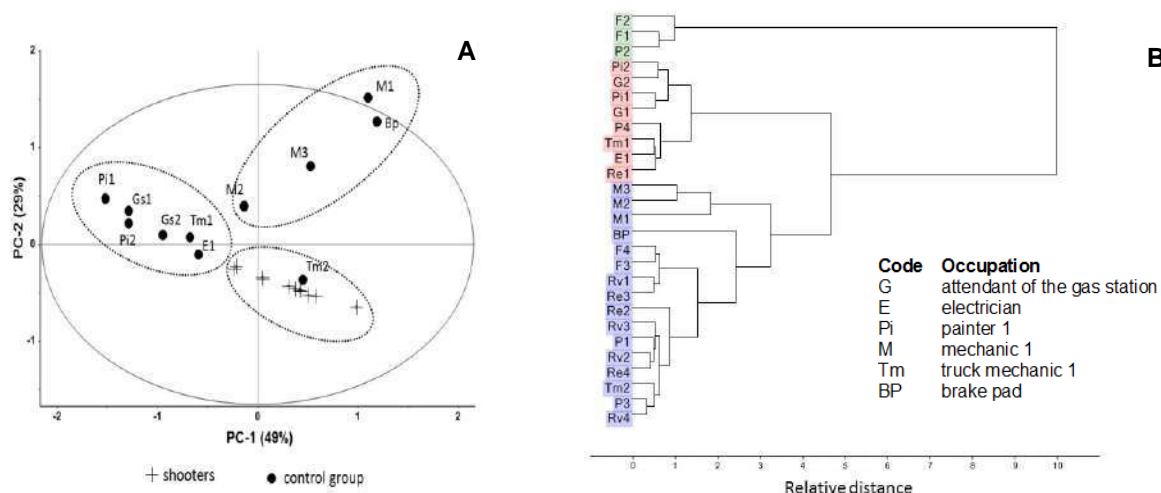


FIGURE 1: A- Scores plot of PC1 versus PC2 with GSR and control group samples. B- Dendrogram obtained from HCA by the Ward method highlighting the formation of 3 groups: one for GSR sample and two for samples from control group.

Acknowledgments

This study was financed in part by the Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior - Brasil (CAPES) - Finance Code 001.

References: ¹Jenkins, R. X-ray Fluorescence Spectrometry, 2nd ed., Wiley - Interscience, New York, 1999; ²Bueno, M.I.M.S., et al. Chemo. Int. Lab. Systems, 78(1), 96-102.

Regioselective C4-Ethoxylation of 2,4-dichloroquinoline.

Pedro H. V. Vontobel (PG),¹ **Rodrigo S. Fuscaldo** (PG),¹ **Francisco P. dos Santos** (PQ),¹ **Jessie S. da Costa** (PQ).^{1*}

pedrovontobel@gmail.com; jessie.sobieski@ufrgs.br

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

Key Words: 4-substituted-quinolines; 2,4-dichloroquinoline; regioselective synthesis.

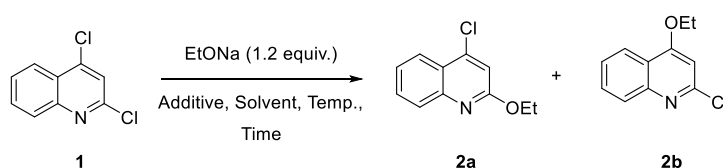
Highlights

Quinolone derivatives are useful in diverse applications, and are available as several drugs today, like antimalarials, antibacterial, anticancer and many others.¹ Despite their biological relevance, there is no study over the regioselective conditions to achieve 4-alkoxy-2-halogenoquinolines, which can be used as key intermediates for the synthesis of 2-substituted quinolones. Here we describe a simple and efficient protocol to furnish regioselectively the 4-ethoxy-2-chloroquinoline **2b**, employing 18-crown-6-ether as an additive.

Abstract

Despite the regioselective monoalkoxy-dehalogenation of 2,4-dihalogenoquinolines being well established to furnish exclusively the 2-alkoxy-4-halogenoquinolines, there is no study concerning the reaction conditions optimization for the selective obtainment of 4-alkoxy-2-halogenoquinolines isomers. Therefore, we decided to study the regioselective synthesis of 4-ethoxy-2-chloroquinoline, which can be used as intermediate for the synthesis of 2-substituted quinolones. Compound **2b** can be obtained by the aromatic nucleophilic substitution of 2,4-dichloroquinoline **1** using sodium ethoxide. However, this reaction can lead to the formation of 2- or 4-substitution products, and the yield and **2a** and **2b** isomer ratio are heavily influenced by reaction conditions (Table 1). The addition of the crown ether was designed to increase the amount of 4-substitution by reducing the postulated complexation of quinoline nitrogen to sodium, which favours 2-substitution.² Under these conditions, the crown ether increased the ratio of 4-substitution to 2-substitution from 88:12 to 34:66 (Entry 1-3). Different solvents were studied for the reaction, and acetonitrile and ethanol induced to better selectivity and yield for the desired isomer **2b** (Entry 3-6). Furthermore, it was observed that the temperature had no direct influence on the regioselectivity of the reaction (Entry-7).

Tabela 1. Optimization of regioselective C4 ethoxylation of 2,4-dichloroquinoline.



| Entry ^a | Additive | Solvent | Time (h) | Temp (°C) | Yield 2a (%) ^b | Yield 2b (%) ^b | Ratio 2a:2b |
|--------------------|----------------|-------------|----------|-----------|---------------------------|---------------------------|-------------|
| 1 | - | THF | 1 | 50 | 66 | 9 | 88:12 |
| 2 | 15C5 (20 mol%) | THF | 3 | 50 | 35 | 48 | 42:58 |
| 3 | 18C6 (20 mol%) | THF | 1 | 50 | 28 | 55 | 34:66 |
| 4 | 18C6 (20 mol%) | 1,4-dioxane | 2 | 50 | 35 | 40 | 47:53 |
| 5 | 18C6 (20 mol%) | MeCN | 2 | 50 | 20 | 49 | 29:71 |
| 6 | 18C6 (20 mol%) | EtOH | 2 | 50 | 34 | 56 | 38:62 |
| 7 | 18C6 (20 mol%) | EtOH | 48 | t.a. | 28 | 52 | 35:65 |

^a Reaction was monitored by TLC until the 2,4-dichloroquinoline was totally consumed.

^b Isolated yield.

15C5: 15-crown-5; 18C6: 18-crown-6.

Acknowledgments

The authors would like to thank CNPq and CAPES/PROEX for the financial support.

[1] Verma, P. K., et al., *Res. Chem. Intermed.*, **2017**, 43, 2765.

[2] Jarvest, R. L., et al., *Bioorg. Med. Lett.*, **2003**, 4, 665.

42^a Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química: Eixos Mobilizadores em Química

Área: INO

Inscrição: 00310

Atrazine degradation catalyzed by manganese porphyrins: determination of products and evaluation of its toxicity

Ana Luísa Almeida Lage (PG)^{1*}, Juliana Martins Ribeiro (PG)², Elaine Maria de Souza-Fagundes (PQ)², Michelle Fernanda Brugnera (PQ)³, Dayse Carvalho da Silva Martins (PQ)^{1**}

*analuisalage@gmail.com; **daysecsm@yahoo.com.br

¹Departamento de Química, ICEx, UFMG; ²Departamento de Fisiologia e Biofísica, ICB, UFMG; ³Departamento de Química, UFMT

Keywords: Agrotoxic, Metalloporphyrins; Biomimetic Reactions; Homogeneous Catalysis.

Highlights

Some Mn-porphyrins were used for atrazine degradation; It was achieved up to 100% of atrazine degradation in surface water (from a river) when PhI(OAc)₂ was used as oxidant; The products have not shown cytotoxicity to human blood cells.

Abstract

Atrazine (ATZ) is a toxic herbicide that has been considered an environmental pollutant worldwide. It persists in soils and water and causes several environmental problems. We investigated the ATZ degradation catalyzed by first-, second-, and third-generation manganese porphyrins as biomimetic cytochrome P450 models. PhIO and PhI(OAc)₂ were used as oxidant under mild conditions.

The studied catalysts were: [Mn^{III}(TPP)Cl], **MnP1**; [Mn^{III}(T4CMPP)Cl], **MnP2**; [Mn^{III}(Br₈T4CMPP)Cl], **MnP3**; [Mn^{III}T4CPP]³⁻, **MnP4** and [Mn^{III}Br₈T4CPP]³⁻, **MnP5**. ATZ degradation reactions were carried out by using the catalyst/oxidant/substrate molar ratio 1:100:10. The manganese porphyrin (6.0 × 10⁻⁹ mol), oxidant, and ATZ were added in acetonitrile. Reactions were kept in a box under magnetic stirring at 25 °C for 24 h. All reactions were analyzed by high performance liquid chromatography equipped with UV detector and the products were analyzed by mass spectrometry (MS and MS²). The reactions were replicated by using surface water collected from a river of Cuiabá, MT, Brazil.

Regarding to the oxidant, PhIO provided the best result; ATZ degradation catalyzed by a second-generation metalloporphyrin (**MnP2**) in acetonitrile was as high as 47%. For PhI(OAc)₂, the best result was obtained by using the **MnP3** catalyst (38% degradation). We studied the same catalyst/oxidant systems in surface water (from a river) as solvent and it was obtained up to 100% of ATZ degradation by using PhI(OAc)₂, regardless of the manganese porphyrin. The increasing of ATZ degradation in surface water could be related to factors such as the presence of other species that could act as an axial binder to Mn porphyrin center; or the presence of other oxidants in water that could act synergistically with PhI(OAc)₂ or PhIO. Besides the already known ATZ degradation products (from literature), we also identified unexpected degradation compounds, with mass values m/z smaller than 100, which means that breaking products of triazine ring were obtained. Toxicity tests for the obtained products were performed by using human peripheral blood mononuclear cells (PBMCs) from healthy subjects. PBMCs include monocytes, lymphocytes, and macrophages and provide answers to questions about the toxicity of substances in humans, especially in their immune system. Toxicity can cause various serious, even fatal, toxic side effects, including immune system suppression and toxicity. Blood cells are interesting *ex vivo* models to predict the beneficial or toxic effects promoted by new therapies, chemicals, and/or drugs. Such models enable high translationality to clinical studies if the specific characteristics of the donor are considered. In this sense, studying the interaction of blood cells with chemicals can provide us with an early indication of how a substance affects the human body. The products obtained from ATZ degradation by Mn-porphyrins were not toxic under the evaluated conditions. Therefore, the studied Mn-porphyrins may be good allies for atrazine degradation in surface water systems, and they have shown to be promising catalysts for the degradation of other pesticides.

Acknowledgments

CNPq, CAPES and FAPEMIG.

Área: QPN

(Inserir a sigla da seção científica para qual o resumo será submetido. Ex: ORG, BEA, CAT)

Nº de Inscrição: 00311

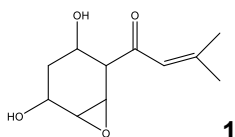
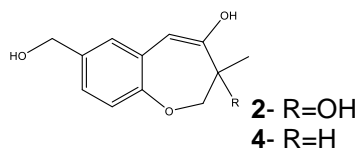
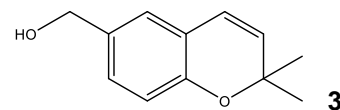
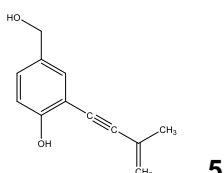
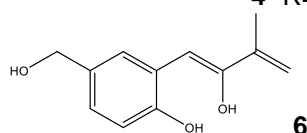
(Inserir o número de inscrição do autor que fez a submissão)

Chemical and biological study of the endophytic fungus *Anthostomella brabeji* (Xylariaceae), cultivated in the presence of metallic elicitors.Giulia Polinário (IC),¹ Felipe Hilário (PG),¹ Marcelo Rodrigues de Amorim (PG),² Weslei Bruno Botero (PG),² Tais Maria Bauab (PQ),¹ Lourdes Campaner dos Santos (PQ).²gpolinario@gmail.com; lourdes.campaner@unesp.br¹ São Paulo State University, Department of Biological Sciences, Araraquara, SP, Brazil; ² UNESP - São Paulo State University, Chemistry Institute – Araraquara, SP, Brazil;**Keywords:** *Anthostomella brabeji*, *Paepalanthus planifolius*, Endophytic fungi, Chemical elicitation.**Highlights**

Chemical elucidation of the main metabolites present in the ethyl acetate extract using chemical elicitation from endophytic fungus *Anthostomella brabeji*, (Xylariaceae) associated to the chapters of *Paepalanthus planifolius* (Eriocaulaceae). with antifungal activity was performed. The compounds were characterized by 1D and 2D NMR techniques as well as HRESIMS.

Resumo/Abstract

The aim of this work was chemically and biologically characterized the ethyl acetate (AcOEt) from endophytic fungus *Anthostomella brabeji*, (Xylariaceae) associated to the chapters of *Paepalanthus planifolius* (Eriocaulaceae). In order to increase production and diversification of secondary metabolites, the chemical elicitation approach was employed in the culture in liquid medium in potato-dextrose broth (PDB). The endophytic *A. brabeji* was cultivated in the presence of the Cu²⁺ ions. The extract was then fractionated by Sephadex-LH 20 and resulted in fractions that were studied by HPLC-DAD and later isolated by classical and high performance chromatographic techniques. Six compounds were structurally determined by spectroscopic techniques, being: 1- (3,5-dihydroxy-7-oxabicyclo [4.1.0] heptan-2-yl) -3-methylbut-2-en-1-one (**1**); 7-(hydroxymethyl) -3'-methyl-3,4-dihydrobenzo [b] oxepin-2', 3'-diol (**2**); 2,2-dimethyl-2H-chromen-6-yl) methanol or 2,2-dimethyl-6-hydroxymethylchromene (**3**); 7-(hydroxymethyl) -3-methyl-2,3-dihydrobenzo [b] oxepin-4-ol (**4**); Ethypinol or 4-Hydroxy-3-[3-methyl-3-buten-1-ynyl] benzyl alcohol (**5**) and (Z) -2-(2-hydroxy-3-methylbut-1,3-dien-1-yl) -4-(hydroxymethyl) phenol (**6**), (Figure 1). The ExAcOEt showed good antifungal activity, with MIC value of 500 µg.ml⁻¹ against *C. tropicalis*, *C. glabrata* and *C. albicans*. The Minimum Fungicide Concentration (CFM) for AcOEt was 500 µg.mL⁻¹ for *C. albicans* and *C. tropicalis*, exhibiting fungistatic behavior for *C. glabrata*.

**1****2- R=OH****4- R=H****3****5****6****Agradecimentos/Acknowledgments**

FAPESP: CNPq

Área: ORG

(Inserir a sigla da seção científica para qual o resumo será submetido. Ex: ORG, BEA, CAT)

Nº de Inscrição: 00312

(Inserir o número de inscrição do autor que fez a submissão)

Synthesis of Cyclic Nitroxides With Properties of Biological Activity

Alessandro k Jordão* (PQ),^{1,2} **July E. S. Santos** (IC)**akjordao@gmail.com**¹Unidade Universitária de Farmácia, UEZO; ²Departamento de Farmácia, UFRN

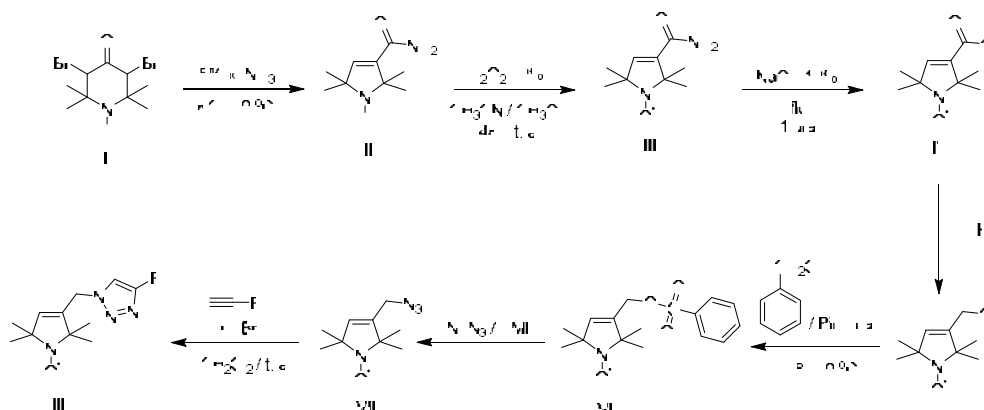
Palavras Chave: Nitroxides, Free Radicals, Antioxidants.

Highlights

Synthesis of nitroxides. Nitroxides are stable free radicals that are receiving attention as potential therapeutic agents because of their pronounced antioxidant properties and their low toxicity.

Resumo/Abstract

The Reactive Oxygen Species (ROS) / Reactive Nitrogen Species (RNS) are produced naturally by the human organism during oxidation, so they are involved in energy generation, phagocytosis, cell growth regulation, intercellular signaling and synthesis of important biological substances. The several quantities of EROS / ERN from biological dysfunctions are linked to side damaging to the human body and it is associated to quite pathologies.¹ This amount in the body is fought by antioxidants. The cyclic nitroxides are synthetic compounds which are highlighted in this field due to they have a high therapeutic power, anti-inflammatory, antioxidant, have low toxicity and are stable.² By the way, the objective of this work is the synthesis of the cyclic nitroxides derivatives with prospecting of biological activity. The methodology of preparation of the nitroxides involves the synthesis of the intermediate 2,2,5,5-tetramethylpyrroline-3-carboxamide (II) and the 3-Carbamoyl-2,2,5,5-tetramethylpyrroline-1-oxyl nitroxide (III). These compounds were obtained by favorskii and oxidation reaction, respectively. The new cyclic nitroxides (VIII) will be prepared exploring the click chemistry reaction to form 1,2,3-triazoles. Nitroxides and its derivatives, including the intermediate compounds prepared, will be sent for biological evaluation (Scheme 1).



Scheme 1: Synthetic route of new 1,2,3-triazoles derived from nitroxides

1. Halliwell, B.; Gutteridge, J. M. C. *Free Radicals in Biology and Medicine*, 5th ed., Clarendon Press: Oxford, 1999.

2. Queiroz, R. F.; Jordão, A. K.; Cunha, A. C.; Ferreira, V. F.; Brigagão, M. R. P. L.; Malvezzi, A.; do Amaral, A. T.; Augusto, O. Nitroxides attenuate carrageenan-induced inflammation in rat paws by reducing neutrophil infiltration and the resulting myeloperoxidase-mediated damage. *Free Radical Biology and Medicine* **2012**, 53, 1942-1953.

Agradecimentos/Acknowledgments

FAPERJ, UEZO, UFRN

Synthesis of ethy 6-amino-5-cyano-2-methyl-4-phenyl-4H-pyran-3-carboxylate catalyzed by polyethyleneimine supported in ionic liquid.

Jhonathan Renner N. dos Santos (PG)¹, Luciana Machado Ramos (PQ)¹, Juliana Gonzaga de Moraes (PG)¹, Andreia Ribeiro dos Santos (PG)¹

jhonathanquimica@gmail.com

¹Laboratório de Química Medicinal e Síntese Orgânica - Universidade Estadual de Goiás -Campus de Ciências Exatas e Tecnológicas, Anápolis, Goiás, Brazil.

Palavras Chave: 4H-pyran, Ionic Liquids, Multicomponent Reaction

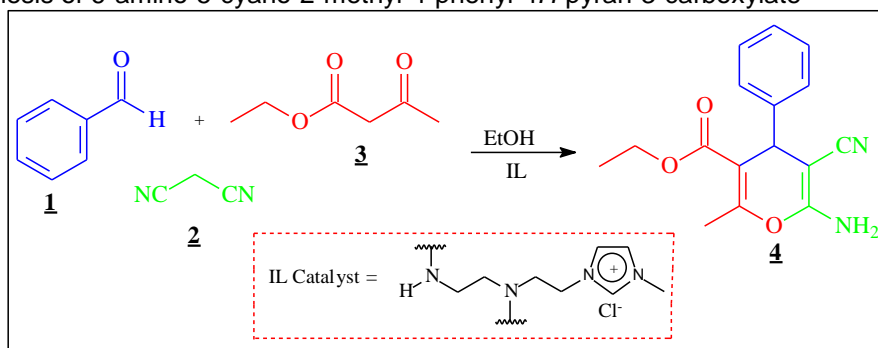
Highlights

A compound derived from 4H-pyran was synthesized by means of a multicomponent reaction, where good yield was obtained, used as a polyethyleneimine catalysis medium supported in ionic liquid.

Resumo/Abstract

Heterocyclics 4H-pyrans and their derivatives have been studied mainly because they have biological and pharmacological potentialities as antitumor activity, inhibition of apoptosis, bactericidal, antirheumatic, anticoagulant and anti-anaphylactic^[1,2]. Because of the importance of 2-amino-4H-pyrans, the utility artificial enzyme of ionic liquid is investigated for the one-pot synthesis of 2-amino-4H-pyrans. A mixture of aromatic aldehyde **1**, malononitrile **2** and ethyl acetoacetate **3** was stirred in 1 mL ethanol and 100 mg of artificial synthetic enzyme (IL):

Scheme 1. Synthesis of 6-amino-5-cyano-2-methyl-4-phenyl-4H-pyran-3-carboxylate



Acid and basic catalysts and LIs were investigated. In this context, the exposed IL the Scheme 1, was used as promoter of the catalytic reaction medium, having good yields between 64 – 77 %. The artificial synthetic enzyme (IL) was synthesized as reported in the literature^[3], where polyethyleneimine was supported on chlorinated (1-(2-chloroethyl)-3-methylimidazolium). The product under study was recrystallized and then characterized by IR, MS and ¹H and ¹³C NMR. In this context, the synthetic methodology exposed contributed to obtain a compound with biological potential, based on the principles of green chemistry, where greater incorporation of the reactant atoms is required to obtain the desired compound with the least number of steps, alternative means and reusability of IL.

References

- [1] LÜ, C.; WANG, J.; LI, F.; YU, S.; YUE, A. **Research on Chemical Intermediates**, v. 44, n. 2, p. 1035-1043, 2017.
- [2] WAGH, Y. B.; TAYADE, Y. A.; PADVI, S. A.; PATIL, B. S., PATIL, N. B.; DALAL, D. S. **A Chinese Chemical Letters**, v. 26, n. 10, p. 1273-1277, 2015.
- [3] FERREIRA, J. G. L.; RAMOS, L. M.; OLIVEIRA, A. L.; ORTH, E. S.; NETO, B. A. D. **The Journal of Organic Chemistry**, v. 80, n. 11, p. 5979-5983, 2015.

O ano internacional da Tabela Periódica: Kit multi jogos para aprender brincando.

Marcos Hirata Kobori, Ana Maria Pires (PQ)^{1*}, Gustavo Bizarria Gibin (PQ)¹.

* ana.maria@unesp.br

¹Departamento de Química e Bioquímica, FCT-UNESP.

Palavras Chave: elementos químicos, jogos, educação lúdica.

Highlights

The international year of the Periodic Table: Multi games kit to learn by playing. Educational game as a motivating tool for the learning of chemical knowledge. Adaptation of 21 games from the chemical elements distributed in ten families to facilitate their memorization and recognition.

Resumo

A busca por abordagens alternativas no processo de ensino-aprendizagem que despertem o interesse do estudante com relação a conceitos relacionados à Química, principalmente no Ensino Médio, é um dos maiores desafios dos professores hoje. Segundo Cunha (2012)¹, é num contexto como esse que o jogo didático ganha espaço como instrumento motivador para a aprendizagem de conhecimentos químicos, à medida que propõe um estímulo ao interesse do estudante. Na literatura encontram-se vários exemplos do uso de jogos como instrumentos didáticos, por exemplo: “Os Jogos Educacionais de Cartas como Estratégia de Ensino em Química”² e “Tabela Periódica - Um Super Trunfo para Alunos do Ensino Fundamental e Médio”³. Inspirado pelo fato de que 2019 é o Ano Internacional da Tabela Periódica dos Elementos Químicos, neste trabalho, criamos um conjunto de peças baseado nela. Com estas peças, fizemos a adaptação de diversos jogos, adotando a tabela periódica clássica com os elementos distribuídos em dez famílias, que facilita a memorização e reconhecimento da posição deles na mesma. Desta forma, a partir das 61 peças que compõem o jogo, foram adaptados 21 jogos, dentre eles os de mesa, tais como, dominó, batalha naval, War, quebra-cabeça, memória, trunfo; e do tipo baralho, sendo eles, truco, 21, scopa15, poker, rouba monte, pife-pafe, buraco, paciência, mico, duvido. Imagens das peças e do kit produzido podem ser visualizadas na Figura 1. Este jogo está em fase de avaliação metodológica a partir da sua aplicação a alunos do Ensino Médio de escolas públicas de Presidente Prudente e região. Deve-se ressaltar que ele também pode ser utilizado por todos que se interessarem pelo desafio e pela diversão de jogar, mesmo sem o conhecimento da Tabela Periódica. A adaptação de novos jogos é ainda possível, principalmente a partir da contribuição de professores, licenciandos em Química e estudantes da Educação Básica.



Figura 1: (a) Kit completo, com peças, jogos, dado, regras, planilhas de pontuação e gabarito. (b) Peças do jogo em evidência e a legenda.

References

- [1] Marcia Borin da Cunha. Química Nova na Escola, Vol. 34, Nº 2, 2012, 92-98.
 [2] Patrícia Barreto Mathias Focetola, et al. Química Nova na Escola, Vol. 34, Nº 4, 2012, 248-255.
 [3] Thiago Andre de Faria Godoi, et al. Química Nova na Escola, Vol. 32, Nº 1, 2010, 22-25.

Área: ANA

Nº de Inscrição: 00317

Valorização da palha de café por pirólise lenta e caracterização química dos produtos líquidos por GC×GC-TOFMS

Kelly P. Soares (IC),* Nathália S. Pontes (PG), Vanessa O. Nunes (PG), Débora A. Azevedo (PQ), Raquel V.S. Silva (PQ)

kellysoares@ufrj.br; raquelvieira@iq.ufrj.br

Laboratório de Geoquímica Orgânica Molecular e Ambiental (LAGOA-LADETEC), Instituto de Química, UFRJ

Palavras Chave: GC×GC-TOFMS, Resíduos da indústria cafeeira, Pirólise, Palha de café.

Highlights

Valuation of coffee straw by slow pyrolysis and chemical characterization of liquid products by GC×GC-TOFMS.

Bio-oil and aqueous phase were obtained by slow pyrolysis of coffee straw. Pyrolysis liquid products were analysed by GC×GC-TOFMS.

Resumo/Abstract

O Brasil é o maior produtor e exportador de café e segundo maior consumidor da bebida no mundo [1] e, devido à essa grande produção, são gerados muitos resíduos, como a palha de café. Assim, este trabalho tem por objetivo a valorização da palha de café por pirólise lenta e a caracterização química a nível molecular dos produtos líquidos da pirólise (bio-óleo e fração aquosa) utilizando a cromatografia gasosa bidimensional abrangente acoplada a espectrometria de massas por tempo de voo (GC×GC-TOFMS).

A palha do café foi obtida do beneficiamento do café da espécie arábica por despolpa úmida na fazenda de Santa Clara localizada na cidade de Pedra Dourada, estado de Minas Gerais. A biomassa foi convertida por pirólise lenta a 400°C e 15 °C min⁻¹ apresentando rendimento em massa de aproximadamente 32% para a fração aquosa e 6% para o bio-óleo. O extrato orgânico da fração aquosa foi obtido por extração líquido-líquido com diclorometano e o bio-óleo foi analisado sem pré-tratamento. Para a análise por GC×GC-TOFMS, as colunas utilizadas foram uma DB-5, 5%-fenil-96%-metilsiloxano na primeira dimensão (1D) e BPX50, 50%-fenil-50%-metilsiloxano na segunda dimensão (2D). A programação de temperatura no primeiro forno foi de 35 °C a 330 °C a 3 °C min⁻¹ e a programação do segundo forno foi paralela e com temperatura 10 °C maior que a do primeiro forno. O período de modulação foi de 7 segundos. O processamento dos dados foi realizado com razão sinal ruído (S/N) mínimo de 500. O critério para análise foi uma similaridade dos espectros de massas obtidos acima de 70% em comparação com os da biblioteca NIST.

Hidrocarbonetos alifáticos e aromáticos (série homologa de parafinas de C₁₀-C₃₃, olefinas de C₉-C₂₃ e benzenos de cadeia alquílica de C₉-C₁₆), compostos oxigenados (como fenóis, cetonas, ésteres, ácidos carboxílicos, ciclopentanonas) e compostos nitrogenados, como a cafeína, foram identificados no bio-óleo. Na fração aquosa foram identificados como principais grupos as lactonas, furanonas e metóxi-fenóis.

Com a caracterização química por GC×GC-TOFMS, foi possível definir os perfis do bio-óleo e da fração aquosa da palha do café, e isso possibilita determinar os potenciais usos desses produtos, tornando a indústria cafeeira mais sustentável.

[1] CONAB – Companhia Nacional de Abastecimento. Acompanhamento da safra brasileira - 1º levantamento da safra do café. Janeiro 2018 Disponível em: http://www.sapc.embrapa.br/arquivos/consorcio/levantamento/conab_safra2018_n1.pdf f. Acessado em: 28 de novembro de 2018.

Agradecimentos/Acknowledgments

Ao CNPq, CAPES pelo auxílio financeiro e a Fazenda Santa Clara pelo fornecimento da Palha de Café.

Área: MED

Nº de Inscrição: 00318

Avaliação do potencial tóxico e da atividade antioxidante da **O**-carboximetilquitosana guanilada

Elisa G.B. Carvalho (PG),^{1*} Roberta Signini¹ (PQ), Maísa Borges Costa (PQ)¹elisaans@gmail.com

¹ Laboratório de Síntese, Isolamento e Modificações de Compostos Orgânicos (LabSIMCO) – Campus de Ciências Exatas e Tecnológicas Henrique Santillo – Universidade Estadual de Goiás (UEG-CCET); Caixa Postal 459, Cep. 75132-400 – Anápolis-Go – Brasil

Palavras Chave: Quitosana, Carboximetilquitosana, Guanilação, DPPH, *Artemia salina*.

Highlights

Evaluation of toxic potential and antioxidant activity of O-carboxymethyl chitosan guanilated

o-Carboxymethylchitosan (*o*-CMQ) **1** is a derivative of water-soluble chitosan **2**, in order to improve the existing properties of *o*-CMQ **1**, as well as to increase its solubility range, guanylation reactions were performed on substituted thioureas to obtain guanylated *o*-Carboxymethylchitosan **3**. The objective of this work was the study of the toxic potential against Brine shrimp and the evaluation of the antioxidant activity of *o*-CMQ **1** and *o*-CMQG **3**.

Resumo

A *o*-Carboximetilquitosana (*o*-CMQ) **1** é um derivado da quitosana **2** solúvel em água que possui propriedades atrativas para modificações estruturais, como bioatividade, compatibilidade e estabilidade. Moléculas hidrofóbicas têm sido empregadas para modificar a *o*-CMQ **1** no desenvolvimento de polímeros anfífilos.¹ Com o objetivo de conservar ou melhorar as propriedades existentes da *o*-CMQ **1**, assim como aumentar sua faixa de solubilidade, foram realizadas reações de guanilação em tioureas substituídas para a obtenção da *o*-Carboximetilquitosana guanilada **3** (*o*-CMQG).² A *o*-CMQG **3** apresentou uma maior faixa de solubilidade em relação à quitosana **2** e a *o*-CMQ **1**, podendo assim melhorar as condições da avaliação do seu potencial biológico/farmacológico.

Os ensaios empregados a partir do teste de letalidade frente à *Artemia salina* (TAS) apresentam-se como uma ferramenta viável, devido sua simplicidade, eficiência, rapidez, baixo custo e principalmente por permitir boas correlações de citotoxicidade dentre outras propriedades biológicas. Entre diversos métodos utilizados para avaliar a atividade antioxidante de um composto, o método de sequestro do radical 2,2-difenil-1-picril-hidrazil (DPPH) é bastante utilizado por ser um método rápido e de simples execução.

Neste trabalho vislumbrou-se o estudo do potencial tóxico frente a *A. salina* e a avaliação da atividade antioxidante da *o*-CMQ **1** e da *o*-CMQG **3**.

O teste de letalidade frente a *A. salina* (TAS) com a *o*-CMQG **3**, apresentou um CL50 de 164,37 ppm, nota-se que esse valor é menor que 1000 µg/mL, podendo assim considerar que a *o*-CMQG **3** possui atividade biológica. Com um CL50 entre 80 µg/mL e 250 µg/mL, esse composto apresenta uma toxicidade moderada. Já no teste de DPPH a determinação do CI50 foi através dos valores das médias obtidas das triplicatas de cada teste. Utilizou-se como padrão a rutina (CI50 de 6,7 mg/L). A *o*-CMQG **3** com CI50 de 114,86 mg/L apresentou uma atividade antioxidante mais acentuada que a *o*-CMQ **1** com um IC50 negativo de -10.649,3 mg/L.

A partir do resultado obtido do CL50 temos que a *o*-CMQG **3** pode apresentar atividade biológica, sendo assim foi testado seu potencial antioxidante no qual verificou-se que esse composto possui uma atividade antioxidante mais relevante que a *o*-CMQ **1**.

Agradecimentos

Agradecemos a Universidade Estadual de Goiás por todo o suporte fornecido e ao grupo de pesquisa LaBSIMCO. O presente trabalho foi realizado com apoio da Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior - Brasil (CAPES).

Referências bibliográficas

¹ DU, H., LIU, M., YANG, X., & ZHAI, G. **The role of glycyrrhetic acid modification on preparation and evaluation of quercetin-loaded chitosan-based self-aggregates.** Journal of Colloid and Interface Science, 460, 87–96. 2015

² CARVALHO, E. G. B., BORGES, M. C., SIGNINI, R. Synthesis of Carboxymethyl chitosans Derivatives. In: **17th Brazilian Meeting on Organic Synthesis (17th BMOS)**-Sociedade Brasileira de Química 21th – 24th of October 2018, in Salvador, Bahia, Brazil.

42ª Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química: Eixos Mobilizadores em Química

Stabilization of the free radical derived from the *N,N,N',N'*-tetramethyl-*p*-phenylenediamine and its use to quantify the antioxidant activity of teas

Fernanda Fraile D. do Nascimento (PG)¹, Lucas Belini Oliveira (IC)¹, Cícera Pimenta Marcelino (PG)¹, Horacio Dorigan Moya (PQ)^{1*}

fefraile@gmail.com; horacio.moya@fmabc.br

¹Faculdade de Medicina da Fundação do ABC – CEPES (Centro de Estudos, Pesquisa, Prevenção e Tratamento em Saúde) – CEP – 09060-650 – Santo André – SP – Brazil.

Key words: *N,N,N',N'*-tetramethyl-*p*-phenylenediamine, antioxidant activity, teas, spectrophotometry.

Highlights

The total antioxidant activity of tea samples was quantified by a spectrophotometric assay based on the consumption of the colored free radical cation derived from *N,N,N',N'*-tetramethyl-*p*-phenylenediamine

Resumo/Abstract

N,N,N',N'-tetramethyl-*p*-phenylenediamine (Wurster's blue, TMPD, Fig. 1) is an aromatic amine that has been used as basis of a colorimetric qualitative test for bacterial oxidase activity¹. It was found that in aqueous solution at $3.8 \leq \text{pH} \leq 12$ TMPD is oxidized by Fe^{3+} , $\text{S}_2\text{O}_8^{2-}$, MnO_2 and $\text{Co}(\text{OH})_3$ originating over time its purple free radical $\text{TMPD}^{\bullet+}$ (λ_{max} 563 nm). The best experimental conditions for the formation and stabilization of $\text{TMPD}^{\bullet+}$ are: Fe^{3+} 0,979 mg/mL and TMPD 0,474 mg/mL¹ in acetate buffer (pH 5.0) after 15 min. (Eq. 1). Since $\text{TMPD}^{\bullet+}$ is consumed by antioxidant compounds (AOs) this reaction was used as an alternative spectrophotometric assay to quantify the total antioxidant activity (TAC) of teas (Eq. 2).

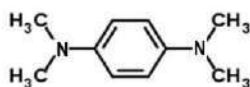
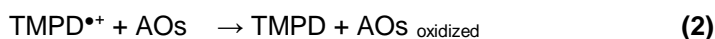
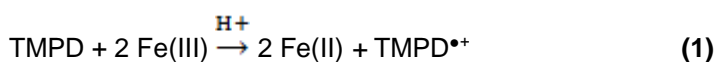


Fig.1



Ascorbic acid, AA, which also consumes the $\text{TMPD}^{\bullet+}$ in aqueous solution was chosen to quantify and express the TAC values. The TAC values found with $\text{TMPD}^{\bullet+}$ assay (for 6 teas) showed strong agreement ($r^2 = 0.848$) with the results obtained with $\text{ABTS}^{\bullet+}$, a well-known method^[2] also based on the consumption of a free radical. Besides, a paired *t*-test^[3] performed with the values obtained with these methods showed no significant statistical difference ($t = 0.883$) for the analyzed samples. In addition, the assay presented here also showed positive correlation with the total polyphenol content (TPC) obtained with the Folin-Ciocalteu reagent^[4] ($r^2 = 0.674$), suggesting that in these samples the antioxidant activity is related to the phenolics.

Table 1 – Antioxidant activity values and polyphenol content for the teas analyzed.

| Tea sample | Scientific name | $\text{TMPD}^{\bullet+} \times 10^2$ (a) | $\text{ABTS}^{\bullet+}/10^4$ (b) | TPC (c) |
|------------|----------------------------|--|-----------------------------------|------------------|
| White 1 | <i>Camelia sinensis</i> | 8.80 ± 0.53 | 30.9 ± 0.3 | 129.1 ± 3.0 |
| Chamomile | <i>Matricaria recutita</i> | 43.7 ± 2.5 | 1.9 ± 0.2 | 14.5 ± 0.4 |
| White 2 | <i>Camelia sinensis</i> | 8.1 ± 0.6 | 25.2 ± 1.1 | 126.7 ± 6.5 |
| Matte 1 | <i>Ilex paraguariensis</i> | 31.3 ± 1.3 | 14.7 ± 0.4 | 115.9 ± 0.96 |
| Black | <i>Camelia sinensis</i> | 27.1 ± 0.5 | 12.3 ± 0.4 | 69.5 ± 1.4 |
| Matte 2 | <i>Ilex paraguariensis</i> | 28.2 ± 4.3 | 10.8 ± 0.7 | 73.4 ± 1.4 |

DM is dry material; a = $\text{TMPD}^{\bullet+}$ is expressed in g AA/ g DM; b = $\text{ABTS}^{\bullet+}$ is expressed in μM trolox/g DM; c = TPC is in g gallic acid/ 100 g DM; ABTS is 2,2'-Azino-bis (3-ethylbenzothiazoline-6-sulfonic acid) diammonium salt; All results are average and standard deviation of triplicates.

1] Butler, M. J.; Lanchance, M. A. *Anal. Biochem.*, 162, 443-445, 1987.

2] Nenadis, N.; Wang, L. F.; Tsinidou, M.; Zhang, H. Y. *J. Agric. Food Chem.*, 52, 4669–4674, 2004.

3] Jeffery et al. *Textbook of Quantitative Chemical Analysis*, 5th Ed, Longman: New York, 142, 1989.

4] Anvisa. Agência Nacional de Vigilância Sanitária. *Brazilian Pharmacopoeia*, p. 204-206, Vol 1. 5th Ed., Brasília, 2010.

Área: ANA

Inscrição: 00320

Reducing capacity of eye drops based on the scavenging of the free radical cation derived from N-(4-methoxyphenyl)-1,4-phenylenediamine

Cinthia dos Santos (IC), Renato Lessa (PQ), Horacio D. Moya (PQ)*.

cinthiadossantosfmabc@gmail.com; horacio.moya@fmabc.br

Faculdade de Medicina da Fundação do ABC – Centro de Estudos, Pesquisa, Prevenção e Tratamento em Saúde – CEP – 09060-650 – Santo André – SP – Brazil.

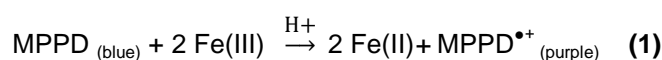
Key words: Reducing capacity, N-(4-methoxyphenyl)-1,4-phenylenediamine, eye drops, spectrophotometry.

Highlights

Scavenging of the free radical cation originated from the oxidation of N-(4-methoxyphenyl)-1,4-phenylenediamine was used in a reaction to evaluate the reducing capacity of eye drops.

Abstract

The free radical cation derivative $MPPD^{\bullet+}$ can be prepared from oxidation of MPPD (N-(4-methoxyphenyl)-1,4-phenylenediamine) by Fe(III) in acetate buffer (pH 4.0)¹ as shown in Eq. 1.



The addition of eye drops in solution containing $MPPD^{\bullet+}$ (λ_{max} 569 nm) promotes its consumption which may lead to a spectrophotometric assay to evaluate the total reducing capacity (TRC) of these samples.

Measurements of absorbance at 569 nm after 5 min. (using water as reference solution) gave rise the absorption spectra shown in Fig. 1 where (I) = MPPD 1.5×10^{-1} mg mL⁻¹ + Fe(III) 6.7×10^{-3} mg mL⁻¹ in acetate buffer (pH 4,0); (II), (III), (IV), (V) and (VI) = drops (3 -10) of different samples + (I).

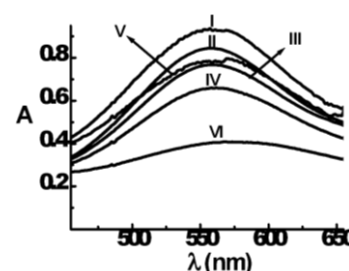


Fig.1

Ascorbic acid (AA), which also consumes $MPPD^{\bullet+}$ and is present (as ascorbate) in tissues and ocular fluids² was chose to express TRC values (mg AA dL⁻¹). For comparison, the TRC values obtained with the reaction presented here ($MPPD^{\bullet+}$) for the 5 samples analyzed were correlated with the test based on the reduction of the Fe(III)/2,4,6-Tris(2-pyridyl)-s-triazine (TPTZ) complex, used for this purpose in eye drops made from herbs³. Although the absolute values obtained are different the positive correlation found ($r = 0.731$) suggests that both reactions could be used for the evaluation of TRC in eye drops (Table 1). In the absence of an official method the reaction presented here may be an alternative to quantify this important parameter in eye drops made with different drugs, which in addition to their therapeutic purpose may have a reasonable reducing capacity.

Table 1 - TRC values obtained with $MPPD^{\bullet+}$ and Fe(III)/TPTZ assays for 5 eye drops.

| Sample | Active ingredient | Concentration (mg mL ⁻¹) ^(a) | Indication | $MPPD^{\bullet+}$ (mg AA dL ⁻¹) | Fe(III)/TPTZ (mg AA dL ⁻¹) |
|--------|---|---|----------------|---|--|
| II | Tobramycin | 3 | Infections | 0.64 ± 0.08 | 0.031 ± 0.001 |
| III | Brimonidine tartrate | 2 | Glaucoma | 0.90 ± 0.02 | 4.56 ± 0.09 |
| IV | Ketorolac trometamol | 5 | Conjunctivitis | 1.08 ± 0.44 | 0.38 ± 0.01 |
| V | Dorzolamide hydrochloride / Timolol maleate | 20 / 5 | Glaucoma | 1.70 ± 0.27 | 6.52 ± 0.63 |
| VI | Brimonidine tartrate / Timolol maleate | 2 / 6.8 | Glaucoma | 6.32 ± 0.26 | 8.11 ± 0.47 |

(a) as informed by suppliers. Results are average and standard deviation of triplicates.

¹ Oliveira, L. B.; Moya, H. D. 41th Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química, Foz do Iguaçu. ANA 059, 2018.

² Venkata, *et al.* Tear ascorbic acid levels and the total antioxidant status in contact lens wearers: A pilot study. *Indian Journal of Ophthalmology*. 57 (4), 289-292, 2009.

³ Bigagli, *et al.* Pharmacological activities of an eye drop containing *Matricaria chamomilla* and *Euphrasia officinalis* extracts in UVB-induced oxidative stress and inflammation of human corneal cells. *Journal of Photochemistry & Photobiology, B: Biology*. 173, 618-625, 2017.

Deposição seca e úmida de nitrogênio reativo em Ribeirão Preto, SP

Dayane C. O. Reis (PG),¹ Mariana de A. Souza (PG),² Maria Cristina Forti (PQ),² Felipe S. Pacheco (PQ),² Maria Lúcia A. M. Campos (PQ).^{1*}

dayanecoreis@usp.br; lcampos@ffclrp.usp.br

¹Departamento de Química, FFCLRP-USP-RP; ²Instituto Nacional de Pesquisas Espaciais- INPE

Palavras Chave: Nitrogênio reativo, Deposição seca e úmida.

Highlights

Wet and dry deposition of reactive nitrogen in Ribeirão Preto, SP. Wet deposition was the greatest contributor (60%) to total Nr deposition, followed by gas and particulate fractions. The two sampling systems used produced similar results for Nr.

Resumo/Abstract

O crescente uso de fertilizantes, o aumento do número veículos, e a queima de biomassa, são atividades que elevam a conversão de nitrogênio inerte em reativo. Isso afeta o ciclo biogeoquímico do nitrogênio em ecossistemas aquáticos e terrestres provocando a aceleração da eutrofização e deterioração da qualidade de ar. O objetivo desse trabalho foi estimar os fluxos de deposição úmida e seca de diferentes espécies de nitrogênio reativo (Nr) presentes na atmosfera de Ribeirão Preto (SP), e avaliar o fracionamento entre as espécies gasosas e sólidas de nitrogênio por meio de dois procedimentos de coleta. As amostras foram coletadas no campus da USP em Ribeirão Preto, utilizando um coletor automático de chuva e dois tipos de amostradores: *filter holder* de Teflon (FHT)¹ e o *Denuder for long term atmospheric sampling* (DELTA)². As amostragens com FHT foram realizadas durante 24 h, uma vez por semana de março 2015 a fevereiro 2016 (Fluxo = 31 L min⁻¹, n = 50), e as com o DELTA de julho 2015 a julho 2017 (Fluxo = 0,3 L min⁻¹, n = 29) durante 15 dias continuamente. As espécies nitrogenadas determinadas em fase sólida e úmida foram NH₄⁺ e NO₃⁻, e na fase gasosa HNO₃, HNO₂ e NH₃. As análises foram realizadas por cromatografia iônica (Metrohm IC 881) após extração com água. A concentração média de NO₂ foi calculada a partir dos dados divulgados pela CETESB para os dois períodos amostrais na cidade de Araraquara, cidade mais próxima e com características similares à Ribeirão Preto. As concentrações de Nr total estimadas com ambos os sistemas de coleta foram muito próximas (Tab. 1). A espécie NO₂ foi a mais abundante (≥ 75%), seguida de NH₃ gasosa, que apresentou maiores concentrações com o sistema FHT. Esse resultado pode estar relacionado à passagem de partículas finas pelas membranas do FHT (φ= 10 e 1 μm), que seriam impactadas nas membranas de coleta de gases. Por outro lado, o gás NH₃ poderia passar pelo sistema de difusão do SAAD e impactar na membrana, juntamente com o MP, por isso sua maior concentração na fase particulada quando comparada ao sistema FHT. O fluxo de deposição de Nr para cada fração foi estimado utilizando a amostragem realizada com o FHT e as velocidades de deposição específicas para cada espécie^{3,4} (Fig. 1). O fluxo total de Nr foi de 11,9 kg ha⁻¹ ano⁻¹ (FHT), sendo que 60% correspondeu à deposição úmida, seguida pela gasosa 36% e particulada 4%. A chuva é a principal via de deposição do Nr, sendo o íon NH₄⁺ a espécie mais abundante, com importante fonte veicular de NH₃ (espécie bastante solúvel), uso de fertilizantes, e contribuição pela queima de biomassa evidenciada pela maior concentração dessa espécie na época de seca. Ambos os sistemas de amostragem (DELTA e FHT) levaram a mesma concentração total de Nr.

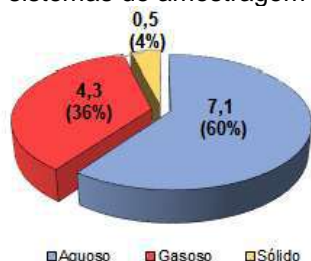


Fig. 1: Fluxo de nitrogênio reativo em Ribeirão Preto (kg (N) ha⁻¹ ano⁻¹).

Tab. 1: Nitrogênio reativo na fase sólida e gasosa em Ribeirão Preto

| Nr-espécie | DELTA | | FHT | |
|--------------------------------|----------------------------------|-----|----------------------------------|-----|
| | Média ± dp (μg m ⁻³) | Nr | Média ± dp (μg m ⁻³) | Nr |
| N-NO ₂ | 5,65 ± 3,04 | 79% | 5,39 ± 2,80 | 75% |
| N-NH ₃ | 0,93 ± 1,50 | 13% | 1,47 ± 0,62 | 21% |
| N-HNO ₃ | 0,10 ± 0,08 | 1% | 0,09 ± 0,07 | 1% |
| N-NH ₄ ⁺ | 0,34 ± 0,57 | 5% | 0,12 ± 0,09 | 2% |
| N-NO ₃ ⁻ | 0,14 ± 0,12 | 2% | 0,08 ± 0,05 | 1% |
| N-total | 7,16 ± 3,44 | | 7,15 ± 2,87 | |

1. Rocha, G.O., et al., *Journal of Geophysical Research*, 1-9, 2003.
2. Sutton, M. A., Y. S. Tang, B. Miners, and D. Fowler, *Air and Soil Pollution*, 145-156, 2001.
3. Flechard, C. R., et.al., *Atmos. Chem. Phys.*, 2703-2728, 2001.
4. Martino, M., et al., *Global Biogeochemical Cycles*, 712-728, 2014.

Agradecimentos: INPE, Fapesp (2018/16554-9), CAPES e USP-RP.

Área: AMB

Nº de Inscrição: 00322

O papel das águas superficiais como fonte ou sumidouro de etanol, peróxido de hidrogênio e acetaldeído presentes na baixa troposfera

Caroline Scaramboni (PG)¹, Maria Lúcia A. M. Campos (PQ)¹**carolinesc@usp.br; lcampos@ffclrp.usp.br**¹Departamento de Química, Faculdade de Filosofia, Ciências e Letras de Ribeirão Preto, USP.

Palavras Chave: Interface ar-água, Emissões veiculares, Biocombustíveis, Fotoquímica

Highlights

The role of surface waters as sink or source of ethanol, hydrogen peroxide and acetaldehyde in the low troposphere. The water bodies worked as H₂O₂ sink, and as both sink and source of ethanol and acetaldehyde, with evidence of an important photochemical production of ethanol in the aquatic environment.

Resumo

Com o elevado consumo de etanol combustível no Brasil, a concentração deste álcool em nossa atmosfera é alta, gerando implicações na saúde e no meio ambiente, uma vez que a oxidação do etanol gera acetaldeído, que além de tóxico, é precursor de ozônio e de nitrato de peroxiacetila. Devido à elevada solubilidade do etanol, os sistemas aquáticos podem ter relevância nos processos de formação e remoção dessa espécie da atmosfera, por meio de trocas gasosas, e por reações fotoquímicas mediadas por oxidantes como o peróxido de hidrogênio (H₂O₂). O objetivo desse trabalho foi estimar os fluxos de etanol, H₂O₂ e acetaldeído na interface ar-água, a partir das concentrações na atmosfera e em águas superficiais de Ribeirão Preto (RP) e São Paulo (SP). As amostras de fase gasosa foram coletadas utilizando o método de coleta do condensado¹, e as amostragens foram realizadas simultaneamente às amostragens de água superficial de lagos de RP e SP, de outubro/2016 a julho/2017 (n = 29). A determinação de etanol e acetaldeído foi feita por GC-FID² e a de H₂O₂ foi realizada por fluorescência³. Os fluxos foram estimados considerando a difusão molecular do gás através da superfície da água, utilizando a primeira lei de Fick. Com a atmosfera como referência, o fluxo invasivo, sentido ar→água tem sinal negativo, e o fluxo evasivo, sentido água→ar tem sinal positivo. Em ambos os locais estudados, para todas as análises, o corpo d'água funcionou como sumidouro de H₂O₂, com um fluxo invasivo médio de -61,6 mmol m⁻² dia⁻¹, o que indica que, uma vez dissolvido na superfície da água, o H₂O₂ reage rapidamente com as substâncias presentes no meio. Já o fluxo de etanol variou de -4,43 a +3,18 mmol m⁻² dia⁻¹, sendo que o fluxo evasivo foi observado principalmente nos períodos de maior insolação. Em uma análise diurna, foi possível observar um perfil similar entre o fluxo de etanol e a radiação solar, indicando que houve produção fotoquímica de etanol na água superficial (Figura 1). No caso das amostras coletadas no inverno, os fluxos de etanol foram predominantemente invasivos, isto é, os corpos d'água funcionaram como sumidouros de etanol, possivelmente devido à menor produção fotoquímica nesse período. Na presença de elevadas concentrações de H₂O₂ em água superficial (>200 nmol L⁻¹), os fluxos de etanol foram todos evasivos, indicando que a radiação solar e as reações mediadas por H₂O₂ com compostos orgânicos dissolvidos podem levar à produção de etanol na superfície do lago. Com relação ao acetaldeído, não foi possível determinar a sua concentração em 55% das amostras de água superficial, uma vez que esta foi menor que o LD do método. Quando estas amostras foram incluídas no cálculo do fluxo (considerando a concentração em água superficial como metade do LD), o fluxo foi invasivo para 62% das amostras. Porém, considerando apenas as concentrações de acetaldeído acima do LD, o fluxo se torna evasivo para 85% das amostras. Isso demonstra que o sinal do fluxo depende da produção de acetaldeído no meio aquoso, e da emissão e formação dessa espécie na atmosfera. Pode-se concluir que a produção fotoquímica de etanol no corpo d'água, mediada ou não por reações com H₂O₂, pode ser relevante, e portanto, o corpo d'água pode funcionar como fonte de etanol para a atmosfera. No caso do H₂O₂ os corpos d'água funcionaram como sumidouro. Este trabalho demonstra a importância dos corpos d'água na concentração de espécies gasosas na baixa troposfera.

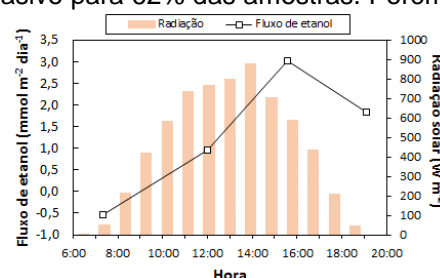


Figura 1 - Fluxo de etanol e radiação solar em função do período do dia em Ribeirão Preto

¹FARMER, J.C.; DAWSON, G.A. *Journal of Geophysical Research*, 87, 8931–8942, 1982;²GIUBBINA, F.F. et al. *Analytical Methods*, 9, 2915–2922, 2017;³SCARAMBONI, C. et al. *Atmospheric Environment* 176, 201–208, 2018.

Agradecimentos

Ao CNPq e à FAPESP (processos nº: 2016/07534-9; 2018/17931-0; 2018/16.554-9).

42ª Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química: Eixos Mobilizadores em Química

Voltammetric sensing of nifedipine using a new silsesquioxane and cobalt(II) phthalocyanine modified electrode

João Paulo Winiarski (PG), Rosely Aparecida Peralta (PQ), Cristiane Luisa Jost (PQ)

joneswnk@gmail.com

Departamento de Química, Universidade Federal de Santa Catarina (UFSC)

Keywords: Hybrid material, Silsesquioxane, Cobalt(II) phthalocyanine, Modified electrode, Nifedipine.

Highlights

A new silsesquioxane hybrid material was synthesized;
A cobalt(II) electroactive complex was immobilized onto a glassy carbon electrode;
The voltammetric determination of nifedipine was performed.

Abstract

Nifedipine (NIF) is a calcium channel blocker that has been widely used in the treatment of arterial hypertension and various cardiovascular diseases [1]. Therefore, from health concern, a low cost, sensitive, and easy monitoring of NIF is of great importance. In order to detect NIF, a complete electrochemical study including cyclic voltammetry, stripping techniques and the evaluation of analytical characteristics was performed using a modified electrode with a new hybrid material and an electroactive cobalt(II) complex. This hybrid material of silsesquioxane class (Sil) was synthesized and characterized by ^1H and ^{13}C NMR, FTIR, TGA and DRS. Structurally, the new material forms a randomly matrix of silica containing pyridinium moieties analogues attached as organic part of hybrid material. Physico-chemical properties as, water-solubility and the film-former capacity, made the new hybrid material suitable to protect electroactive species in solid substrates. In this way, cobalt(II) phthalocyanine tetrassulphonated (CoTsPc) was dropped coated on a GCE with a protective layer of silsesquioxane. Figure 1A shows the irreversible process and the electrochemical behavior of NIF onto several modifications steps. The best compromise between analytical signal quality and peak height intensity was obtained with the electrode modified with CoTsPc and Sil (GCE/CoTsPc/Sil). Electrochemical Impedance Spectroscopy was also performed to characterize the modified electrode. By using $\text{Fe}(\text{CN})_6^{4-/3-}$ (in KCl 0.2 mol L^{-1}) as probe the GCE/CoTsPc/Sil showed the minor resistance to charge transfer when compared to bare GCE and GCE/Sil. Therefore, a novel GCE/CoTsPc/Sil modified electrode with a promising application to the NIF determination in several kinds of samples using stripping voltammetric techniques was hereby presented.

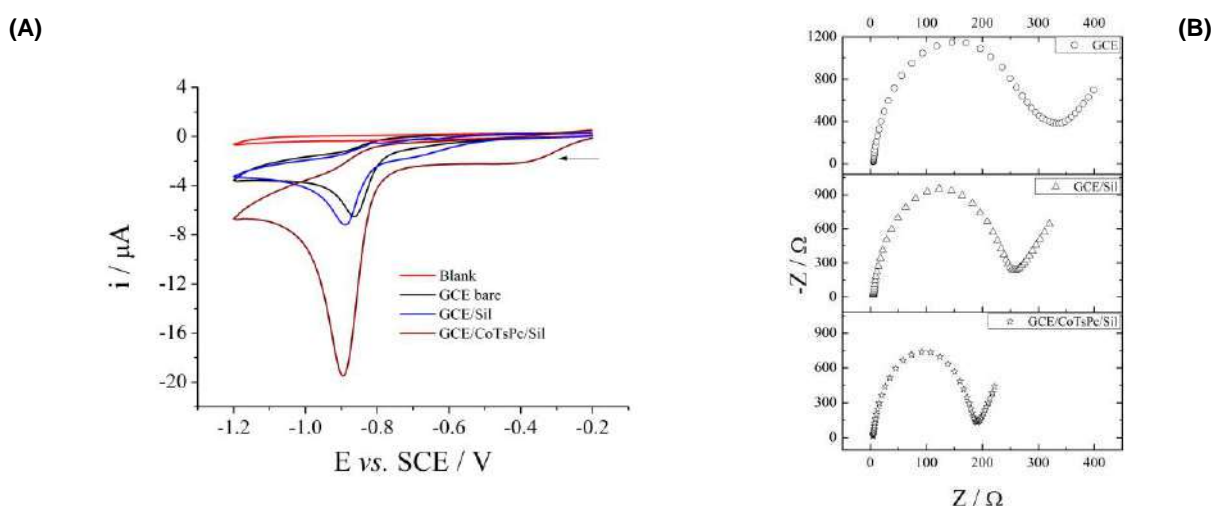


Fig 1: (A) Cyclic voltammograms of GCE modifications steps containing $50 \mu\text{mol L}^{-1}$ NIF and (B) EIS spectra of GCE and modified electrodes containing 5 mmol L^{-1} $[\text{Fe}(\text{CN})_6]^{4-/3-}$ (in KCl 0.2 mol L^{-1}) as probe.

[1] B.Mokhtari, D. Nematollahi, H. Salehzadeh, *J. Mol Liq*, 264 (2018) 543-549.

Ésteres produzidos por *Phomopsis* sp, um fungo endofítico isolado do ambiente Amazônico

Camila Martins de Oliveira (PQ),¹ João Marcos de Oliveira (PQ),¹ Armando da Costa Garcia (PG),^{1*} Julia Dietsche Monfardini (PG),² Ângela Regina Araújo (PQ),² Vanderlan da Silva Bolzani (PQ),²

camilacm@ufam.edu.br; garcia_hunter2@hotmail.com

¹Instituto de Ciências Exatas e Tecnologia, UFAM-Itacoatiara-AM; ²Instituto de Química, UNESP-Araraquara-SP.

Palavras Chave: Loranthaceae, Erva de passarinho, Metabólitos secundários.

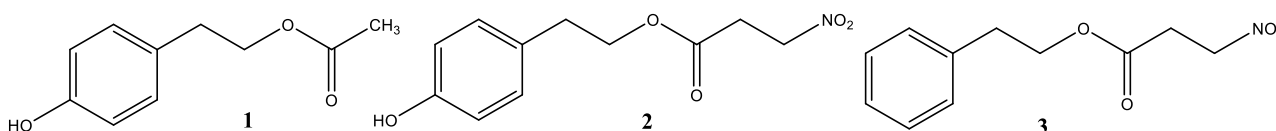
Highlights

Esters produced by *Phomopsis* sp, an endophytic fungus isolated from the Amazonian environment.

From the chemical study of the crude extract of *Phomopsis* sp it was possible to isolate three esters, one of them unpublished.

Resumo/Abstract

Fungos endofíticos são fungos que vivem no tecido interno das plantas sem que lhes causem prejuízo imediato¹. Esses microrganismos são considerados uma fonte importante para a produção de metabólitos secundários com ação antimicrobiana, antitumoral, entre outras¹. O gênero *Phomopsis* compreende um grupo de fungos estudado extensivamente pela sua habilidade de produzir metabólitos secundários com várias aplicações². Assim, este trabalho descreve o estudo químico do extrato bruto produzido pelo fungo endofítico *Phomopsis* sp. isolado da planta *Passovia stelis* (L.) Kujit. Para tanto, o fungo em questão foi cultivado em escala ampliada, utilizando meio líquido de batata dextrose. Posteriormente, o caldo obtido foi filtrado e extraído com acetato de etila fornecendo o extrato bruto. Após análises por CCDC, CLAE e RMN, o extrato bruto foi fracionado por cromatografia em coluna e por CLAE. Da fração 1 foram isolados os ésteres 4-hidroxifenetil-acetato (**1**), 4-hidroxifenetil-3-nitropropanoato (**2**), e fenetil-3-nitropropanoato (**3**), sendo a substância **3** inédita. As substâncias **1** e **2** foram identificadas através da comparação dos dados obtidos por RMN de ¹H 1D e 2D com os encontrados na literatura. O grupo nitro da substância **3** foi confirmado através de análises por espectrometria de massas.



Referencias

¹ Chapla, V. M. et al. RVq., v. 5, p. 421–437, 2013.

² Flores, A. C. et al. World J. Microbiol. Biotech., v. 29, p. 923–932, 2013.

Agradecimentos

Ao CNPq, FAPEAM e INCT-BioNat pelo suporte financeiro. A FAPEAM pela bolsa concedida.

Área: EDU

Nº de Inscrição: 328

O JOGO DE DOMINÓ COMO UMA ESTRATÉGIA DE ENSINO NA ÁREA DE QUÍMICA INORGÂNICA

Talissa Naomi Oka (IC),^{1*} Eliane do Rocio Alberti (PQ),¹ Guilherme Sippel Machado (PQ).¹quimachado@ufpr.br; *talissa@ufpr.br

¹Laboratório de Bioinorgânica Marinha e Química Verde, Campus Pontal do Paraná, Centro de Estudos do Mar, Universidade Federal do Paraná, Núcleo Mirassol, Balneário Mirassol, Caixa-Postal: 61 CEP: 83255-000, Pontal do Paraná, Paraná, Brasil.

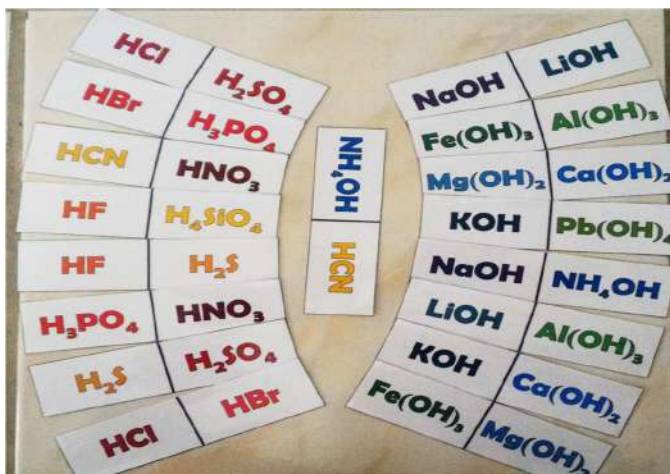
Palavras Chave: Jogos didáticos, Ensino de química, Ludicidade, Funções inorgânicas.

Highlights

THE DOMINO GAME AS A TEACHING STRATEGY IN THE CHEMISTRY AREA: A domino game has been adapted to illustrate the content of inorganic functions. The playfulness motivated and contributed to the content fixation by the students.

Resumo/Abstract

Este trabalho tem por finalidade apresentar a utilização de um jogo didático no ensino de química, como um meio auxiliar para a prática pedagógica do professor de química. Para tanto, foi utilizado como modelo o jogo de dominó, que foi adaptado para abordar o conteúdo de funções inorgânicas (Figura ao lado). O jogo foi aplicado em turmas do primeiro ano do Ensino Médio na Rede Estadual de Ensino de Pontal do Paraná, no estado do Paraná. A aplicação do jogo foi dividida em duas etapas: fase parcial (primeira fase) e fase integral (segunda fase). Na primeira fase, o dominó foi aplicado com o intuito dos estudantes interagirem com o objeto, identificarem e diferenciarem as substâncias contidas nas peças. Já na segunda fase, o dominó foi aplicado na íntegra, com todas as regras criadas para o jogo, incluindo as pontuações para as reações de neutralização escritas corretamente. Em ambas fases os alunos registraram os reagentes e estipularam os produtos a serem formados, na maioria dos casos com autonomia. O resultado foi positivo, houve a aceitação dos alunos, assim como foi percebido que eles se sentiram motivados pela dinâmica que o jogo proporcionou. O jogo didático pode ser uma alternativa para o ensino de química inorgânica, pois verificou-se que o jogo cumpriu com o papel de desenvolver o raciocínio lógico e a construção do conhecimento [1] na área de química, por meio da ludicidade.



Referência

[1] Kishimoto, T. M. O jogo e a Educação Infantil. In: Jogo, Brinquedo, Brincadeira e Educação. São Paulo, 1996.

Área: EDU

Nº de Inscrição: 00329

Uma abordagem de química utilizando a experimentação no ensino médio

Ellen Cristina Costa da Silva (PQ),^{1*} Alicia M. D. Melo (IC),¹ Alyny Correa Barbosa (IC),¹ Ana Zeneida S. Fortes (IC),¹ Diogo C. Ribeiro (IC),¹ Dorvalina Rêgo S. Neta (IC),¹ Lucielle M. Avelino (IC),¹ Matheus S. Sousa (IC),¹ Misterleide S. Silva (IC),¹ Sabrina S. Souza (IC),¹ Thais S. Costa (IC),¹ Thayanny G. Ferreira (IC),¹ Yan Wesley B. Sena (IC),¹ Andréa de Deus Medeiros (PQ),¹ Márcia da Costa Rebelo (PQ),¹

ellensilva@yahoo.com.br

¹Departamento de Química, CEUNI-FAMETRO

Palavras Chave: (Ensino, experimentos, química, aprendizagem).

Highlights

A chemistry approach using experimentation in high school: Investigative experimental activities and the active participation of students; The use of experimentation in the dissemination of science and teacher education.

Resumo

O aluno necessita de uma formação sólida, que lhe dê condições de compreender os fenômenos ao seu redor e tenha como solucionar problemas do seu cotidiano. Por isso, experimentos no laboratório provêm oportunidades para o desenvolvimento de trabalhos em grupo, aprendizado por intermédio do questionamento do mundo ao redor, sendo os primeiros contatos com os equipamentos laboratoriais e tecnológicos (LUCAS, 2013). No ensino de Química, atividade experimentação deve somar para o entendimento e compreensão dos conceitos químicos, podendo dividir em duas atividades: sendo a teoria e a prática, uma vez que esse conjunto esteja interligado com materiais do cotidiano do aluno e lhe proporcione conhecimento dos conceitos químicos ao seu redor (CASTRO, 2012). Visando contribuir com o ensino de Química, foi realizado por graduandos de química uma série de práticas pedagógicas com conteúdos votados para o ensino médio em 4 Escolas Estaduais da Cidade de Manaus. A metodologia abordada neste trabalho consistiu em uma análise prévia da dificuldade dos alunos em certos conteúdos (Cinética química, eletroquímica, bioquímica) e uma posterior abordagem experimental com materiais do cotidiano. Após as aulas experimentais, pode-se observar que os alunos sentem a necessidade de terem mais aulas com praticas experimentais e que os mesmos conseguem compreender melhor o conteúdo com essas aulas dinamizadas. Também foi possível perceber que metodologias como esta vêm conquistando cada vez mais os estudantes, tornando aulas mais agradáveis, participativas e produtivas, como fala Silva (2011), a lousa continua sendo o recurso mais utilizado nas escolas e sabe-se que aulas com apenas este recurso tornam mais difícil a compreensão dos assuntos ministrados em sala de aula. E de acordo com a LDB (lei das diretrizes e bases da educação) o papel do professor é despertar o interesse e a curiosidade em seus alunos, buscando sempre uma didática facilitadora do ensino-aprendizagem e a metodologia de praticas experimentais realizada nas escolas foi de extrema importância para a agregação de conhecimentos dos alunos.

Castro, Camila Lima & Araújo, Sandra Cristina Marquez. Uma proposta de experimentos com materiais alternativos a partir da análise do livro didático. XVI Encontro Nacional de Ensino de Química (XVI ENEQ) e X Encontro de Educação Química da Bahia (X EDUQUI). Salvador, BA, Brasil – 2012.

Lucas, M.; Chiarello, L. M.; Silva, A. R.; Barcellos, I. O. . indicador natural como material institucional para o ensino de química. experiências em ensino de ciências (UFRGS), v. 7, p. 86-96, 2013.

Silva, A. M. Proposta para Tornar o Ensino de Química mais Atraente. RQI. 2º trimestre 2011.

Agradecimentos

As Escolas Estaduais: Dr. José Milton Bandeira, Presidente Castello Branco, Benedito Almeida e Solon de Lucena.

Synthesis and characterization of novel copper complexes with coumarin-hydrazone ligands as potential cysteine probes

Leandro R. da Silva (IC),¹ Patrícia S. V. B. de Almeida (PG),¹ Thiago M. Pereira (PG),¹ Guilherme P. Guedes (PQ),² Arthur E. Kümmerle (PQ),¹ Amanda P. Neves (PQ).¹

leandro_capam@hotmail.com

¹Departamento de Química Fundamental, UFRRJ; ²Departamento de Química Inorgânica UFF

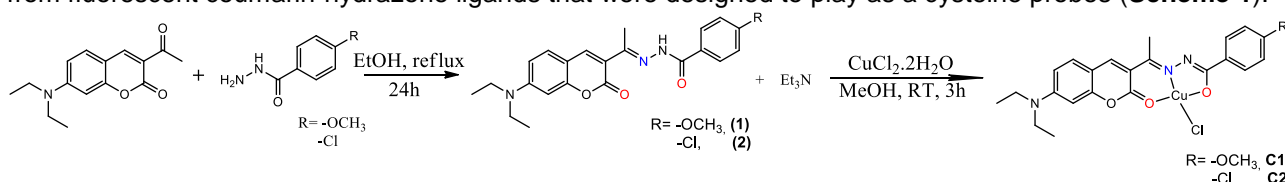
Palavras-Chave: *Cysteine probe, Coumarin-hydrazone, Copper complex, Crystallography*

Highlights

Two new coumarin-hydrazone copper complexes were synthesized and characterized by spectroscopic techniques, including X-Ray diffraction analysis for one complex.

Resumo/Abstract

Copper complexes with coumarin ligands have been reported in the literature as efficient probes due their on/off fluorescent properties¹. In this work, we describe the synthesis of two new Cu²⁺ complexes derived from fluorescent coumarin-hydrazone ligands that were designed to play as a cysteine probes (**Scheme 1**).



Scheme 1: Synthesis of complexes **C1** and **C2**

IR, UV-Vis and NMR spectroscopic data were found in accordance with similar compounds described in literature¹⁻². Complex **C3** presented suitable crystals for X-Ray analysis (**Figure 1**). The Cu²⁺ ion is coordinated by a tridentate O,N,O chelate and a chloride ion, which completes the coordination site. In addition, the main coordination angles indicate that the metallic center is in a distorted square planar environment. The packing diagram for **C3** crystal suggests an ABAB packing, as shown in **Figure 2**:

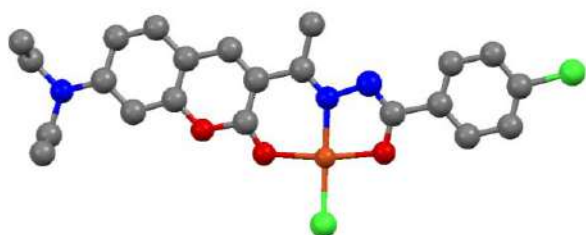


Figure 1: Crystal Structure of complex **C3**

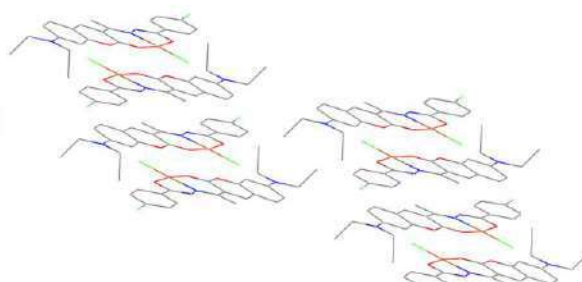


Figure 2: Packing diagram of complex **C3**

Agradecimentos/ Ackowlegments

CAPES, CNPq, LDRX-UFF, PPGQ-UFRRJ

¹K. Li, M. Li, X. Chen; **A ratiometric fluorescent chemodosimeter for Cu(II) in water with high selectivity and sensivity**. *Analytica Chimica Acta*, 2012, 712, 115-119;

²T. M. Pereira et al. **Microwave-assisted synthesis and photophysical studies of novel fluorescent N-acylhydrazone and semicarbazone-7-OH-coumarin dyes**. *New J. Chem.*, 2016, 40, 8846

Magnetite nanoparticles functionalized with bilayer of amphiphilic anionic molecules for the removal of agrochemicals from water

Diogo dos Santos Alves (PG), Emília Celma de Oliveira Lima (PQ).

ecdlimaufg@gmail.com; diogodossantosalves@gmail.com

¹Instituto de Química, Universidade Federal de Goiás

Palavras Chave : (agrochemicals removal, magnetite nanoparticles, colloidal suspensions, amphiphilic ions, bilayers).

Highlights

Magnetite nanoparticles functionalized with bilayer of alkyl surfactants were successfully used for the removal of agrochemicals from water, individually and in mixtures. In low concentration (0-5 ppm), the removal efficiency is 100%. In high concentration (100-300 ppm), the efficiency is 60% and the amounts removed from a mixture of seven agrochemicals reached values in the range of 10-18 mgmg⁻¹ of adsorbent.

Resumo/Abstract

Nanostructured systems are nowadays extensively studied for applications in environmental remediation. The aim of this work was to evaluate the efficiency of nanostructured systems based on colloidal suspensions of iron oxide nanoparticles (magnetite, ~10 nm) functionalized with bilayers of the ions: i) oleate and dodecylbenzenesulfonate; ii) laurate and lauryl sulfate, and iii) laurate and dodecylbenzenesulfonate, in removing from water some agrochemicals used in Brazil. A generic scheme to represent the adsorbent systems is presented in figure 1. The systems were, deeply, characterized by several analytical techniques. The agrochemicals were exposed to the adsorbents individually, and as mixtures (in the concentration range of 1-320 mg.L⁻¹), and the removed amounts were quantified by liquid chromatography coupled to mass spectrometry. Figure 2 presents, as an example of the results, the curves for the removal of the specified agrochemicals (individually) by the nanoparticles functionalized by the bilayer of the ions oleate and dodecylbenzenesulfonate (N-Oleate/DBS).

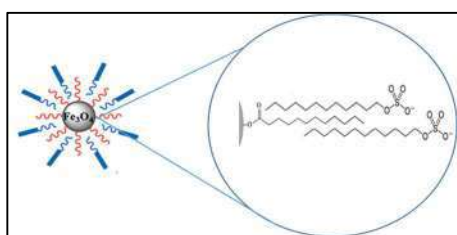


Figure 1. Scheme representing the adsorbent

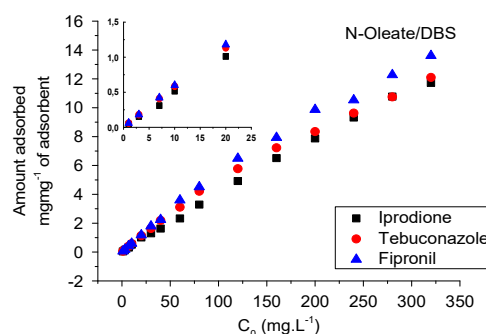


Figure 2. Agrochemicals removal curves

The removal curves showed that all three adsorbents showed high removal efficiency for fipronil, iprodione and tebuconazole. In the concentration range of 1-10 mg.L⁻¹ the three systems removed 100% of the three agrochemical, reaching values of removed amounts of one mg.mg⁻¹ of adsorbent. At concentrations of 30-80 mg.L⁻¹ the percent of removal was around 100-90% reaching removal amounts of 3-5 mg.mg⁻¹ of adsorbent. The explanation for the efficiency of the three systems for the removal of the agrochemicals is understood considering the types of intermolecular interactions between the agrochemical and the bilayer formed by the amphiphilic ions (bounded to the nanoparticles), which can be both, of hydrophobic and of dipolar nature.

Agradecimentos/Acknowledgments

CNPq, INCT-Nanobiotecnologia, Lanagro-GO, Capes.

Área: CAT

Nº de Inscrição: 00333

Optimization of short chain polyglycerols production for cosmetic applications

João Marcos de A. Andrade (IC),¹ Natália G. Figueiredo (PQ),² José Carlos D. Filho (PQ),¹ Barbara J. Alves (IC),² Pedro Vinícius N. Azevedo (IC),¹ Laís F. de Castro (PG),² Simone C. Chiapetta (PQ),² Alexandre B. Gaspar (PQ),² Antônio Carlos de O. Machado (PQ).^{1*}

natalia.figueiredo@int.gov.br; acmachado@cetiqt.senai.br

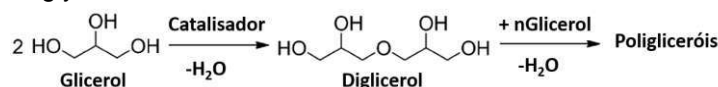
¹Instituto SENAI de Inovação em Biotecnologia, SENAI-CETIQT; ²Instituto Nacional de Tecnologia, INT-MCTIC;
Palavras Chave: Etherification, Diglycerol, Triglycerol, Cosmetics, Design of experiments, Optimization.

Highlights

Glycerol as a great chemical platform for many other valuable products. Obtaining di- and triglycerols for cosmetic applications. Design of experiments as a powerful tool in process optimization.

Abstract

Glycerol is one of the most abundant renewable resources for various chemical intermediates. Due to the biofuel industry growth in recent decades, glycerol has become a cheap and readily available green raw material. Thus, glycerchemistry is the area of valorization of this product of great interest, being an excellent chemical platform for several other valuable products. Direct catalytic etherification of glycerol involves dehydration reaction of two glycerol molecules with formation of an ether and water bond (Scheme 1).



Scheme 1. Catalytic etherification of glycerol to polyglycerol.

An optimum catalyst for catalytic etherification of glycerol should therefore be selective for linear oligomers of glycerol and avoid the formation of cyclic byproducts and acrolein.

Table 1. Codified and numerical experimental matrix of glycerol oligomerization

| Sample | Codified variables | | | Numerical variables | | |
|--------|--------------------|----------|-----------|---------------------|--------------|-----------------------------|
| | Temperature | Catalyst | Flow rate | Temperature (°C) | Catalyst (%) | Flow rate (N ₂) |
| 1 | - | - | - | 232 | 1,6 | 70 |
| 2 | + | + | - | 268 | 1,6 | 70 |
| 3 | - | - | - | 232 | 3,4 | 70 |
| 4 | + | + | - | 268 | 3,4 | 70 |
| 5 | - | - | + | 232 | 1,6 | 130 |
| 6 | + | + | + | 268 | 1,6 | 130 |
| 7 | - | - | + | 232 | 3,4 | 130 |
| 8 | + | + | + | 268 | 3,4 | 130 |
| 9 | -1,68 | 0,00 | 0,00 | 220 | 2,5 | 100 |
| 10 | 1,68 | 0,00 | 0,00 | 280 | 2,5 | 100 |
| 11 | 0,00 | -1,68 | 0,00 | 250 | 1,0 | 100 |
| 12 | 0,00 | 1,68 | 0,00 | 250 | 4,0 | 100 |
| 13 | 0,00 | 0,00 | -1,68 | 250 | 2,5 | 50 |
| 14 | 0,00 | 0,00 | 1,68 | 250 | 2,5 | 150 |
| 15 | 0,00 | 0,00 | 0,00 | 250 | 2,5 | 100 |
| 16 | 0,00 | 0,00 | 0,00 | 250 | 2,5 | 100 |
| 17 | 0,00 | 0,00 | 0,00 | 250 | 2,5 | 100 |

Aiming at the application in the pharmaceutical and cosmetics industry, the present study was based on optimization of important parameters for obtaining di- and triglycerols, with high selectivity and low content of undesirable byproducts by design of experiments. For this optimization, the central rotational compound design (CRCD) was used as planning (Table 1) and with the aid of statistical analysis, predictive models can also be generated for three investigated parameters: catalyst content, temperature and nitrogen flow rate. The catalytic process of etherification via basic catalysis was carried out with NaOH, which shows a favorable reaction when compared to acid catalysts to obtain desired oligomers. The reaction products were analyzed by HPLC with refraction index detector and shows good resolution between glycerol, di- and triglycerol peaks. With CRCD, we achieved conversions of about 80% with high selectivity for di- and triglycerols. The high selectivity of the catalytic process was also confirmed by IR analysis which showed the absence of acrolein in the samples.

Desymmetrization of diols mediated by iodobenzene dichloride as key step in the synthesis of Pulmonarin A derivatives

Vinícius V. Marto (PG), Bryan N.S. Pinto (PG), Antônio J. Demuner (PQ), Vânia M.T. Carneiro (PQ).*

vinicius.marto@ufv.br; vania.carneiro@ufv.br

Departamento de Química, Universidade Federal de Viçosa (UFV), CEP 36.570-900, Viçosa, MG, Brazil

Keywords: hypervalent iodine, esterification, desymmetrization, pulmonarin A.

Highlights

Desymmetrization of diols by mono-acylation were performed with PhICl_2 and PPh_3 . A novel methodology for the synthesis of Pulmonarin A derivatives has been studied.

Abstract

Isolated in 2014, Pulmonarins A and B are marine natural compounds with recognized inhibitory activity of enzyme acetylcholinesterase (Figure 1).¹

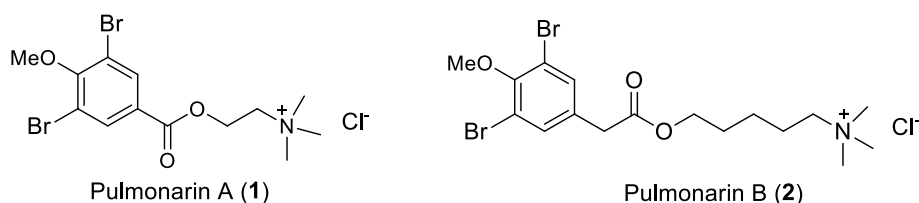
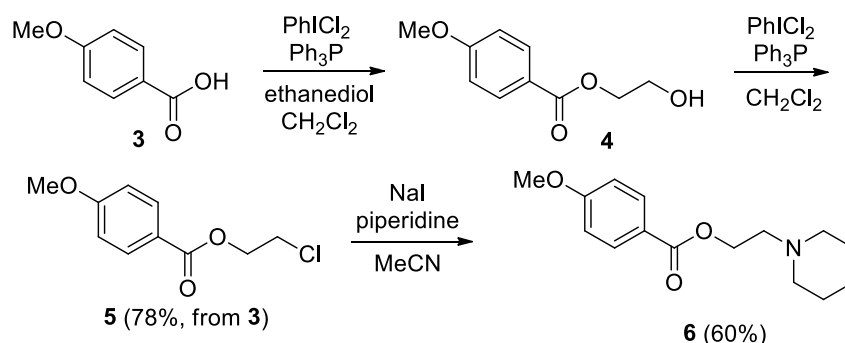


Figure 1: Structures of Pulmonarins A and B.

In our studies aiming the synthesis of Pulmonarin A (1) derivatives, we have studied the desymmetrization of diols by mono-esterification using iodobenzene dichloride (PhICl_2).² Combination of this hypervalent iodine reagent with triphenylphosphine (Ph_3P) generate dichlorotriphenylphosphorane (Ph_3PCl_2) *in situ* to convert carboxylic acids (3) in their corresponding acyl chlorides which are esterified after addition of diols. Then, intermediate alcohols (4) can be converted to their chlorides (5) employing the same reagents from the previous step. Finally, tertiary amines (6) are formed by treatment of chlorides with secondary or primary amines in presence of sodium iodide (Scheme 1).



Scheme 2: Three-step synthesis of Pulmonarin A derivative (6).

Acknowledgments

The authors would like to thank CNPq, CAPES, FAPEMIG (Project: CEX - APQ-00321-15) for financial support.

¹Tadesse, M.; Svenson J.; Sepčić, K.; Trembleau, L.; Engqvist, M.; Andersen, J. H.; Jaspars, M.; Stensvåg, K.; Haug, T. (2014), *J. Nat. Prod.* **77**: 364–369

²Carle, S. M.; Shimokura, G. K.; Murphy, G. K. (2016). *Eur. J. Org. Chem.* **23**: 3930–3933.

Effect of the extraction time in the antioxidant activity and total phenols of the hydroalcoholic extract of *Bougainvillea glabra choisy* flowers

Verônica I. Silva (IC)¹; Aline C. Castro (PG); Murilo R.S. Carriço (PG)²; Jefferson J. Soares (PQ)¹; Rafael Roehrs (PQ)²; Elton L.G. Denardin(PQ)^{1*}

edenardin@unipampa.edu.br

¹LEFQPN Group; ²GIPPE Group, Campus Uruguaiana, Federal University of Pampa (UNIPAMPA)

Palavras Chave: Antioxidant activity, *Bougainvillea glabra choisy* flowers, DPPH, Phenolic compounds.

Highlights

Antioxidant activities of *Bougainvillea glabra Choisy* (BGC) flowers were evaluated. The antioxidant activity was influenced by time extraction of BGC flowers.

Resumo/Abstract

Effect of extraction time on the antioxidant activity and total phenols of the hydroalcoholic extract of *Bougainvillea glabra choisy* (BGC) flowers was studied. Fresh BGC flowers were placed in flask containing 200 mL of hydroalcoholic solution (1EtOH: 3H₂O) for extraction and shaken under 150 rpm and 55 °C in 1 h and 24 h stirring. After, the material was filtered, concentrated on a rotary evaporator and dried in oven at 35 °C. Dry samples were submitted to antioxidant evaluation and total phenol content compounds using the DPPH and Folin-Ciocalteu methods (1), respectively. The phytochemical profile of the dried extract was evaluated by HPLC / DAD. Results for the total phenol content were 38.8 ± 1.0 µg Gallic acid / g extract and 25.9 ± 1.3 µg Gallic acid/ g extract for 1 h and 24 h extraction and for antioxidant activity 48.7 ± 1.5% (1h) and 38.2 ± 2.3% (24h) indicating that BGC flowers present antioxidant activity. Comparative results indicated that 1hours extraction presents higher values in relation to 24 hours extraction. HPLC/DAD analysis (Figure 1) did not show significant differences in the chromatograms, only in the intensity of the peaks, suggesting that the increase of the extraction time causes changes in the proportions of the extracted components, influencing the total phenol content and consequently the antioxidant capacity of the components of BGC flowers.

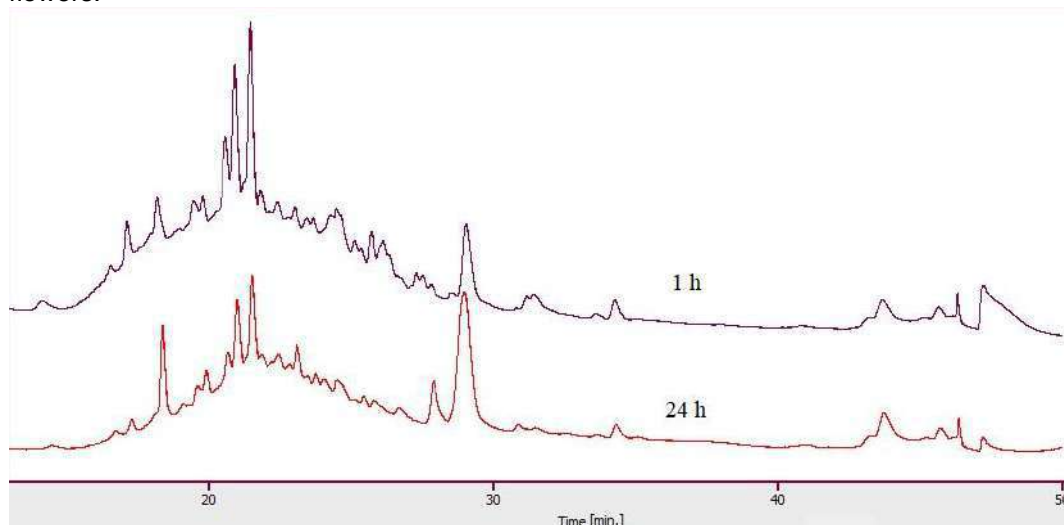


Figure 1: HPLC/DAD Chromatogram

Reference:

1. SOARES et al. (2017). *Biomedicine & Pharmacotherapy*. 95, 245-251.
DOI: <https://doi.org/10.1016/j.biopha.2017.08.073>

Povarov reaction in naphthoquinones: computational support for a novel route for quinoline-naphthoquinones

Rodolfo G. Fiorot (PG)^{1,2}, Bárbara C. Lemos (PG)³, Sandro J. Greco (PQ)³, José W. de M. Carneiro (PQ)²

rodolfo.fiorot@ifrj.edu.br, jose_walkimar@id.uff.br

¹Instituto Federal de Educação, Ciências e Tecnologia do Rio de Janeiro (IFRJ)-campus Realengo, Rio de Janeiro, 21715-000, Brasil; ²Instituto de Química, Universidade Federal Fluminense (UFF), Niterói, Rio de Janeiro, 24020-141, Brasil; ³Laboratório de Síntese Orgânica Aplicada, Departamento de Química, Universidade Federal do Espírito Santo (UFES) Vitória, Espírito Santo, 29075-910 Brasil.

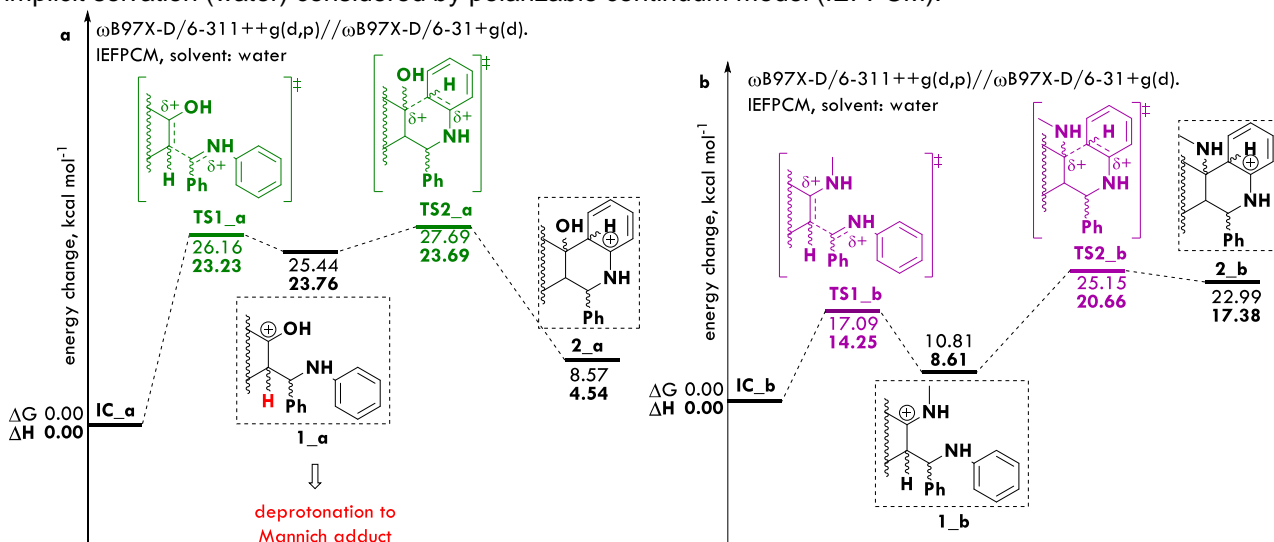
Keywords: Reaction mechanism, Mannich reaction, Povarov reaction, Computational chemistry, DFT.

Highlights

Povarov reaction in naphthoquinones are unprecedented. Computational chemistry was applied by means of DFT to support a new route to fuse both rings selectively, avoiding competitive Mannich reaction.

Resumo/Abstract

Quinoline and naphthoquinones have remarkable application in diverse areas: medicinal, agro and technological chemistry.¹ One of the most famous route to quinoline synthesis is Povarov reaction, while naphthoquinones are abundant in nature. In this work, we mapped the pathway of Brønsted-catalyzed Povarov reaction using 2-hydroxy-1,4-naphthoquinone and benzenamine-benzaldehyde iminium, considering the stepwise mechanism.² In these conditions, however, we observed experimental formation of Mannich adduct instead of cyclized product. Mechanistically, both reactions show the same first step, leading to a common intermediate **1_a**, which can pass through an intermolecular electrophilic aromatic substitution to form **2_a** (Povarov) or deprotonation to the Mannich adduct. Figure 1a presents the energetic change. In Figure 1b, we suggest the usage of an enaminone derivative of 2-hydroxy-1,4-naphthoquinone. Energetic profile indicates a less energetic formation of common intermediate **1_b**, while cyclization step showed to be more energetic. Simulation were performed at ω B97X-D/6-311++g(d,p)// ω B97X-D/6-31+g(d) level with implicit solvation (water) considered by polarizable continuum model (IEFPCM).



Although highly energetic, intramolecular cyclization to **2_b** may be feasible in high temperatures. Other conditions should be tested – such as Lewis acids – to favor pericyclic mechanism and thus Povarov reaction instead of Mannich.

¹ a. Lemos, B. C. et al. *Fuel*. **2018**, 220, 200; b. Han-Yue, Q. et al. *Chem. Biol. Drug. Des.* **2018**, 91, 690; c. Marella, A. et al. *Saudi Pharm. J.* **2013**, 21, 1. ² Domingo, L. R. et al. *RSC Adv.* **2014**, 48, 25268.

Synthesis and Characterization of a Cu(II) Complex with a N₃-donor ligand for studies involving oxidative processes.

Carlos C. Schneider (IC),¹ Tiago P. Camargo (PQ).^{1*}

carlosschneider@alunos.utfpr.edu.br; tiagocamargo@utfpr.edu.br*

¹Departamento de Química e Biologia, UTFPR

Palavras Chave/Keywords: *Bioinorganic, Metal-oxo complexes, Oxidation*

Highlights

Synthesis, characterization of a copper(II) complex with 2-chloro-4,6-bis-(3,5-dimethyl-pyrazolyl)-1,3,5-triazine ligand, as well its interaction studies of this complex with oxygen.

Resumo/Abstract

Interaction studies between transition metals with oxygen have attracted the attention of many chemists because of their high reactivity and activation of C-H bonds in organic molecules. Some complexes of the Iron(IV)-oxo type are described, but interaction of Cu(III)-oxo complexes is still in its first steps. Copper(III) intermediates are predicted to play an important role in many copper-catalyzed reactions. Many reaction mechanisms are rationalized on the basis of theory, because experimental detection of neutral or positively charged copper(III) intermediates is challenging. Thus, the present work is related to the synthesis, characterization of a copper(II) complex with 2-chloro-4,6-bis-(3,5-dimethyl-pyrazolyl)-1,3,5-triazine ligand, as well its interaction studies of this complex with oxygen. This ligand was obtained through an aromatic nucleophilic substitution between 2,4,6-chloro-1,3,5-triazine and 3,5-dimethyl-pyrazole in acetone and NaOH acting as base. The copper(II) complex was obtained through the coordination of two different copper salts, Cu(ClO₄)₂ and CuCl₂, in methanol. After a few days a dark green crystalline solid was obtained which was characterized by IR and uv-vis spectroscopy, electrochemistry and mass spectrometry (ESI-MS). EPR studies are underway, where experiments will be carried out to evaluate the interaction of the complex with oxidizing agents. It is also in the optimization phase studies of reactivity in the oxidation of some organic substrates promoted by the complex as a final activity of this project.

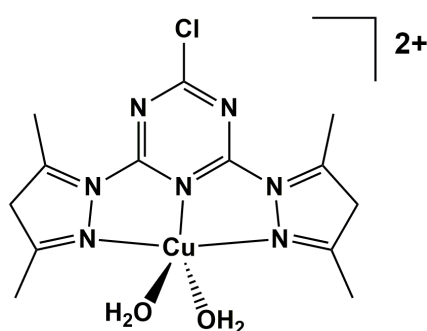


Figura 1 - Proposed structure for the complex (1)

Agradecimentos/Acknowledgments

Universidade Tecnológica Federal do Paraná (UTFPR), UFPR, UFSC, Fundação Araucária, Cnpq, CAPES.

Referências/References

- [1] G. Yassaghi et. al, *ChemPhysChem.*, **18**, 2217 (2017)
- [2] L. Hatcher et. al, *Inorg. Chem.*, **45**, 3004-30013 (2006)
- [3] A. S. Borovik, *Chem. Soc. Rev.*, **40**, 1870-1874 (2011)
- [4] S. Sahu et. al, *J. Am. Chem. Soc.*, **36**, 11410-11428 (2016)

Área: TEO

(Inserir a sigla da seção científica para qual o resumo será submetido. Ex: ORG, BEA, CAT)

Nº de Inscrição: 00341

(Inserir o número de inscrição do autor que fez a submissão)

Quantum Tunneling in Selenoxide elimination: A DFT study**Caio Moraes Porto (IC)1, Nelson Henrique Morgon (PQ)1,*****nhmorgon@unicamp.br**¹Physical Chemistry Department of the Chemistry Institute of UNICAMP

Keywords: Quantum Tunneling, Sulfoxide, Selenoxide, B3LYP

Highlights

- a method for the chemical synthesis of alkenes from selenoxides.
- deviations from classical kinetic behavior.
- difference in rate observed between sulfoxide and selenoxide elimination..

Resumo/Abstract

Quantum tunneling is the ability of particles, or a system of particles, of passing through a region of space wherein the energy is bigger than the energy of the particle, which is impossible by Classical Mechanics. Translating that effect to chemistry, there is a possibility of electrons, nuclei, and atoms to tunnel through a impossible to traverse classical region. This effect is important in a multitude of systems, as in chemical rates that deviate from classical behavior. The energies of the optimized fundamental states and the energies of the transition states of the intramolecular proton transfer in selenoxide and sulfoxide eliminations were calculated, using theoretical calculations on the B3LYP level and base set 6-31G(2d,p). Next, the IRC were calculated, based on the transition state Hessian, with a stride of 0.1, generating between 114 and 196 points for each curve side. Calculations were made using the GAMESS program. The coordinates of the distance between the tunneling hydrogen and the selenium oxygen were used to make the potential curves. The model used was the one that best fitted the curve, and consisted of a Eckart, or hyperbolic, barrier, described by Eq. (1).

$$P = \frac{\sinh^2\left(\frac{\pi k}{a}\right)}{\sinh^2\left(\frac{\pi k}{a}\right) + \cosh^2\left[\left(\frac{\pi}{2}\right)\sqrt{\left(\frac{32\pi^2 mV}{h^2 a^2}\right) - 1}}\right]}$$

where V and a are, respectively, the height and width of the barrier, and $k = (2 \cdot m \cdot E)^{1/2} / \hbar$.

Table 1: Results for the calculations of the tunneling frequencies in Selenoxide and Sulfoxide intramolecular proton transfer.

| Parameters | | Sulfoxide | Selenoxide |
|--|-------|-------------|------------------------------|
| Barrier height (kJ/mol) | Left | 109,9 | 83,7 |
| | Right | 91,6 | 104,9 |
| Barrier width (Å) | | 0,741 | 0,738 |
| ΔE of asymmetrical minimums (kJ/mol) | | 18,3 | -21,2 |
| Tunneling frequency (s ⁻¹) | | 5,20 | 6,73 x 10³ |

The results for the selenoxide and sulfoxide proton transfer in Table 1, show why one happens via tunneling and the other doesn't. The process is not connected to the height or width of the barriers, they are very similar. At best, the difference would be a few orders of magnitude, making the reaction rate smaller but it would still react. It's connected to the height difference of the minimums. In other words, their asymmetry. The tunneling probability varies rapidly with the minimums asymmetry, so the selenoxide elimination is favored and the sulfoxide elimination is unfavored, even being favored in the reverse direction. That's why the sulfoxide elimination is reversible and made by pyrolysis, while trying to reverse the selenoxide reaction leads to other products.

Agradecimentos/Acknowledgments

The authors thank CNPq for the financial support and IQ/UNICAMP for the computational infrastructure.

Área: QI

(Inserir a sigla da seção científica para qual o resumo será submetido. Ex: ORG, BEA, CAT)

Nº de Inscrição: 00342

(Inserir o número de inscrição do autor que fez a submissão)

Biophysical approach to Tuberculosis: interplay of mycolic acids, antimycobacterial compound and pulmonary membrane model**Bianca Sandrino (PQ),¹ Juliana P. da Silva (PQ),² Marcio P. de Araujo* (PQ),³ Osvaldo N. Oliveira Jr. (PQ),¹ mparaujo@ufpr.br; bia_sandrino@hotmail.com**¹Instituto de Física de São Carlos, USP; ²Departamento de Química UFSC, ³Departamento de Química UFPR
Palavras Chave: Ru complex, Membrane Model, Langmuir film.**Highlights**

Tuberculosis resistance is due to a lipid envelope on the pathogen cell wall. A Ru complex interacts with - mycolic acid and phospholipids from the pathogen cell, as shown with Langmuir monolayers as membrane model.

Resumo/Abstract

The infection disease Tuberculosis (TB) caused by the pathogen *Mycobacterium tuberculosis* has millions of new cases in the world every year. It is difficult to eradicate because of the resistance conferred to the pathogen owing to a lipid envelope on its cell, which can withstand antibiotics and unfavorable conditions. The most external cell wall has mycolic acids (MA), which are -alkyl- -hydroxyl high molecular weight fatty acids. In this study we tested the interaction between a new anti-TB agent [RuCl(⁶-p-cymene)(P-N-CH₂pyP)]BF₄, referred to here as RuAmpy (MIC₉₀= 3.6 ± 0.8 µg mL⁻¹ or 4.3 ± 0.9 µmol L⁻¹) with Langmuir monolayers that mimic the lung and pathogen membranes. The monolayers contained either a mixture of 1,2-dipalmitoyl-sn-glycero-3-phosphocholine (DPPC) and 1,2-Dioleoyl-sn-glycero-3-phosphocholine (DOPG), or a ternary mixture with DPPC, DOPG and -MA (C₈₀H₁₅₆O₃). They were spread on a Langmuir KSV mini through (KSV Instruments Ltd., Helsinki, Finland) with the surface pressure measured with a Wilhelmy plate. The surface pressure isotherms in Figure 1 indicate that the RuAmpy complex expands both types of monolayer, probably with some insertion into the hydrophobic region. With polarization-modulated infrared reflection absorption spectroscopy (PM-IRRAS), we observed that RuAmpy indeed interacts with the tails by affecting the CH₂ vibrations, whereas a significant interaction was also observed with the phosphate groups in the headgroup region. In summary, RuAMPy affects the monolayers mimicking both the lung and pathogen membranes, which could correlate with its antibiotic activity.

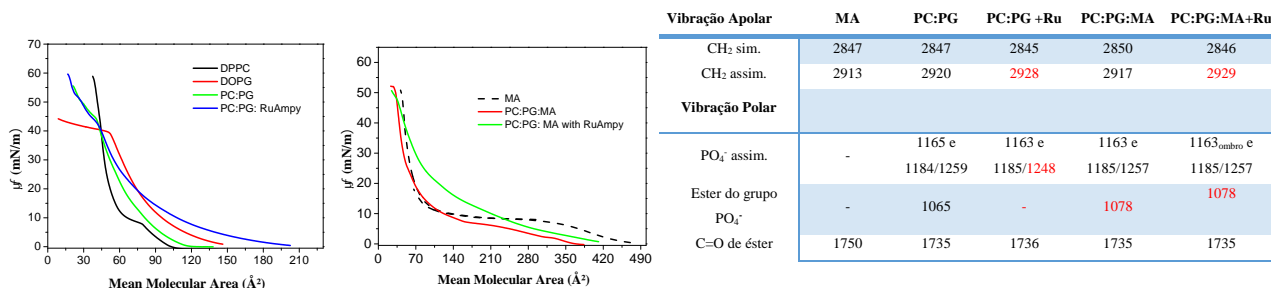


Figure 1: –A isotherms and IR modes (cm⁻¹) for PM-IRRAS analysis of each compound and mixed films without and with RuAMPy (anti-Tb) in PBS, pH=7.4 at 30 mN/m.

Agradecimentos/Acknowledgments

This work was supported by FAPESP (2014/12567-8), Fundação Araucária, CNPq and CAPES.
42ª Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química: Eixos Mobilizadores em Química

ANALYSIS OF FATTY ACIDS METHYL ESTERS FROM BIODIESEL BY GEL PERMEATION CHROMATOGRAPHY

Roberta P. M. da Costa (PG),^{1*} Débora F. de Andrade (PQ),² Rafael C. dos Santos (PG),¹ Cristiane G. de Souza (PG),^{2,3} Luiz A. d'Avila (PQ).¹

debora.franca.andrade@gmail.com; robertapmcosta@gmail.com

¹Programa de Engenharia de Processos Químicos e Bioquímicos, Escola de Química, UFRJ

²Instituto de Química, UFRJ

³Pós-Graduação e Pesquisa COPPE, UFRJ

Keywords: *Biodiesel, Methyl esters, Gel permeation chromatography.*

Highlights

Analysis of esters in biodiesel applying GPC
Analysis of esters in biodiesel applying the reference method
Comparative analysis between proposed and reference method
Validation of the proposed method

Abstract

The reference method employed on analysis of fatty acid methyl esters (FAMES), that are present on biodiesel, is based on gas chromatography techniques, GC (NBR 15764/2015). However, GC-based analyses present some drawbacks, once the presence of thermolabile compounds may affect the quantification reliability. Polyunsaturated hydrocarbon chain of fatty acids may undergo chemical alterations, as isomerization and decomposition at high temperatures. Thus, the main objective of that work is develop an alternative method, based on gel permeation chromatography (GPC), for quantification of FAMES on biodiesel. The results showed that GPC technique is suitable for quantification of FAMES on biodiesel. 0.5% THF in toluene was used as mobile phase, the column Phenogel™ 5 µm, 100 Å, 300 x 7.8 mm (Phenomenex) was used as stationary phase, the signal was recorded with a refractive index detector and the total time of the run was about 15 min. The proposed method presented good linearity, once the analytical curve for FAMES showed high linear correlation ($R^2=0.9769$). Limit of detection and the limit of quantification values were 0.42 and 1.26% mass. Accuracy values varied from 93.50 % to 101.92% and were considered acceptable, according to the limiting range from 70% to 120%. Precision was evaluated in terms of repeatability and the values of relative standard deviation were lower than 5%, denoting good precision. GPC showed itself as an alternative to GC, with the advantage of decreasing the run time from 35 min to 15 min.

Thermodynamic of bovine lactoferrin interaction with auramine O and methyl violet 2B

Hauster M. C. de Paula (PG),^{1*} Alan S. B. de Castro (PG),¹ Victoria V. P. Fonseca (IC),¹ Luis H. M. da Silva (PQ),¹ Ana C. S. Pires (PQ),².

hauster.campos@gmail.com

¹Grupo de Química Verde Coloidal e Macromolecular (QUIVECOM), Departamento de Química, Universidade Federal de Viçosa – MG; ²Grupo de Termodinâmica Molecular Aplicada (THERMA), Departamento de Tecnologia de Alimentos, Universidade Federal de Viçosa – MG.

Keywords: Surface plasmon resonance, Lactoferrin bovine, Thermodynamic.

Highlights

Determination the parameters thermodynamics of the LF-Auramine O and LF-MV2B complex formation.

Abstract

Azo dyes may have a carcinogenic effect when interacting with proteins¹. In this work, we investigated the interaction of azo dyes, methyl violet 2B (MV2B) and auramine O (AO) with bovine lactoferrin at different temperatures by surface plasmon resonance. Figure 1, shows the sensorgrams obtained from the Lactoferrin bovine (LF) interaction, immobilized on the surface of the sensor CM5 chip, with MV2B, at pH 7.4 at 25 °C. Sensorgrams data were globally fitted by a kinetic pseudo first order model (Eq. 1-2), obtaining the association (k_a) and dissociation (k_d) kinetic constants. By considering that $K_b = k_a/k_d$ and using from the K_b value, ΔG° ($\Delta G^\circ = -RT \ln K_b$) is calculated and by means of the Van't Hoff approximation the values of ΔH° , and finally, using Gibbs fundamental equation, $T\Delta S^\circ$ is obtained, as shown table 1.

Table 1. Thermodynamics parameters of LF-AO, and LF-MV2B, for six temperature.

| T °C | LF – AO | | | LF – MV2B | | | | |
|---------|--|--|--|-------------------|--|--|--|-------------------|
| | K_b 10^5 L mol^{-1} | ΔH° kJ mol^{-1} | ΔG° kJ mol^{-1} | $T\Delta S^\circ$ | K_b 10^5 L mol^{-1} | ΔH° kJ mol^{-1} | ΔG° kJ mol^{-1} | $T\Delta S^\circ$ |
| 12 | 1.28 | -27.87 | 59.08 | 0.54 | -25.85 | 70.46 | | |
| 16 | 1.58 | -28.79 | 60.00 | 0.70 | -26.84 | 71.46 | | |
| 20 | 1.85 | 31.21 | -29.56 | 60.77 | 0.89 | -27.78 | 72.39 | |
| 24 | 2.21 | -30.40 | 61.62 | 1.17 | 44.61 | -28.83 | 73.44 | |
| 25 | 2.29 | -30.60 | 61.81 | 1.26 | -29.10 | 73.72 | | |
| 28 | 2.58 | -31.20 | 62.41 | 1.45 | -29.76 | 74.37 | | |

the dyes. Fig. 1b and 1c, shows that the MV2B molecule has an additional benzyl group in its structure, compared to the AO molecule, which increases the hydrophobic character of MV2B, increasing the hydrophobic interaction contribution for LF-MV2B complex formation.

References

¹ POPLI, S.; PATEL, Upendra D. Destruction of azo dyes by anaerobic–aerobic sequential biological treatment: a review. International Journal of Environmental Science and Technology, v. 12, n. 1, p. 405-420, 2015.

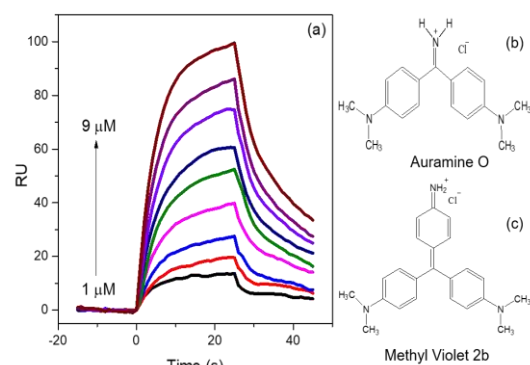


Figure 1. (a) Sensorgrams of MV2B with LF, at 25 °C. $1 \leq [M2B] \leq 9$. (b) Structure of AO. (c) Structure of MV2B.

The ΔG° values in the thermodynamic equilibrium show that the LF-AO, and LF-MV2B complex are stable. For both interactions processes is entropically directed, given $\Delta H^\circ > 0$ and $T\Delta S^\circ > 0$, and data show that hydrophobic interactions are predominant for stabilization of the complexes. We suggest that this difference in the thermodynamic parameters between the complexes is due to the structural difference between

$$RU(t) = RU_{max} [1 - e^{-k_{obs}(t-t_0)}] \quad \text{Eq. 1}$$

$$RU(t) = RU(t_f) e^{-k_d(t-t_f)} \quad \text{Eq. 2}$$

Acknowledgements

FAPEMIG, CNPq, CAPES, and FINEP.

42ª Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química: Eixos Mobilizadores da Química

Kinetic analyses for Brij58-Lactoferrin interaction

Alan S. B. De Castro (PG),^{1*} Hauster M. C. De Paula (PG),¹ Victoria V. P. Fonseca (IC),¹ Ana Clarissa dos S. Pires (PQ),² Luis Henrique M. Da Silva (PQ).¹

alan.benham@ufv.br

¹Grupo de Química Verde Coloidal e Macromolecular (QUIVECOM) - Departamento de Química; ²Grupo de Termodinâmica Molecular Aplicada – Departamento de Tecnologia de Alimentos; Universidade Federal de Viçosa – MG.

Keywords: Surface plasmon ressonance, Kinetic parameters, Surfactant, Protein.

Highlights

Kinetic parameters, such as $\Delta G^\ddagger_{\text{ass}}$, $\Delta H^\ddagger_{\text{ass}}$ and $\Delta S^\ddagger_{\text{ass}}$ for lactoferrin-Brij58 interactions were determined.

Abstract

The Brij58 interaction with Lactoferrin (LF) at different surfactant concentrations (9-20 μM), five temperatures (16,20,24,25 and 28°C), and pH=7.4 was investigated. It was found that the SPR signal increased with increasing concentrations of Brij58 (25°C, Fig. 1-a). The sensorgrams were fitted via the nonlinear parameter estimation method by using a pseudo-first order, obtaining the association (k_a) and dissociation (k_d) kinetic constants. Through Arrhenius plots (Fig. 1-b), thermodynamic parameters (Tab. 1) associated with transition complex formation from the association of free LF and Brij58 molecules or from dissociation of LF-Brij58 were obtained.

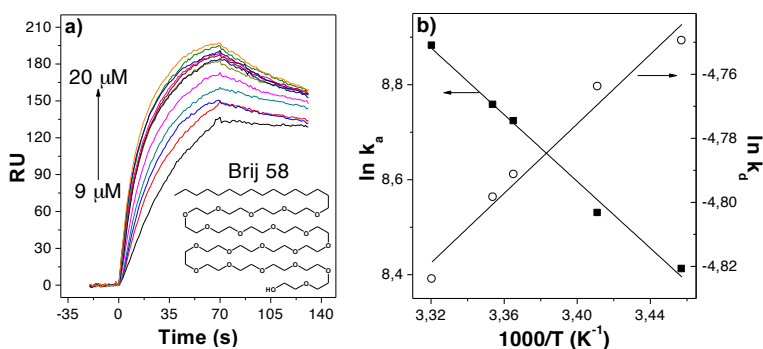


Figure 1. a) Sensorgrams for LF-B58 (9-20 μM) at 25°C and pH 7.4. b) Arrhenius plots of $\ln k_a$ (■) and $\ln k_d$ (○) associated with LF-B58 interactions as functions of reciprocal temperature.

In the association step, the formation of the transition complex requires the absorption of energy, E_{act} of 29.25 kJ mol^{-1} . Already the dissociation stage, it caused a release of energy for the system, E_{act} of -4.51 kJ mol^{-1} . The LF-Brij58 final complex formation was entropically driven, with an increase of ΔH° at 33.73 kJ mol^{-1} ($\Delta H^\ddagger_{\text{ass}} - \Delta H^\ddagger_{\text{diss}}$) and an increase of $T\Delta S^\circ$ at 68.35 kJ mol^{-1} ($T\Delta S^\ddagger_{\text{ass}} - T\Delta S^\ddagger_{\text{diss}}$), indicating that the hydrophobic interactions have a major contribution to the stability of the complex. Finally, the chemical equilibrium favors the formation of complexes with ΔG° of -33.60 kJ mol^{-1} .

Table 1. Kinetics and thermodynamic parameters for binding and formation of the transition complex of LF-B58 in buffer 7.4.

| T (°C) | k_a ($10^3 \text{M}^{-1} \text{s}^{-1}$) | k_d (10^{-2}s^{-1}) | Association phase (kJ mol^{-1}) | Dissociation phase (kJ mol^{-1}) |
|--------|---|--------------------------------------|---|--|
| 16 | 4.50 | 0.86 | $E_{\text{act}} = 29.25$ | $E_{\text{act}} = -4.51$ |
| 20 | 5.06 | 0.85 | | |
| 24 | 6.14 | 0.83 | $\Delta H^\ddagger = 26.74$ | $\Delta H^\ddagger = -6.99$ |
| 25 | 6.35 | 0.82 | $T\Delta S^\ddagger = -23.56$ | $T\Delta S^\ddagger = -91.91$ |
| 28 | 7.20 | 0.80 | $\Delta G^\ddagger = 51.31$ | $\Delta G^\ddagger = 84.91$ |

The data provide a better understanding of the interactions between globular proteins and nonionic surfactants, useful knowledge in planning new applications.

REFERENCE

1. Vogel, H. J., Lactoferrin, a bird's eye view. *Biochemistry and Cell Biology* **2012**, 90 (3), 233-244.

Acknowledgements: FAPEMIG, CNPq, CAPES, and FINEP.

Synthesis of conjugated coumarin-benzimidazole hybrids using a new ionic liquid catalyst

Juliana Gonzaga de Moraes (PG),^{1*} Luciana Machado Ramos (PQ),¹ Jhonathan Renner N. dos Santos (PG),¹ Andreia Ribeiro dos Santos (PG),¹ julianamoraisgm@gmail.com

¹ Laboratório de Química Medicinal e Síntese Orgânica – Universidade Estadual de Goiás, CCET-UEG

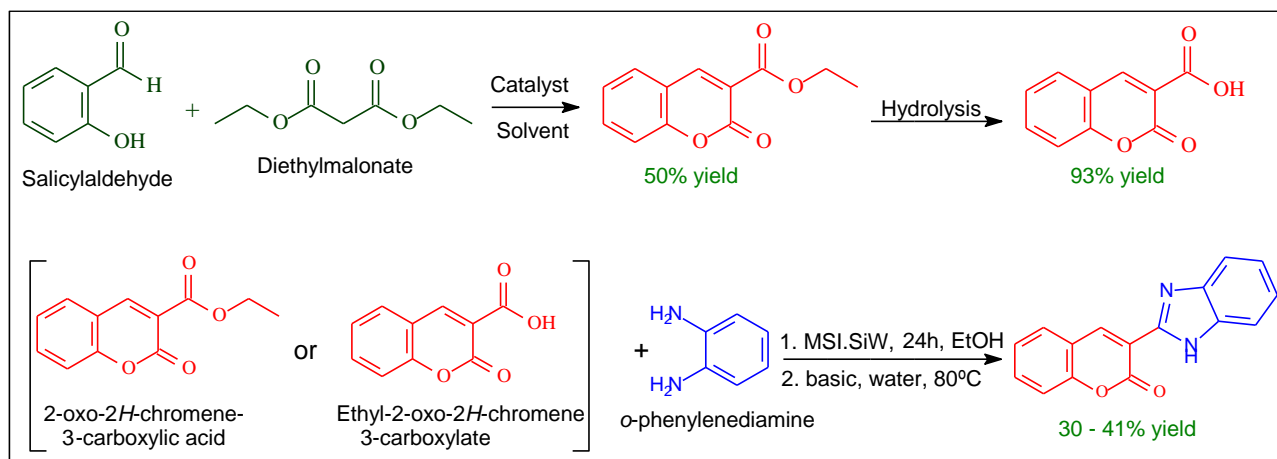
Keywords: Heterocyclic, Bioactivity, Ionic liquid

Highlights

Coumarin-benzimidazole hybrids were synthesized using an ionic liquid as catalyst to obtain compounds with pharmacological properties.

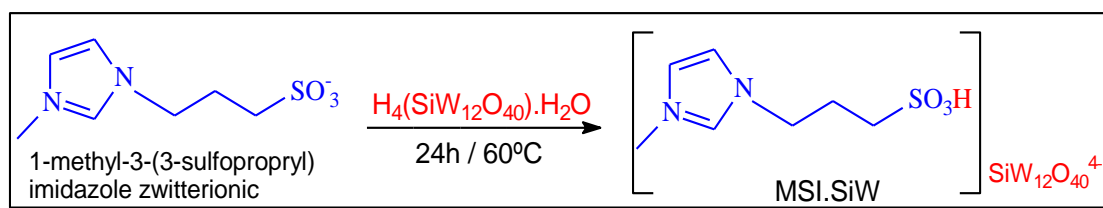
Resumo/Abstract

Heterocyclic compounds are targets of studies with a wide range of biological activities. Coumarins have pharmacological properties, such as: anti-inflammatories, antibiotics, anticoagulants, and are used in medicinal chemistry. Benzimidazoles demonstrate therapeutic potential, they are used in medicines like antihistamines and antihypertensives, have antioxidants, anti-inflammatories, antiviral properties. Proposing the incorporation of these biologically active nucleus, a hybrid compound was obtained to evaluate the biological activities. The synthetic methodology (Scheme 1) consists in obtaining coumarins via classical reactions, then the incorporation of the nucleus obtaining the hybrid, with the use of an ionic liquid as catalyst.



Scheme 1: Synthetic methodology of coumarins and coumarin-benzimidazole hybrid

The coumarin-benzimidazole hybrids obtained had a melting point of 226-230°C, being characteristic of the compound. The synthesis of the ionic liquid catalyst MSI.SiW (Scheme 2) occurs through the reaction between an intermediate ionic liquid MSI (1-methyl-3-(3-sulfopropyl) imidazole zwitterionic) and a heteropolyacid ($H_4(SiW_{12}O_{40}) \cdot H_2O$).



Scheme 2: Synthesis of IL catalyst MSI.SiW

The use of an IL catalyst contributes to green chemistry, it is a viable alternative, they are composed of low toxicity, easy to separate and non-flammable. After the evaluation of various catalysts, the use of MSI.SiW presented better results, higher yields, and the characterization of the product (IR, ¹H NMR, ¹³C NMR, MS) resemble results from the literature. Studies are underway to evaluate the biological potential of these compounds.

Área:

Nº de Inscrição: 00352

(Inserir o número de inscrição do autor que fez a submissão)

The effect of herbivory on volatile compounds of *Piper* species

Massuo J. Kato (PQ),* Mariana A. Stanton (PQ)

massuojorge@gmail.com¹Departamento de Química Fundamental, IQUSPPalavras Chave: *Volatile Organic Compounds; thermal desorption; herbivore-induced plant volatiles; Lepidoptera; Eois sp*

Highlights

Herbivory by specialist Lepidoptera increases plant volatiles released by *Piper* species in the field. Plant volatile ratios vary according to the type of herbivore or artificial damage experienced.

Resumo/Abstract

Plants of the genus *Piper* make up a large proportion of the understory of tropical forests and despite previous studies characterizing the diverse chemistry of many of these plant, little is known of the role of volatile organic compounds (VOCs) in mediating ecological interactions with higher trophic levels. VOCs can mediate host plant selection by herbivores and signal the presence of caterpillars to foraging predators and parasitoids, which in turn control herbivore populations, being of interest in the study of the structuring and maintenance of biodiversity. Caterpillars of the genus *Eois* (Lepidoptera: Geometridae) are reported to be specialist herbivores on *Piper* sp in the tropics, but their distribution on *Piper* sp host plants in Brazil is mostly unknown. To evaluate if herbivory changes the VOC profile of *Piper* plants, we carried out VOC sampling in the field for 12 focal *Piper* species with and without herbivore damage by *Eois* larvae. VOC sampling was carried out by sorptive extractions with polydimethyl-siloxane (PDMS) tubes and analysis by thermal desorption on a GC-MS. Herbivory led to an increase in total VOC release by all 12 *Piper* species analyzed. While most species showed an increase of the abundant sesquiterpene *E*- β -caryophyllene, each species also showed significant increases in a subset of minor and major compounds. Further in-depth study of *P. crassinervium* in a common garden experiment showed that herbivory by the specialist *E. olivaceae* led to the highest amount of VOC release compared to plants treated with herbivory by the generalist herbivore, *Spodoptera frugiperda* (Lepidoptera: Noctuidae), mechanical damage with a pattern wheel, and undamaged controls. Additionally, the principal components analysis of the VOC profiles show that the ratios of VOCs, i.e., the VOC blends, released by *P. crassinervium* changes with each of these treatments. Field sampling of *P. arboreum* with herbivory by three naturally occurring herbivores Lepidopteran herbivores also showed a release of specific VOC blends in response to each herbivore.

Agradecimentos/Acknowledgments

The authors acknowledge funding from FAPESP thematic project (2014/50316-7) and FAPESP post-doctoral fellowship (2015/26823-9), Dr. Simeão M. Moraes for molecular and morphological identification of *Eois* specimens, and Dr Lydia F. Yamaguchi for assistance in the field.

Área: ANA

(Inserir a sigla da seção científica para qual o resumo será submetido. Ex: ORG, BEA, CAT)

Nº de Inscrição: 00354

(Inserir o número de inscrição do autor que fez a submissão)

Evaluation of films of nanocomposite as sorbent materials for sample preparation

Josiele A. M. Conrado* (IC),¹ **Samuel C. Silva** (PG),¹ **Edson Nossol** (PQ),¹ **Alex D. Batista** (PQ)¹.

*e-mail: josikpela@hotmail.com

¹Instituto de Química, UFU.

Keywords: (adsorption, pharmaceuticals, chromatography, extraction, preconcentration)

Highlights

Proposal of the use of Prussian blue (AP) / carbon nanotube (NTC) / graphene oxide (OG) nanocomposite films as adsorbents for extraction and preconcentration of pharmaceuticals from aqueous samples

Resumo/Abstract

Adequate sample preparation is a critical step in any analytical procedure¹. This is the costliest and most time-consuming step involved in the analytical process, besides being the most prone to occurrence of errors, analyte losses and contaminations². The use of adsorbent materials is one of the most used strategies in sample preparation techniques, such as solid phase extraction and its variants. The choice of the suitable adsorbent material is of extreme importance in the performance of the sample preparation, one of the adsorbents studied for this purpose are the nanostructured materials³. In order to separate four pharmaceuticals: paracetamol (PAR), nimesulide (NIM), naproxen (NAP) and diclofenac (DIC), high-performance liquid chromatography (HPLC) was used, the detection was based on the absorbance of the species in the ultraviolet region. The chromatographic separation was performed by isocratic elution with mobile phase composed by water (pH 3.5) and methanol in proportions of 75% of 25%, respectively, at a flow-rate of 1 mL min⁻¹ in a C18 column (250 x 4.6mm, 5µm) at 35 ° C. The nanocomposite films were synthesized by the interfacial method and deposited on a glass support previously treated with NaOH, obtaining a film area of approximately 2 cm². After optimization of chromatographic conditions, the performance of Prussian blue (AP) / carbon nanotube (NTC) / graphene oxide (OG) nanocomposite films was evaluated in the extraction and pre-concentration of PAR, NIM, NAP and DIC. Parameters such as the influence of the pH of the medium, the adsorption time and the initial concentration were studied. The pH 2 was chosen for the preconcentration and pH 9 for desorption with 25mL of H₂O and CH₃OH. The adsorption tests were performed in triplicate, under constant agitation, with an extraction time of 10 minutes and a temperature of 25 ° C. Results showed affinity of the material for the extraction of PAR, NIM, NAP and DIC. Analytical calibration was performed and equations curves employed for the preconcentration evaluation. Recovery of the pharmaceutical after extraction was estimated at around 60%. The studied pharmaceuticals were all extracted of the initial solution being adhered to the film, however just PAR, NIM and NAP were efficiently desorbed. From the obtained data it can be concluded that the nanocomposites films would be an excellent strategy for the adsorption of the drugs PAR, NIM and NAP in possible environmental samples, such as river water and water supply

¹PAN, J. et al. *Analytica Chimica Acta*. 815, 2014, 1.

²JARDIM, I. C. S. F. *Scientia Chromatographica*, 2, 2010, 13.

³DIMPE, K. M.; NOMNGONGO, P. N. *TrAC Trends in Analytical Chemistry*. 82, 2016,199.

Agradecimentos/Acknowledgments

CNPq, FAPEMIG e CAPES

Área: MAT

Nº de Inscrição: 00355

A green approach to PET recycling using cobalt nanoparticles

Fernanda R. Vereque* (PG),¹ **Cleiser T. P. da Silva** (PG),¹ **Andrelson W. Rinaldi** (PQ).¹

fernandavereque@gmail.com; andrelson.rinaldi@gmail.com;

¹ *Materials Chemistry and Sensors Laboratory - LMSen – State University of Maringa, Maringa-PR, 87020-900.*

Keywords: *Depolymerization, Green chemistry, Ultrasmall nanoparticles, Glycolysis reaction, Borohydride reduction.*

Highlights

Cobalt Nanoparticles as a catalyst in polyethylene terephthalate depolymerization, in order to add value to the large amount of PET waste, considered a current and growing environmental problem.

Resumo/Abstract

Polyethylene terephthalate (PET) is one of the most commonly used plastic. The reason for this is the excellent material properties as chemical stability, good barrier towards moisture and oxygen and low market price. Its widespread use generates tonnes of PET waste to the environment. The current scenario demands a ecofriendly and economical route for recycling PET wastes, one this polymer can last on the planet for several years before complete decomposition. Faced with this problem, the glycolysis of this polymer becomes a viable alternative. The glycolysis reaction consists in boiling the PET cut into small pieces in 1,2-ethanediol and a catalyst, in order to enhance the glycolysis reaction rate. The product of this reaction is bis-2-hydroxyethyl terephthalate. Thereby, value is added to PET waste once this product can be utilized as a starting material in the manufacture of polyurethanes, unsaturated polyesters and saturated polyester plasticizers. The catalyst nanoparticles were synthesized by a reduction approach using sodium borohydride as the reducing agent and tannic acid, as the capping agent, obtaining ultrasmall cobalt nanoparticles (~ 3 nm). Some advantages of the use of nanoparticles are their higher selectivity toward the production of BHET and the reusability of the catalyst for further runs. The glycolysis of PET using the ultrasmall cobalt nanoparticles converted 96% of PET waste and the yield of BHET is 77% of pure BHET without the need for water, rendering a clean environmentally process. In addition to high performance, the catalyst do not need to be removed from the solvent, making its reuse easier, moreover the solution was recycled for at least five runs without the need of any solvent treatment.

Xi, G. X.; Lu, M. X.; Sun, C. Study on depolymerization of waste polyethylene terephthalate into monomer of bis(2-hydroxyethyl terephthalate). *Polym. Degrad. Stab.* 2005, 87 (1), 117–120.

Awaja, F.; Pavel, D., Recycling of PET. *European Polymer Journal* 2005, 41 (7), 1453-1477; (b) Welle, F., Twenty years of PET bottle to bottle recycling — An overview. *Resources, Conservation and Recycling* 2011, 55 (11), 865-875

Bartolome, L.; Imran, M.; Cho, B. G.; Al-Masry, W. A.; Kim, D. H., Recent Developments in the Chemical Recycling of PET. In *Material Recycling - Trends and Perspectives*, Achilias, D. S., Ed. InTech: 2012.

Agradecimentos/Acknowledgments

The authors thank all involved in the work, the research laboratory LMSen, Rinaldi Research Group, COMCAP/UEM and Brazilian Agencies for fellowship CNPQ, Fundação Araucária and CAPES. (Proc. grants. 577527/2008-8, 310820/2011-1, 113881/2018-5, 101157/2016-9, 830/2013).

Ensino de química em centro de recuperação através de oficinas: uma experiência com alunos do ensino médio.

Dhaniella C.B. Oliveira (IC),¹ Luely O. Silva (PQ),²

dhaniella.admm@gmail.com

¹Licenciatura Plena em Ciências Naturais – Química, Universidade do Estado do Pará; ²Departamento de Ciências Sociais e da Educação, Universidade do Estado do Pará

Palavras Chave: Oficinas, Química, Ressocialização.

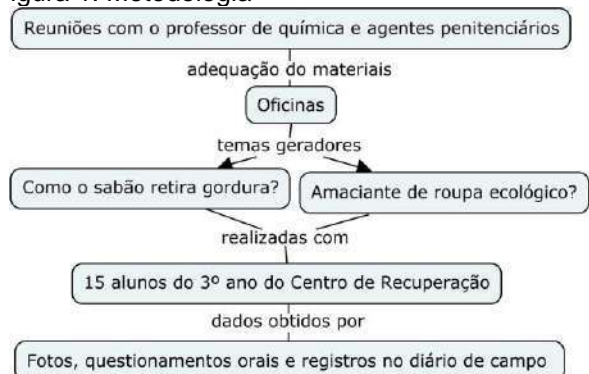
Highlights

Chemistry teaching in recovery center through workshops: an experience with high school students. Workshops with students deprived of liberty with the objective of to verify the advantages of this didatic. It resulted in the content approach in a shorter class time and greater student interaction.

Resumo

A oferta de educação nos estabelecimentos penais, prevista pela Lei 10.172/2001, visa, proporcionar uma reintegração mais sólida dos encarcerados a sociedade mediante o aumento da escolaridade (Oliveira, 2017). Neste sentido, de acordo com Brasil (2006) a disciplina de química possui grande potencial ressocializador uma vez que atrela a seus conhecimentos habilidades indispensáveis à formação cidadã. Com o objetivo de verificar as vantagens do ensino de química através de oficinas em um centro de recuperação, utilizou-se a metodologia apresentada na figura 1.

Figura 1: Metodologia



As oficinas ocorreram conforme São Paulo (2007) destaca, com os estudantes realizando o experimento e os professores atuando somente como mediadores, como verificado na figura 2.

Figura 2: Oficina de produção de amaciante (A) e sabão (B).



(A)

(B)

As oficinas seguiram todas as orientações do

Departamento de segurança utilizando materiais plásticos e transparentes e o sabão produzido foi elaborado a partir de diluições de sabão sólido para utilização da soda caustica presente neste. Percebeu-se maior interação dos estudantes na aula, um menor tempo de apresentação de conteúdo com abordagem teórica e prática. Nos questionamentos os estudantes responderam satisfatoriamente e ao final comentaram que o aprendizado obtido seria relevante para a redução de custo durante a vivência no local e também como trabalho nos primeiros meses no “mundo livre”. Onofre (2007) aborda que o ensino em prisões deve contribuir para a vida dos encarcerados, assim, as oficinas apresentam grande potencial didático proporcionando aprendizagem prática e significativa.

BRASIL, Plano Nacional de Educação Lei nº 10.172/2001. Disponível em: <https://www.planalto.gov.br/ccivil_03/leis/leis_2001/10172.htm> Acesso em: out/2018

_____, Ministério da educação (MEC). Orientações Curriculares do Ensino Médio. Brasília: MEC/SEB, vol. 2, 2006

OLIVEIRA, C. B. F. A Educação nas Prisões Brasileiras: a responsabilidade da universidade pública. Tese Doutorado (Educação). Universidade de São Paulo, 2017. p. 1-293

ONOFRE, E. M. C. org. A educação escolar entre as grades. [online]. São Carlos: EdUFScar, 2007. Available from SciELO Books. <<http://books.scielo.org>> Acesso em: jan. 2019

SÃO PAULO. Oficinas temáticas no ensino público: formação continuada de professores. Material produzido pelo Grupo de Pesquisa em Educação Química (GEPEQ), Universidade de São Paulo. São Paulo: FDE, 2007. 108 p. São Paulo, 2007. Disponível em: <<http://bdpi.usp.br/single.php?id=001658832>>

Acesso em: nov. 2018.

Área: AMB N° de Inscrição: 0357

Optimization of Manganese removal in aqueous solution by *Bacillus cereus*

Flávia Donária Reis (PQ),¹ Ludmila de Olivera Fagundes (IC),² Giselle Cristina Cândido (PG),² Sandra de Cássia Dias (PQ),¹ Versiane Albis Leão (PQ),².

flaviadonaria@gmail.com; flaviadonaria@gmail.com

¹ Department of Chemical, Biotechnology and Bioprocess Engineering, Federal University of São João del Rei, Campus Alto Paraopeba, CEP 35420-000, Ouro Branco, MG, Brazil; ² Department of Metallurgical and Materials Engineering, Federal University of Ouro Preto, Campus Morro do Cruzeiro, CEP 35400-000, Ouro Preto, MG, Brazil.

Palavras Chave: *Bacillus cereus*, Biomass, Bioremediation, Heavy metals, Manganese removal, Optimization.

Highlights

The use of *B. Cereus* for Mn removal was studied.
Selected factors: biomass dosage, initial concentration of Mn and agitation.
Optimization of Mn removal was chemical and statistically explained.

Resumo/Abstract

Manganese is a contaminant present in the assorted effluents and biosorption is an alternative-effective process to metal detoxification [1]. This work aimed to optimize the operational conditions of Mn²⁺ biosorption by *Bacillus cereus*. Biomass dosage, x_1 (10-40%), initial concentration of Mn, x_2 (10-100 mg L⁻¹) and system agitation, x_3 (120-180 min⁻¹) were considered. Full factorial design (2³) with 5 centerpoint replicates experiments and Response Surface Methodology (RSM) using a three-factorial Box–Behnken design with 5 centerpoint replicates were performed. The factors showed positive effects and the individual contribution of each one can be explained: (i) larger amounts of microorganisms provides better removal of manganese through biosorption; (ii) as biosorption involves mass transfer processes, by Mn²⁺ diffusion from the bulk to the biomass surface, higher concentrations of metal results in adsorption/removal increasing; (iii) the agitation helping external diffusion because it decreases the boundary layer thickness of liquid medium and microorganism interface. Interactions between the factors showed a negative value for the biomass - agitation and between them and the manganese concentration. Although the agitation improves the biosorption and contributes to the mixing and aeration, high agitation values may be incompatible with the maximum shear stress of the microorganism. The optimized conditions were: $x_1=40$ %, $x_2=75$ mg L⁻¹; $x_3=150$ min⁻¹. These results were valuable to contribution to understand the mechanism of Mn²⁺ biosorption by *B. cereus*.

Referências Bibliográficas

[1] Patil, D.S., Chavan, S.M., Oubagaranadin, J.U.K., 2016. A review of technologies for manganese removal from wastewaters. Journal of Environmental Chemical Engineering 4, 468-487.

Agradecimentos/Acknowledgments

The authors should like to thank Agência Financiadora de Estudos e Projetos (FINEP), Fundação de Amparo a Pesquisa do Estado de Minas Gerais (FAPEMIG), Conselho Nacional de Pesquisa e Desenvolvimento (CNPq), Vale and Federal University of Ouro Preto as well as Federal University of São João del Rei for providing support for the current work.

Área: AMB

Nº de Inscrição: 00358

Method of ultra deep ore deposits detection

Lílian Lefol Nani Guarieiro (PQ),^{1,2} Ilan Sousa Figueirêdo (PG),¹ Mário Pereira Carvalho (PQ),¹ Jeancarlo Pereira dos Anjos (PQ), Allan Fruchting (PQ),³ Fernando Henrique Baia (PQ)³

lilian.guarieiro@fieb.org.br;

¹Centro Universitário SENAI CIMATEC, CEP 41650-010, Salvador-BA, Brazil.; ²National Institute of Science and Technology in Energy and Environment, CEP 40170-290 Salvador-BA, Brazil; ³NEXA Resources

Palavras Chave: Mining, Prospecting tool, Ascending gas flow, Geogas, Concealed ore deposits.

Highlights

- Passive nanoparticle collector technology;
- Mineralized nanoparticles from deep ore bodies;
- Detection of metallic anomalies at great depths of up to 1,000 meters.

Resumo/Abstract

Geochemical methods have played an important role in the discovery of minerals. However, both regional exploration and the selection of drilling target location for new ore deposits are becoming increasingly difficult. Geochemical patterns delineated by conventional geochemical methods can be weakened or improved by various surface processes.

Dynamic techniques of wide geogas sampling and ultra-sensitive methods have been developed and validated to analyze the metal content present in ores. The methodology has already been applied in known areas, such as for gold deposits already tested and validated in Shandong province, where the largest gold deposits in China occur.

The method proposed by this paper consists of the collection and analysis of metallic elements of geogas nanoparticles. The geogas consists of microflow of gases that pass through the mineralization capable of absorbing microscopic amounts of solid substances from the deep ores or other geological bodies that elevates them to the terrestrial surface.

The main benefits generated by the method proposed allowed great advantages over the devices and techniques currently used and found in the market for the same application. These advantages include: the ability to detect mineralizations occurring at great depths of up to 1,000 meters and, at the same time, to eliminate the barrier produced by the existence of transported soils that may occur between subsurface mineralization, and the devices installed on the surface; and ease of construction, use and low cost.

This work developed the entire design and manufacture of the passive nanoparticle collector technology, validation in mineralized environment of the passive nanoparticle collector technology and spatial correlation of the deposit of deep ores with the analytical results of the mineralized nanoparticles.

The spatial analogy of the nanoparticles with the mineralized body of the relevant environment presented a satisfactory result, since the highest concentrations of these metals were obtained in nanoparticles collected in the mineralized region.

Agradecimentos/Acknowledgments

The authors thank Embrapii - Brazilian Association of Research and Industrial Innovation and the mining company that provided the database for research

Magneto-luminescent properties of lanthanide-doped nanoparticles as a function of the core-shell hierarchy

Flávia S. Ferreira (PG),¹ Ítalo O. Mazali (PQ),¹ Fernando A. Sigoli (PQ),¹

fsigoli@unicamp.br

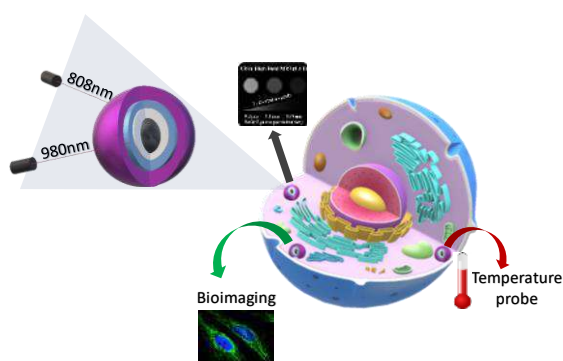
¹ Laboratory of Functional Materials, Institute of Chemistry, UNICAMP, Campinas, Brazil

Keywords: Lanthanide, upconversion, magnetic nanoparticles.

Highlights

The nanoparticles may be excited at 980nm and 808nm allowing their application in two different biological windows as well as a magneto system, leading to a magneto-luminescent material.

Abstract



Multifunctional systems based on lanthanide-doped nanoparticles can combine optical and magnetic properties with wide applications in the diagnosis and treatment of diseases. Lanthanide ions have well-defined emission bands in a wide region of the electromagnetic spectrum. Moreover, they frequently absorb radiation in the near infrared region and emit ultraviolet or visible light, in a process known as upconversion. Hence, those systems are promising for cell imaging and photodynamic therapy. Associated with their luminescent characteristics, paramagnetic lanthanides constitute a promising class of contrast agents in MRI. Thus, this work presents the

development of various systems of magneto-luminescent nanoparticles with potential application as biological markers². Through the thermal decomposition method, the core-shell was prepared in a such procedure that the NaYDyF₄ core was protected by an inert NaYF₄ layer, followed by an optically active NaGdF₄ shell doped with Er(III) and Yb(III) ions as an activator and a sensitizer, respectively, and finally a Nd(III) doped NaGdF₄ shell. Results show the formation of particles of uniform size and morphology with well-defined crystalline phases. In this perspective, it was possible to evaluate the role of each lanthanide dopant and to obtain nanoparticles with high upconversion emission intensity exciting at 980nm or 808nm. Furthermore, considerable saturation magnetization values, 90 emu.g⁻¹ at 2K were obtained. All the obtained results show the potential of the synthesized lanthanide-doped systems as a promising class of biological probes.

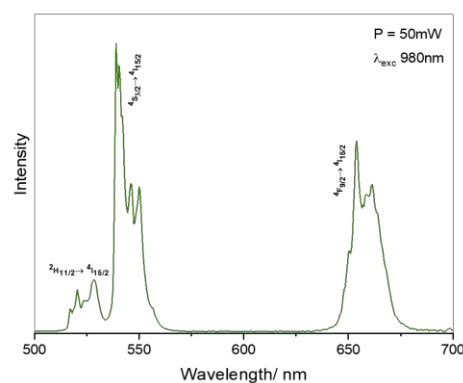
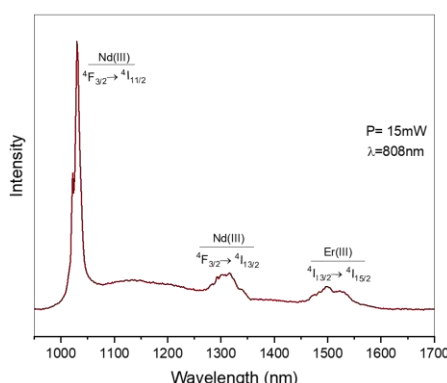


Figure 1: Downshift emission in the NIR region. Figure 2: Upconversion emission

Acknowledgments

CAPES, FAPESP, CNPq, INOMAT and Multi-user Laboratory for Advanced Optical Spectroscopy.

Towards the multi-step flow synthesis of the URAT1 inhibitor Lesinurad

Mariana Frojuello (PG),¹ Henrique Marçon (PG),¹ Julio Cezar Pastre (PQ).^{1*}

mariana_frojuello@hotmail.com; jpastre@unicamp.br

¹ Chemistry Institute, UNICAMP, Zip Code 13083-970

Keywords: Gout, Lesinurad, Continuous Flow, 5-Thio-1,2,4-triazole.

Highlights

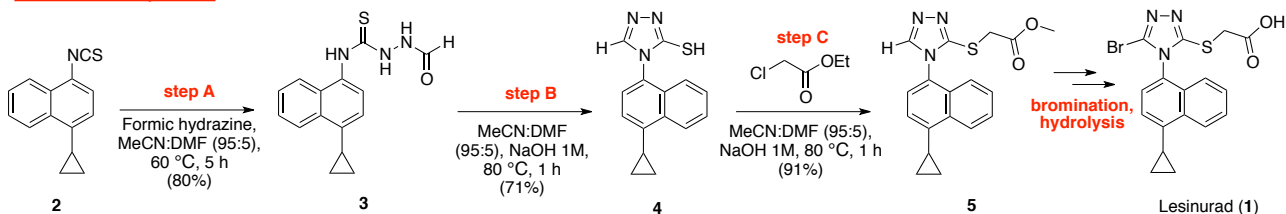
Lesinurad is a novel drug to treat gout, and it presents a 5-thio-1,2,4-triazole core. We sought to develop a more cost and time-effective alternative synthesis of lesinurad using a continuous flow platform.

Resumo/Abstract

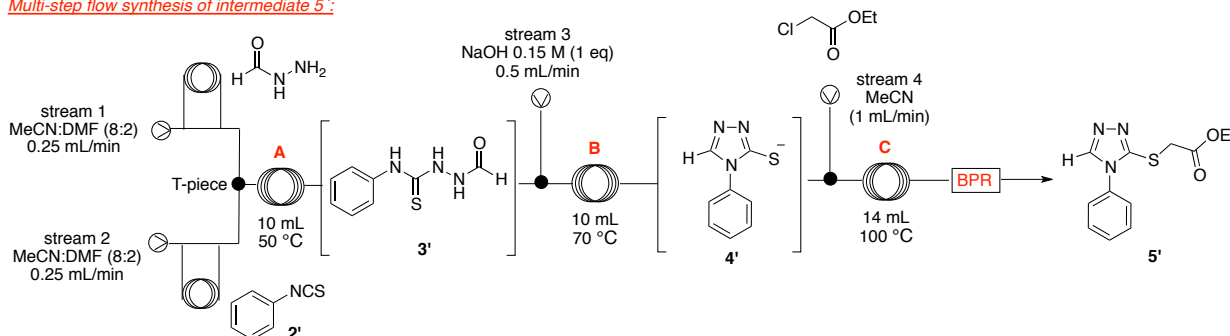
Lesinurad (RDEA594), a first-in-class URAT1 inhibitor with potency of increasing the excretion of uric acid, was approved in the USA in 2015. Our aim is to optimize and translate the synthetic route to a continuous flow system in order to achieve a short and scalable synthesis of lesinurad. Additionally, we previously reported the flow synthesis of 5-thio-1,2,4-triazoles, and we intend to use similar conditions to generate the key intermediate **5**. Firstly, we performed the batch synthesis of compound **5** using solvents and reagents that would easily fit flow conditions. Condensation of formic hydrazine and **2** gave **3**, which was further cyclized and alkylated to obtain **5** in 6 hours and 52% overall yield.

Next, we sought to integrate steps A, B and C using continuous flow microreactors. In order to find the best conditions, we decided to use a model substrate, phenyl isothiocyanate (**2'**). We were able to generate compound **5'** in 37 minutes of residence time and in 61% overall yield. With these results in hands, we will apply these parameters using isothiocyanate **2** as starting material to rapidly obtain **5** with improved yield.

Lesinurad batch synthesis:



Multi-step flow synthesis of intermediate 5':



Agradecimentos/Acknowledgments

We acknowledge financial support from Fapesp, Faepex, Capes and CNPq.

Área: **MAT**

Nº de Inscrição:

Usage of high intensity ultrasound in preparation of poly(alcohol vinyl) of pharmaceutical interest

Guilherme K. Cavalcante (IC)¹, Débora O. Futuro (PQ)¹, Valéria G. Costa (PQ)²

guilhermekc@id.uff.br; dfuturo@id.uff.br

¹Laboratório de Tecnologia Farmacêutica, Faculdade de Farmácia - FF, Universidade Federal Fluminense – UFF. Rua Dr. Mário Viana 523, Santa Rosa, Niterói, RJ. CEP: 24241-002

²Laboratório de Tecnologia de Materiais Poliméricos – LAMAP, Divisão de Processamento e Caracterização de Materiais - DIPCM, Instituto Nacional de Tecnologia – INT. Av. Venezuela 82, sl.106, Saúde, Rio de Janeiro, RJ. CEP:21312-080

Palavras Chave: *Ultrasound, High Intensity Ultrasound, Poly(vinyl alcohol)*

Highlights

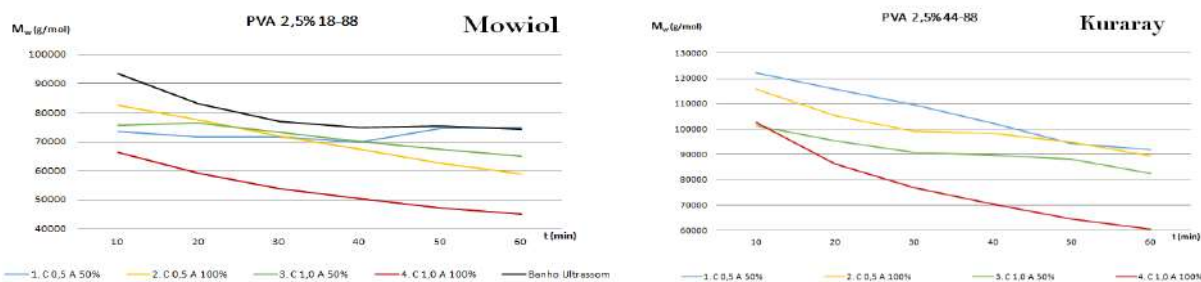
Strategies in the preparation of polyvinyl alcohol (PVA) solutions to reduce the slow process step with the use of ultrasonic processors.

Resumo/Abstract

Polyvinyl alcohol (PVA) is a synthetic hydrophilic polymer with industrial application in several areas. PVA is one of the most widely used synthetic polymers in the composition of biomaterials due to their good biocompatibility. In the process of obtaining products where PVA is present the preparation of its solutions is considered the slow step of the process. The use of High Intensity Ultrasound (HIUS) is a widely used strategy for homogenization of samples, among others. In this project we intend to study the efficiency of ultrasonic processors in the preparation of polyvinyl alcohol solutions. Until the present date, two distinct PVA's have been analyzed, Mowiol (18-88) and Kuraray (44-88, pharmaceutical grade). High Intensity Ultrasound (UPS400S - Hielscher) and Ultrasound Bath (UR1 - Retsch) were used to prepare the solutions. The aqueous solutions prepared were 2.5% (w/v), four conditions of use were made on the UPS400S:

| Condition | Cycle | Amplitude |
|-----------|-------|-----------|
| 1. | 50% | 50% |
| 2. | 50% | 100% |
| 3. | 100% | 50% |
| 4. | 100% | 100% |

And the fifth condition of use was made on the UR1. All conditions had a total time of 60 min with a pause every 10 min for removal of aliquots with temperature measurement. The solutions were prepared in a 500 mL Becker in running water at ambient temperature. All samples prepared were analyzed by gel permeation chromatography (GPC) indicating M_w (g/mol), M_n (g/mol), M_z (g/mol), RV (mL) of each sample. The analyzes made in the GPC demonstrates the expected behavior of the ultrasound in their respective conditions of use, especially in the pharmaceutical PVA, in addition it was possible to observe the low capacity of the Ultrasonic Bath in what concerns the decrease of the molar mass, as observed in the graph below.



The results showing that HIUS is useful technique to produce reduced molecular mass polymeric solutions to pharmaceutical applications.

Agradecimentos/Acknowledgments

The author thanks FAPERJ for financial assistance and INT for the use of laboratory facilities.

Recent Findings on Cyclopropanation of Activated Olefins

Gabriel M. F. Batista (PG), Pedro P. de Castro (PG), Arthur G. Carpanez (PG), Giovanni W. Amarante (PQ).

gmfb2210@gmail.com; giovanni.amarante@ufjf.edu.br

Departamento de Química, Universidade Federal de Juiz de Fora, UFJF

Palavras Chave: Cyclopropanation, Olefins, Dess-Martin Periodinane.

Highlights

Two steps protocol for the cyclopropanation of activated olefins using potassium trichloroacetate salt has been developed.

Resumo/Abstract

Pharmaceutical and agrochemical molecules bearing a cyclopropane moiety, such as permethrin (insecticide) and the ciprofloxacin (antibiotic), highlight the importance of this scaffold in medicine and agrochemistry. Thus, this work reports the development of a methodology for metal-free cyclopropanation of Morita-Baylis-Hillman (MBH) derivatives. Initially, a room temperature oxidation of MBH products using Dess-Martin Periodinane (DMP) (Scheme 1) was performed. Similarly showed by Coelho and co-workers, oxidation smoothly release the product after 30 min reaction (Table 1). The oxidation of the hydroxyl group is important to lower the LUMO orbital energy level, consequently favoring the reaction with nucleophiles.

This step is then followed by a metal-free cyclopropanation, employing only potassium trichloroacetate and DMSO, affording 1,1-dichloro-cyclopropane derivative in quantitative yield. Initial mechanistical investigations reveal a stepwise Michael-type addition followed by chlorine elimination most likely to carbene [2+1] process. Fully mechanism investigation as well as the generality of the process are ongoing in our laboratory.

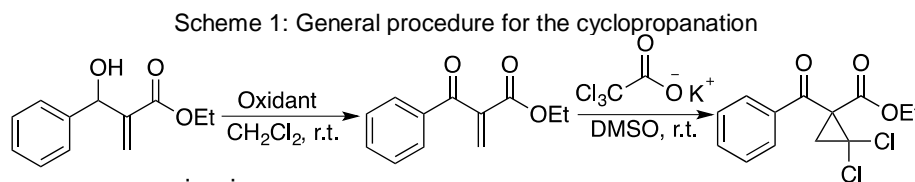


Table 2: Optimization of cyclopropanation reaction.

Table 1: Optimization of MBH adduct oxidation

| Entry | Oxidant | Eq. of oxidant | Time (hrs) | Temperature °C | Solvent | Yield |
|-------|--------------------------------|----------------|------------|----------------|---------------------------------|--------------|
| 1 | MnO ₂ | 10 | 24 | r.t. | CH ₂ Cl ₂ | 0 |
| 2 | Nb ₂ O ₅ | 0,15 | 24 | r.t. | CH ₂ Cl ₂ | 0 |
| 3 | DMP | 1,5 | 20 | r.t. | CH ₂ Cl ₂ | quantitative |
| 4 | DMP | 1,25 | 20 | r.t. | CH ₃ CN | 0 |
| 5 | DMP | 1,5 | 20 | 55 | CH ₃ CN | 0 |
| 6 | DMP | 1,25 | 20 | r.t. | CH ₂ Cl ₂ | quantitative |
| 7 | DMP | 1,25 | 0,5 | r.t. | CH ₂ Cl ₂ | quantitative |

References: ¹ F. Coelho *et.al.* RSC Advances, 2012, 2, 3237–3241.

| Entry | Time (minutes) | Concentration (M) | Eq. of salt | Conversion ^a |
|-------|----------------|-------------------|-------------|---------------------------|
| 1 | 120 | 0,5 | 2 | quantitative |
| 2 | 90 | 0,5 | 2 | quantitative |
| 3 | 60 | 0,5 | 2 | quantitative |
| 4 | 30 | 0,5 | 2 | quantitative ^b |
| 5 | 20 | 0,5 | 2 | 94,2 |
| 6 | 10 | 0,5 | 2 | 81,6 |
| 7 | 30 | 1 | 2 | 51 |
| 8 | 30 | 0,75 | 2 | 39,7 |
| 9 | 30 | 0,5 | 1,25 | 81,8 |
| 10 | 30 | 0,5 | 1,5 | 95,1 |
| 11 | 30 | 0,5 | 1,75 | 97,4 |

^a Measured by ¹H NMR analysis of the crude reaction mixture.
^b 30 °C minimum reaction temperature to avoid byproducts.

Agradecimentos/Acknowledgments

CAPES (Finance code 001), CNPQ, Rede Mineira de Química, UFJF and FAPEMIG for financial support.

Área: ORG

Nº de Inscrição: 00364

Investigation of mechanistic aspects of the nucleophilic substitution reaction of azide in benzodiazepines derivatives.

Tereza Cristina S. Evangelista (PG), Dinesh Addla (PQ), Tiago Lima da Silva (PQ), Carlos Roland Kaiser (PQ), Sabrina Baptista Ferreira (PQ)*

sabrinabferreira@gmail.com

Laboratory of Organic Synthesis and Biological Prospecting, Chemistry Institute, Federal University of Rio de Janeiro, CEP 21941-909

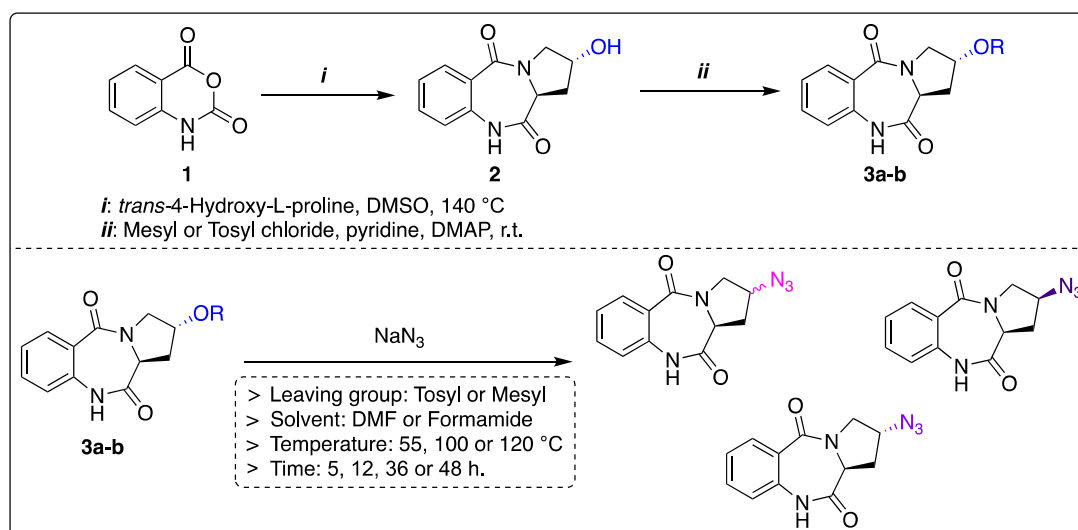
Keywords: Benzodiazepines, S_N2 reactions, NMR analysis, Azido intermediates, chiral center.

Highlights

Azido-PDB as intermediate in CuAAC reaction. S_N2 not leading to 100% inversion of configuration. Mechanistic investigation by changing reaction conditions. Stereochemical characterization by NMR.

Abstract

Pyrrolo[2,1-c][1,4]benzodiazepines (PBD) are a class of naturally occurring tricyclic molecules that exhibit a broad spectrum biological activities, featuring its antitumor properties. Currently, some efforts have been made on the synthesis of new PBD derivatives linked with different units, including heterocycles and aliphatic chains.¹ In this manner, we proposed the synthesis of new PBD-triazole derivatives as new antitumor agents. The triazole synthesis will be carried out by the copper-catalyzed 1,3-dipolar cycloaddition (CuAAC) reaction, between a commercial alkyne and the azido-PBD derivative. The azido-PBD derivative was synthesized according to the **Scheme 1**, starting with a condensation reaction between isatoic anhydride (**1**) and *trans*-hydroxy-L-proline (**2**), followed by the conversion of the hydroxyl group into a better leaving group (**3a-b**). After that, a S_N2 reaction with NaN_3 affords the azido-PBD derivative. However, it wasn't observed a 100% inversion of configuration after the S_N2 using DMF as a solvent, at 120 °C, leading to a mixture of the azido diastereoisomers. Therefore, the present work evaluates the influence of a variety of effects on the reaction pathway, including changes in the leaving group, solvent, temperature and reaction time. The 1D and 2D NMR techniques are going to be used to identify intermediates and follow the changes in the reaction over time. Furthermore, Chiral HPLC will be useful to characterize the ratio of diastereoisomers and enantiomers in the final product.



Scheme 1. Synthesis of Azido-PBD derivative at different reaction conditions.

1. (a) Varvounis, G. *Molecules*, **2016** 21(2), 154; (b) Banerjee, D. *et al. Chem-Bio Interact.*, **2015**, 237, 115.

Acknowledgments

The authors gratefully acknowledge the financial support from the CNPq, CAPES and FAPERJ.

42ª Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química: Eixos Mobilizadores em Química

Área: QVE

Nº de Inscrição: **XXXX**

Química Verde: dificuldades e perspectivas ao seu ensino

Carlos Alberto Marques (PQ),¹ Leonardo Victor Marcelino (PD),² Patrícia Runtzel (PQ)², Érica Dias (PQ),² Kelly Bernardo (PQ),² Fabiana Roberta Gonçalves e Silva Hussein (PQ)².

carlos.marques@ufsc.br;

¹Departamento de Metodologia de Ensino, UFSC; ²Prog. Pós-Grad. Em Educação Científica e Tecnológica, UFSC

Palavras Chave: *Ensino da QV, Química Verde; Sustentabilidade Ambiental.*

Highlights

Green Chemistry: obstacles and perspectives to its teaching. We investigate 207 papers about Green Chemistry education in the Journal of Chemical Education until 2017, highlighting the obstacles and possibilities to this research field.

Resumo/Abstract

Acompanhar o desenvolvimento da QV em escala mundial e pensar seu ensino cumpre tarefa importante de auxílio à Química como ciência de suporte à sustentabilidade ambiental, algo que o Grupo de Investigação ao Ensino de Química (GIEQ/UFSC) tem se ocupado. O presente trabalho seleciona e discute trabalhos envolvendo o ensino da Química Verde no principal jornal internacional de educação química, o *Journal of Chemical Education* (JCEd) (Fig. 1), lidos na íntegra e analisados pela Análise de Conteúdo orientada por categorias *a priori*¹ e emergentes (Fig. 2). As análises evidenciaram propostas e experiências de ensino que: na maioria (159) se reportam atividades dirigidas ao laboratório de ensino (prevalência da orgânica) (120); se dirigem à graduação em química (178); são na forma de enxerto de conteúdos de QV em programa de conteúdo de disciplinas clássicas da química (25); usam práticas QV, mas não abordando o assunto em profundidade. Mesmo sendo o JCEd uma revista dirigida ao ensino da química, os trabalhos não fizeram uma descrição metodológica apurada das atividades de ensino, algo importante considerando a incipiência desse aspecto quando se pesquisa sobre QV. Nesta pesquisa, ainda em desenvolvimento, é possível identificar certa reprodução do ensino tradicional da Química; dificuldades de se evidenciar particularidades do ensino QV, de forma que vários autores apenas realçam (como exemplificações) as potencialidades da QV e de seu ensino na formação de sujeitos mais comprometidos com a sustentabilidade ambiental.

Figura 1: Critérios de seleção da amostra

Journal Chemical Education

- Período: até 2017
- Termo: "Green Chemistry" (título, resumo, palavras-chave)
- 207 artigos

Fonte: os autores.

Figura 2: Categorias *a priori* de análise.

Categorias de Análise

- Problema de origem
- Foco do artigo
- Disciplina/área de conhecimento
- Sujeitos do ensino
- Conteúdos QV
- Tipo de abordagem
- Finalidade da proposição

Fonte: adaptado de Marques e Machado.¹

Agradecimentos

Projeto CNPq Universal nr. 405034-2016-4 e a Capes e CNPq pelas bolsas de Doutorado e PD.

Referências

- 1 Marques; Machado, *Rev. Electrónica de Enseñanza de las Ciencias* Vol. 17(1), 19-43 (2018).

Área: CAT

(Inserir a sigla da seção científica para qual o resumo será submetido. Ex: ORG, BEA, CAT)

Nº de Inscrição: 00366

(Inserir o número de inscrição do autor que fez a submissão)

Gold supported on strontium surface-enriched CoFe_2O_4 nanoparticles: a strategy for the selective oxidation of benzyl alcohol

Laíse N. dos S. Pereira (PG),¹ Carlos E. S. Ribeiro (IC),¹ Aryane Tofanello (PQ),² Jean C. S. Costa (PQ),¹ Carla V. R de Moura (PQ),¹ Marco A. S. Garcia (PQ)¹, Edmilson M. de Moura (PQ).^{1*}

laysenayra@hotmail.com; mmoura@ufpi.edu.br

¹ Departamento de Química, Universidade Federal do Piauí, Teresina, PI 64049-550, Brazil

² Instituto de Física, Universidade Federal do ABC, Santo André, SP 09210-580, Brazil

Keywords: cobalt ferrite, strontium hydroxide, oxidation, enrichment, supported catalyst

Highlights

- Development of a support of CoFe_2O_4 nanoparticles enriched with $\text{Sr}(\text{OH})_2$, which enables the easy separation of the material from the reaction medium;
- The effective catalyst for the oxidation of benzyl alcohol with high activity and selectivity;
- The high stable catalyst for recycling experiments, without metal leaching.

Resumo/Abstract

The synthesis of efficient and reusable gold-based catalysts for the selective oxidation of alcohols is a strategy for the development of green processes.¹ Pre-formed nanoparticles syntheses are an easy way to produce controlled-nanosized gold materials; however, the selection of support is not trivial.² Herein, we proposed CoFe_2O_4 support enriched with $\text{Sr}(\text{OH})_2$, which holds remarkable properties and is suitable for the synthesis of a stable gold-based catalyst for the oxidation of benzyl alcohol is reported (Fig. 1 and Fig. 2). We suggested that the interaction between the CoFe_2O_4 and the $\text{Sr}(\text{OH})_2$ is highly important for the performance of the catalyst.

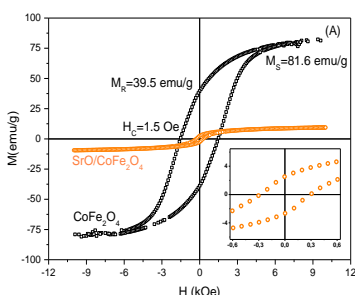


Fig. 1 Magnetization curves for CoFe_2O_4 and $\text{Sr}(\text{OH})_2/\text{CoFe}_2\text{O}_4$ NPs.

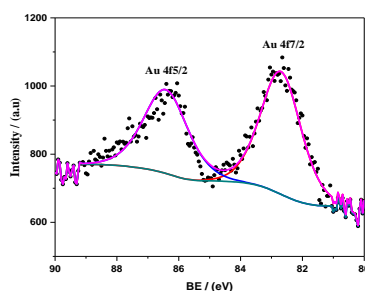


Fig. 2 XPS spectra of sample $\text{Au}/\text{Sr}(\text{OH})_2/\text{CoFe}_2\text{O}_4$.

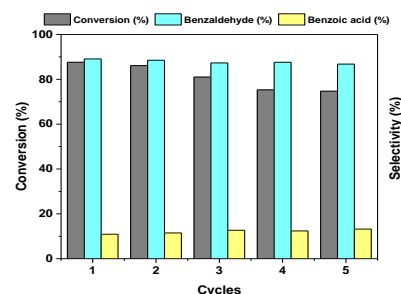


Fig. 3 Recycling tests for the $\text{Au}/\text{Sr}(\text{OH})_2/\text{CoFe}_2\text{O}_4$ catalyst.

Under the base-free condition of 2.5 h, 100 °C, and 2 bar of O_2 , the catalyst reached 58% of conversion with 76% of selectivity to benzaldehyde. With K_2CO_3 addition, the conversion increased to 90% and 88% of selectivity to benzaldehyde. No gold leaching was detected in 5 successive runs (Fig. 3), attesting the noticeable stability that the catalyst presents. This work provides great potential for the selective oxidation of alcohols with high activity since the magnetic properties of the catalyst provide an easy route and allows the separation of the medium reaction.

¹ *ChemCatChem*. 2017, 9, 1830.

² *Catalysts*. 2018, 8, 83.

Agradecimentos/Acknowledgments

We acknowledge CAPES, CNPq and FAPEPI for financial support.

Área: **EDU**

Nº de Inscrição: 07705

Realização e execução de um curso para conscientização da poluição atmosférica como prática de ensino de graduandos do PIBID

Maria Lucia T. G. Mendonça (FM)^{1*}, Rosana Petinatti da Cruz(FM)², Roberto Barbosa de Castilho (PQ)², Victor de Souza Marques (IC)², Luiza Duarte Rodrigues da Costa (IC)², Stefanie Figueira Melo Marinho (IC)², Milena Belloni Cavalcante da Silva (IC)², Isabella Oliveira da Silva (IC)², Thayssa Ramos Quintiliano Lima (IC)², Juliana Petinatti Sarmiento (IC)³.

maria.mendonca@ifrj.edu.br; maria.mendonca@ifrj.edu.br

¹IFRJ – Campus Maracanã; ²UFRRJ – CTUR; ³UERJ – Campus Maracanã

Palavras Chave: *Prática docente, Graduandos do PIBID, Licenciatura*

Highlights

Implementation and execution of a course to awareness of air pollution as a teaching practice for graduates of PIBID. The activity aims to give a positive contribution, for develop and teach a course.

Resumo/Abstract

O objetivo do trabalho foi de promover uma atividade docente para os graduandos do PIBID do curso de Licenciatura em Química da UFRRJ. A atividade foi a elaboração e a execução de um curso para conscientização sobre poluição atmosférica, sendo ministrado em um Colégio Técnico durante a Semana de Química. Ao término do curso, foram realizadas avaliações para os alunos do PIBID sobre sua prática docente, o que acarretou um enriquecimento muito grande para a formação destes futuros professores.

Introdução

Os cursos de Licenciatura, geralmente, contêm poucas atividades para que os graduandos possam exercer a prática docente, portanto, todo e qualquer evento em que possam praticar o ato docente, é de grande valia. O objetivo deste trabalho foi melhorar a prática docente dos alunos do curso de Licenciatura em Química da Universidade Federal Rural do Rio de Janeiro (UFRRJ), pertencentes ao Programa Institucional de Bolsas de Iniciação à Docência (PIBID). A metodologia empregada foi a elaboração e execução de um curso pelos graduandos do PIBID, que foi ministrado na Semana da Química do CTUR (Colégio Técnico da UFRRJ). Este curso teve o título: “Como ser o próximo mestre do ar: o CTUR/PIBID vão ensinar tudo o que você precisa”, cujo o intuito do curso foi de contribuir para formar de cidadãos críticos com relação à qualidade do ar, relacionando a poluição com as atividades econômicas e como estas podem impactar o cotidiano, principalmente, na saúde e no meio ambiente. Foram realizados também, três experimentos: um relacionado diretamente ao consumo do ozônio na estratosfera em contraste com seu papel como poluente secundário na troposfera, outro relacionado com o papel do CO₂ como gás estufa e sua solubilidade nos oceanos e o último experimento foi sobre chuva ácida e suas consequências. Ocorreram três avaliações sobre a prática docente: uma conduzida pelo professor, uma autoavaliação e cada graduando opinava pela a aula do outro.

Resultados e Discussão

A elaboração do curso resultou aos graduandos, a prática do planejamento, adequando o conteúdo a ser ministrado, com o tempo de aula, o nível e a forma como ser abordado. As aulas práticas, também fomentaram a criação de experimentos relacionados com o conteúdo a ser desenvolvido. A docência dessas aulas (teórica e prática) trouxe para os graduandos uma experiência e uma desmitificação para o ato docente, porque muitos, embora estejam cursando um curso de Licenciatura, sentem receio em dar aulas. E a avaliação das aulas ministradas pelos alunos, acarretou em um enriquecimento para os futuros professores.

Conclusão

Concluiu-se que o trabalho contribuiu para aumentar a prática de ensino de maneira significativa, tanto na elaboração, execução e avaliação do ato docente, contribuindo para a formação do professorado.

M Beltrame, A. C. F.; Stevanato, A.; Machado, T. A. M.; Proença, A. O.; Ferreira, F. C. Avaliando a importância do PIBID para estudantes de licenciatura em química da UTFPR-Campus Londrina. In: RASBQ, 39., 2016, Goiânia.

Área: INO

Nº de Inscrição: 00372

Estudo teórico das constantes de formação para cátions metálicos Zn⁺², Cd⁺², Hg⁺²

Emmanuel C.L.A. Dias (IC),^{1*} Victor Hugo M. da Silva (IC),² Glaucio B. Ferreira (PQ).¹

emmanuelanes@id.uff.br, glauciofb@gmail.com

¹Instituto de Química, Universidade Federal Fluminense, Outeiro de São João Batista s/n, 24020-141 Niterói, RJ, Brazil;

²Escola de Engenharia, Universidade Federal Fluminense, Rua Passos da Pátria 156, 24210-253, Niterói, RJ, Brazil,

Palavras Chave: Metais Pesados, Complexo, Afinidade, DFT, Solvente.

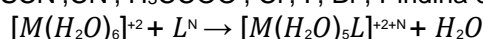
Highlights

Theoretical study of formation constant for the metal cations Zn⁺², Cd⁺² and Hg⁺². Heavy metals contamination demands the use of ligands for its clearance. The study of formation constant demonstrates the metal-ligand affinity. Theoretical calculation shows a good alignment with the experimental value of this parameter.

Resumo/Abstract

A contaminação ambiental por cátions metálicos devido a sua exploração, uso e descarte irresponsável, torna necessário a utilização de ligantes que auxiliem a separação e descontaminação^[1]. A constante de formação é um parâmetro essencial na escolha de um ligante para esta função. O estudo em questão tem como objetivo avaliar os melhores métodos para o cálculo das constantes de formação para os cátions Zn⁺², Cd⁺² e Hg⁺² com ligantes carregados e neutros, e a comparação com valores experimentais.

A otimização dos aquacomplexos desses cátions metálicos com amônia, tiocianato, cianeto, acetato, piridina, cloreto, iodeto e brometo foi realizado através do método DFT B3LYP/6-311+G(d,p) para átomos H, N, O, C, S, Cl e ECP-LANL2DZ para átomos de Cd, Hg, Br, I, Zn. Os dados termodinâmicos foram obtidos a partir do cálculo da frequência vibracional, para garantir o mínimo de energia potencial. Foram utilizados cálculos em fase gás (K_{1 Gás}) e com solvente implícito CPCM (K_{1 CPCM}). Outras técnicas descritas na literatura (K_{1 Ref}) foram aplicadas visando aprimorar os valores obtidos^[2], assim como o uso da segunda esfera de coordenação (K_{1 Seg.Esf.}). A variação da energia livre de Gibbs (ΔG^{298}) foi obtida através da reação abaixo, para M= Cd, Hg, Zn e L= SCN⁻, CN⁻, H₃CCOO⁻, Cl⁻, I⁻, Br⁻, Piridina e NH₃.



A constante de formação do complexo foi calculada a partir da seguinte equação:

$$\text{Log } K_f = \frac{-\Delta G^{298}}{2.303RT}$$

A avaliação dos métodos utilizados foi realizada por meio da comparação de valores teóricos e experimentais, como na Tabela 1 para a primeira constante de formação.

Tabela 1: Comparação das constantes de formação (K₁) teóricas e experimentais para o ligante amônia.

| NH ₃ | Log K ₁ Exp | Log K ₁ Gás | Log K ₁ Ref | Log K ₁ CPCM | Log K ₁ Seg. Esf. |
|------------------|------------------------|------------------------|------------------------|-------------------------|------------------------------|
| Zn ⁺² | 2.18 | 3.36 | 5.88 | 5.16 | 1.65 |
| Cd ⁺² | 2.65 | 5.92 | 5.25 | 6.65 | 1.98 |
| Hg ⁺² | 8.8 | 35.28 | 8.28 | 6.69 | 4.8 |

Os métodos empregados demonstraram boa aproximação dos valores experimentais, com exceção do cálculo na fase gás. Os dados também indicam melhorias para alguns casos na utilização da solvatação, tanto implícita quanto explicitamente. Este estudo permite entender os fatores relevantes que causam as variações entre os valores experimentais e teóricos, além de estabelecer o grau de influência de ligantes neutro e carregado que interagem com esta classe de íons metálicos de diferentes períodos. Também valores para K₂ estão sendo obtidos, agregando a influencia dos efeitos da disposição dos ligantes na esfera de coordenação.

Referência:

[1] Calzoni, G. L.; Antognoni, F.; Pari E.; Fonti P.; Gnes A. e Speranza, A. *Environ Pollut.* **2007**, 149, 239.

[2] Vukovic, S.; Hay, P. B. e Bryantsev, S. V. *Inorg. Chem.* **2015**, 54, 3995.

Agradecimentos/Acknowledgments

CNPq, FAPERJ, PROPPI-UFF

Área: MATNº de Inscrição: 00373

Synthesis, characterization and nanotoxicity of 3D-graphene nanofilters for endocrine disruptors removal from water.

Mayara B. Leão (PG),^{1*} Paulo C. C. da Rosa (PG),¹ Cristiane L. Dalla Corte (PQ),² José R. Bordin (PQ),³ and Carolina F. Matos (PQ).²

mayara_leao@live.com;

¹Campus Alegrete, Universidade Federal do Pampa - UNIPAMPA; ²Campus Caçapava do Sul, Universidade Federal do Pampa – UNIPAMPA; ³Instituto de Física e Matemática, Universidade Federal de Pelotas – UFPel.

Key words: Adsorption, Three-dimensional graphene, Nanotoxicity, Thermochemical Route, Endocrine Disruptors

Highlights

Nanofilters of three-dimensional graphene for adsorption of endocrine disruptors.
Green, easy and low cost synthesis of nanofilter by a thermochemical method.

Abstract

As a consequence of the uncontrolled population growth and the neglect of many industries, water quality is being threatened by different contaminants, demanding for the development of new materials capable of mitigating the pollutants effects on the environment. Through a simple, low cost and environmentally friendly method, this work aims to synthesize and characterize three-dimensional carbon-based nanostructured filters (3D-rGO) for endocrine disruptors (drugs and hormones) removal from water. 3D-rGO nanofilters were obtained from the reduction of graphene oxide (GO) under very specific conditions, and using a thermochemical route.¹ The effect of ascorbic acid and acetylsalicylic acid as reducing agents, for this kind of material, was evaluated. The samples were characterized by scanning electron microscopy (SEM), Raman and Infrared spectroscopies. We also evaluated some toxicological effects of the 3D-rGO exposure on *Drosophila melanogaster*. The reaction variations promoted significant morphological changes, SEM results showed that the higher the amount of reducing agent, the more compact the three-dimensional structure and the smaller the pores. In the lower content of reducing agent, the materials are very similar; however, in higher amounts of acetylsalicylic acid well-defined and homogeneous pores are formed. Spectroscopy data evidenced important structural changes according to the type and concentration of the reducing agent. Preliminary studies have indicated that the presence of structural defects and functional groups (remaining of the reduction) play a key role in the behavior of the different disruptors already tested (caffeine and paracetamol). In order to better understand this behavior, theoretical studies are being carried out. 3D-rGO in the tested form, did not present significant toxicity in *D. melanogaster* flies, indicating no immediate toxicological risk in a situation of possible environmental contamination. However, the accumulation of some graphene species observed in the eyes of flies may represent a path of long-term toxicity. In this way, more toxicological studies are being carried out.

References

¹ B. G. B. Lino, Bordin, J.R. and Matos, C.F., *New three-dimensional graphene nanofilters: synthesis, properties and application for heavy metal remove from mining effluents*. (2019). Submitted.

Área: MAT _____*(Inserir a sigla da seção científica para qual o resumo será submetido. Ex: ORG, BEA, CAT)***Nº de Inscrição: 374** _____*(Inserir o número de inscrição do autor que fez a submissão)*

Enhancing the Charge-Generation Performance of Polysilafluorene-Derivative Films by Introducing a Low-Cost Sensitizer

Luana C. W. de Menezes (PQ),^{1,3} Soheila Holakoei (PG),² Kaike R. M. Pacheco (PG),¹ Maiara de J. Bassi (PG),¹ Camilla K. B. Q. M. de Oliveira (PQ),¹ Rodrigo V. Queiroz (PQ),³ Diego Bagnis (PQ),³ Maria Luiza M. Rocco (PQ),^{2*} Lucimara S. Roman (PQ)¹

luiza@iq.ufrj.br

¹Department of Physics, UFPR; ²Institute of Chemistry, UFRJ; ³CSEM Brasil

Keywords: Organic solar cells, Two electron donors, Low-cost sensitizer, NEXAFS, Ultrafast charge transfer, Light stability

Highlights

- Study of the effect of a silafluorene derivative copolymer (PSiF-DBT) sensitized by a low-cost homopolymer from the PPV family (MDMO-PPV).
- MDMO-PPV sensitizer can increase the charge generation of OSC at different device's geometry.
- Application of synchrotron-based spectroscopic techniques.

Abstract

The strategy of using semiconductor materials with different properties as electron donor materials in organic solar cells (OSC) is used to improve absorption, stability or charge generation. In this work, it is investigated the effect of a silafluorene derivative copolymer, the poly[2,7-(9,9-dioctyl-dibenzosilole)-alt-4,7-bis(thiophene-2-yl)benzo-2,1,3-thiadiazole] (PSiF-DBT), sensitized by a low-cost homopolymer from PPV (polyparaphenylene vinylene) family, the poly[2-methoxy-5-(3',7'-dimethyloctyloxy)-1,4-phenylenevinylene] (MDMO-PPV). The interaction between the two donor (neat and in a blend) polymers films was evaluated by ultraviolet-visible, photoluminescence, X-ray photoabsorption (NEXAFS) spectroscopies, atomic force microscopy (AFM) and correlated to the observed in photovoltaic performance. We studied the mixture as active layer in two device's geometries - considering bi-layer devices with a fullerene derivative and inverted flexible devices blade coated in air conditions with a non-fullerene small molecule acceptor. Also, resonant Auger spectroscopy using the core-hole clock (CHC)

method [1] was employed in order to evaluate the ultrafast charge delocalization times of conjugated polymers in the low-femtosecond regime [2]. The results show that the homopolymer can improve the absorption spectra and the nonradiative-energy transfer from it to silafluorene derivative copolymer acts as a photosensitizer in the copolymer units. In addition, the blend film exhibits an organized morphology resulting in better absorption stability than the neat films when kept under continuous illumination.

References

¹D. Menzel, Ultrafast charge transfer at surfaces accessed by core electron spectroscopies. *Chemical Society Reviews*, v. 37, p. 2212-2223, 2008.

²Y. Garcia-Basabe, C. F. N. Marchiori, B. G. A. L. Borges, N. A. D. Yamamoto, A. G. Macedo, M. Koehler, L. S. Roman, M. L. M. Rocco, Electronic structure, molecular orientation, charge transfer dynamics and solar cells performance in donor/acceptor copolymers and fullerene: Experimental and theoretical approaches, *Journal of applied physics* 115, 134901 (2014).

Acknowledgments

This work was partially supported by LNLs, Brazil. Special thanks to CNPq and CAPES for financial support.

Área: MED

Nº de Inscrição: 00375

Inclusion of the electrolytic effect in predictive models of inhibitory activity

Sheisi F.L.S. Rocha (PG),¹ Carlos Mauricio R. Sant'Anna (PQ).¹

sheisi@msn.com

¹ Instituto de Química, UFRRJ.

Keywords: Docking, PM7, Guntelberg Equation, Shp2.

Highlights

Experimental values of activity of inhibitors of protein tyrosine phosphatase Shp2 were corrected by Guntelberg equation. Shp2 inhibitor activity prediction model was based on the thermodynamic cycle of the enzymatic inhibition process. Correction due to the electrolytic effect was shown to be relevant due to the presence of charged compounds within the chosen series. The constructed model could be validated satisfactorily with a second series of compounds.

Abstract

Shp2, together with Shp1, forms a small family of protein tyrosine phosphatases. Studies suggest that although inhibition of Shp2 is advantageous for the treatment of some types of cancer, inhibition of Shp1 may have the opposite effect because it acts as a tumor suppressor. In this way, we sought to develop an in silico methodology capable of identifying selective Shp2 inhibitors. A series of 52 indoline derivatives¹ (23 of which were charged) with available Shp2 inhibitory activity data was used as empirical basis for constructing a predictive model of inhibitory activity based in the thermodynamic cycle of the inhibition process. At the thermodynamic equilibrium of the enzyme-inhibitor complex dissociation reaction, the inhibition equilibrium constant is reached. It is a function of the effective concentrations, which in practice is obtained through spectrometric methods and is therefore a function of formal concentrations. The higher the concentration of ions in the reaction medium, the farther away the value of the inhibition constant obtained experimentally (K_i) from the real value (K_i^*). This occurs mainly for the charged inhibitors, since the effective concentration of these is more affected by the electrolytic effect of the medium. Thus, the ionic strength of the reaction medium of the enzymatic inhibition experiment performed with Shp2 was calculated (0.075 mol L^{-1}) and, using the Guntelberg equation, the activity coefficients of the species involved in the dissociation equilibrium of the enzyme-inhibitor complex were obtained. Although the K_i values of the inhibitors of the series used are not available in the literature, IC_{50} data are proportional to the values of K_i (Cheng-Prusoff equation). In this way, it was possible to correct the values of IC_{50} available for the series used, obtaining the values of pIC_{50}^* , which were used as a source of empirical data in the construction of the model. The 52 indoline derivatives were optimized with the PM3 method² of Spartan'14 (Wavefunction) and docked in Shp2 (PDB code 4RDD) with GOLD 5.6 (CCDC). The highest scoring complexes had their geometries refined using the PM7 method³ of Mopac 2016 (Stewart Comp. Chem.). By analyzing the thermodynamic cycle of the enzymatic inhibition process, some important terms were obtained, such as the solvation energy, the interaction enthalpy and the number of rotatable bonds that are frozen after the interaction of the ligand at the site. The prediction equation was calibrated with the experimental pIC_{50} values by multiple linear regression, but a low correlation was obtained ($R=0.41$). However, there was a significant improvement in correlation ($R=0.83$) when calibrating these terms with corrected activity data (pIC_{50}^*). This fact evidences the need to include the electrolytic effect in the correction of the experimental values of inhibitory activity in series containing charged compounds. The model constructed was satisfactorily validated ($R = 0.73$) with a second series containing 24 oxindole derivatives⁴, of which 21 compounds are charged.

Acknowledgments

CNPq, CAPES, INCT-Inofar, FAPERJ

¹ Wu, J. et al; patent (US20120034186 A1).

² Stewart. J. Comp. Chem.10,2,221,1989.

³ Stewart. J. Mol. Mod.19,1,1,2013.

⁴ Lawrence et al. J. Med. Chem. 51,16,4948, 2008.

Área: MAT

(Inserir a sigla da seção científica para qual o resumo será submetido. Ex: ORG, BEA, CAT)

Nº de Inscrição: 00377

(Inserir o número de inscrição do autor que fez a submissão)

Glycine as crosslinking bridge in the β -FeOOH/ZnO nanorods for water splitting catalyst under visible lights

Rafael M. de Almeida* (PG), Victória C. Ferrari (PG), Juliana S. Souza (PQ), Flavio L. Souza (PQ), Wendel A. Alves (PQ)

r.mascarenhas@ufabc.edu.br

Centro de Ciências Naturais e Humanas, Universidade Federal do ABC, 09210-580, Santo André, SP, Brazil.

Keywords: multihierarchical electrode, β -iron oxyhydroxide, ZnO nanorods, photoelectrocatalysts, water splitting.

Highlights

In this study, we show a facile strategy to significantly enhance the electrocatalytic activity and stability of crystalline β -FeOOH by using glycine coated on ZnO nanorods film as catalyst for solar water splitting.

Resumo/Abstract

Zinc oxide nanorods (ZnONRs) is a suitable catalyst for photoelectrochemical water splitting process, because of its 1D electronic properties and large surface morphology.¹ However, it only absorbs the UV region of the solar spectrum. On the other hand, β -iron oxyhydroxide (β -FeOOH) nanostructures exhibit high visible light absorptivity due to its small band gap energy (~ 2.7 eV), and it has shown photoelectrocatalytic activity.² In this work, we propose the synthesis and characterization of β -FeOOH/ZnONR multihierarchical electrodes functionalized with glycine for photoelectrochemical water splitting. Thus, a dispersed β -FeOOH solution (0.025 g/L) was prepared in the presence and absence of glycine (2 mmol L⁻¹), and it was used these respective solutions to surface modification of ZnONRs films by using spin-coating and an annealing process at 70°C for 24h. The sequential deposition was repeated with the same procedure under the same conditions outlined for the first deposition. The shape and size of the synthesized β -FeOOH and ZnONRs were detected by SEM as shown in Fig. 1(a). The ZnONR show that the rods have a hexagonal shape and their surface is very smooth, which is consistent with that described in the literature.¹ In addition, β -FeOOH nanoparticles have a sphere form with an average diameter around 20 nm, and are equally dispersed along the rods without forming agglomerates. After the optimization of coating parameters, it was established a homogeneous layer of ZnONR as a suitable platform for nanostructured β -FeOOH and functionalized glycine. Moreover, it was performed a study to optimize the number of β -FeOOH deposition for enhancing the multihierarchical electrodes photoactivity. Fig. 1(b) presents photocurrent density values at 1.23 V_{RHE}, which corresponds to the water oxidation potential. It was verified that the maximum photocurrent density was achieved at the electrode containing 6 depositions of β -FeOOH with glycine (0.85 mA/cm²). Although electrodes with more depositions (8 and 10) may absorb more light than the others, they had a reduced photoelectrochemical performance due electronic factors, such as electron-hole recombination and hole trapping sites. Fig. 1(c) describes the evolution of optimized β -FeOOH(glycine)/ZnONR electrode (green curve) under simulated solar illumination. The best produced electrode has increased 52 % the photocurrent density at 1.23 V_{RHE} in comparison to the electrode with 2 depositions of β -FeOOH. In this figure, it is clear that there is a synergy between the used materials to improve the photoelectrochemical response of the multihierarchical electrode.

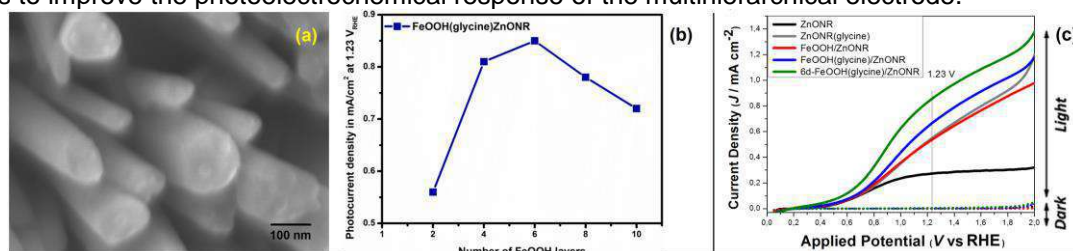


Fig. 1- Top-view SEM images of the β -FeOOH(glycine)/ZnONR (a), optimization curve of β -FeOOH(glycine)/ZnONR electrodes varying the number of β -FeOOH deposition (b), and photocurrent (J) vs. voltage (V_{RHE}) curves without and with sunlight irradiation for both modified FTO electrodes measured using a scan rate of 20 mV s⁻¹. Electrolyte: 0.5 mol L⁻¹ Na₂SO₄. The sunlight was simulated using a 150 W ozone-free xenon-lamp coupled with 1.5 Global filter and intensity adjusted at 100 mW.cm⁻² (c).

¹ J.S. Souza, W.M. Carvalho, F.L. Souza, C. Ponce-de-Leon, D.V. Bavykin, W.A. Alves, *J. Mater. Chem. A* **2016**, *4*, 944;

² A.M. Xavier, F.F. Ferreira, F.L. Souza, *RSC Adv.* **2014**, *4*, 17753.

Hydrochars from cigarette butts: From environmental pollutant to environmentally dye absorbent

Rogério S. Maniezzo (IC)^{1*}, Hugo H. Carline de Lima (PG)¹, Vicente L. Kupfer (PG)¹, Marcos R. Guilherme (PQ)², Murilo P. Moisés (PQ)³, Pedro A. Arroyo (PQ)⁴, Andrelson W. Rinaldi (PQ)¹.

rsmaniezzo@gmail.com; awrinaldi@uem.br

¹ Materials Chemistry and Sensors Laboratory - LMSen – State University of Maringá, Maringá-PR, 87020-900.

² UNICESUMAR – Maringá-PR, 87050-900.

³ Federal University of Technology of Paraná – UFTPR – Apucarana – PR, 86812-460.

⁴ Adsorption and Ion Exchange Laboratory - Lati – State University of Maringá, Maringá-PR, 87020-900.

Keywords: Carbon, Porous Materials, Adsorption Dye, HTC.

Highlights

HYDROCHAR FROM CIGARETTE BUTTS.
MODIFIED HYDROCHAR USED STRONG BASE.
ADSORPTION OF METHYLENE BLUE.
WASTE WAS USED TO PRODUCE HYDROCHAR.

Abstract

According to the Brazilian Yearbook of Tobacco¹, Brazil's cigarettes production in 2018 was approximately 42 trillion. Unfortunately, there is no clear policy regarding the disposal of cigarette butts, causing soil and water contamination².

The main of this study was to develop a modified hydrocarbon from cigarette butts.

Hydrothermal carbonization (HTC) with a temperature of 463 K for 48 and 72 h was used to obtain the hydrochar. It was applied to remove methylene blue dye of water. To maximize the amount of dye removed, the hydrocarbons were modified with NaOH, washed with water to pH 7.0 and dried in an oven. Modified hydrochar were named HCB48-ATV and HCB72-ATV.

After modified, modified hydrochars were characterized by N₂, MEV, FTIR-ATR, Raman spectroscopy, zero charge pH and Boehm titration. Parameters such as pH, time, concentration and temperatures were analyzed in the adsorption process.

Hydrochars presented a surface area of 2.30 m²g⁻¹ (HCH48-ATV) and 3.74 m²g⁻¹ (HCG72-ATV). Even with a low surface area, compared to other hydrochars, the adsorption capacity was high. The model that best describes the materials is Langmuir, where the values of the maximum adsorption capacity was 635.21 mgg⁻¹ and 532.94 mgg⁻¹ for HCB48-ATV and HCB72-ATV respectively. Due to the low specific area, the adsorption process is related to the interactions of the dye with the functional groups available in the modified hydrocarbons.

TABLE 1: Kinetic parameters of pseudo first and second order and Elovich for activated carbons.

| Parameters | Samples | |
|---|---|--|
| | HCB48-ATV | HCB72-ATV |
| Q _{t, exp} (mgg ⁻¹) | 474.77 | 476.23 |
| Pseudo-First Order | | |
| q _e (mgg ⁻¹) | 420.69 ± 26.63 | 429.46 ± 23.78 |
| k ₁ (min ⁻¹) | 0.033 ± 0.009 | 0.031 ± 0.006 |
| R ² | 0.8392 | 0.885 |
| Pseudo-Second Order | | |
| q _e (mgg ⁻¹) | 452.40 ± 20.35 | 464.47 ± 17.62 |
| k ₂ (mingmg ⁻¹) | 1.09E ⁻⁴ ± 2.86E ⁻⁵ | 8.23E ⁻⁵ ± 1.73 ⁻⁵ |
| R ² | 0.9361 | 0.9597 |
| Elovich | | |
| α (g mg ⁻¹ min ⁻²) | 17.85 ± 4.60 | 40.67 ± 10.2 |
| β (g mg ⁻¹ min ⁻¹) | 0.023 ± 0.002 | 0.027 ± 0.001 |
| R ² | 0.9681 | 0.9842 |

In general, the hydrocarbons produced from a cigarette butts and activated (HCB48-ATV and HCB72-ATV) were satisfactorily applied to the adsorption of MB in an aqueous medium.

¹ B. T. Yearbook, Anuário Brasileiro do Brazilian Tobacco Yearbook, (2018).

² M. B. D'Henri Teixeira, M. A. B. Duarte, L. R. Garcez, J. C. Rubim, T. H. Gatti, P. A. Z. Suarez. Waste Manag. 60 (2017) 140–150.

Synthesis of carbon nanomaterial for sulphide oxidation

Tatiana A. Ribeiro-Santos (PQ), Luisa E. Milagre (IC), Vitor F. Almeida (IC), Sara S. Vieira (PQ), Mateus C. M. Castro (PQ), Maria Helena Araujo (PQ), Ana Paula C. Teixeira (PQ).*

tatianarbenfica@gmail.com; anapaula.cta1@gmail.com

Departamento de Química, UFMG

Keywords: Nanotubes, Composite, Sulfide, Catalysis.

Highlights

Carbonaceous material functionalized with oxygenated groups were obtained by CVD process, over mesoporous silica, using ethanol as carbon source. The obtained material showed good activity as catalyst for sulphides oxidation.

Abstract

Carbon nanotubes have been investigated in a number of environmental applications. In this work, the synthesis of carbon nanomaterials functionalized with oxygenated groups was carried out by a CVD process at 650 °C, with iron-impregnated MCM-41/CTAB (10% by weight) as catalyst and ethanol as carbon source. The obtained material, M52E65, was characterized by different techniques. Thermal analysis, in air atmosphere, (**Fig.1a**) showed a mass loss 17% (which was obtain by CHN) between 396 – 652 °C, related to carbon oxidation.¹ In the Raman spectrum (**Fig.1b**) of the material the D (1350 cm⁻¹) and G (1580 – 1600 cm⁻¹) bands were observed, which may be related to disorganized and organized carbon, respectively.² The XPS spectrum of the sample showed carbon, oxygen and silicon signals, **Fig.1c**.

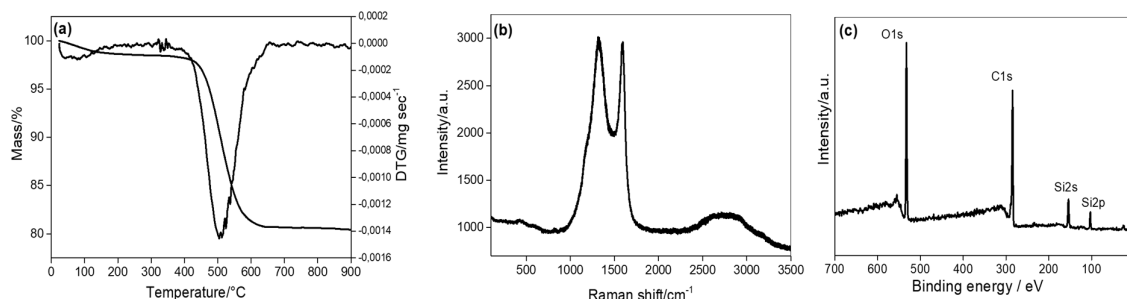


Fig.1: (a) TG and DTG, (b) Raman spectrum and (c) XPS spectrum of the material M52E65.

Sulphide oxidation was performed using 10 mg of M52E65 and 10 mL sulphide solution 8 g L⁻¹ and was monitored by the decrease of the band representing the disulphide ion, using UV-Vis spectroscopy (S₂²⁻, 229,5 nm). From the data obtained it was verified that the carbonaceous material is efficient for oxidation of sulfide in aqueous medium, with oxidation of approximately 75%.

References:

- Trigueiro, J.P.C., et al. *Journal of nanoscience and nanotechnology*, 2007. 7(10): p. 3477-3486.
- Malard, L.M., et al. *Physics Reports*, 2009. 473(5–6): p. 51-87.

Acknowledgments

CNPq, CAPES, FAPEMIG, INCT/MIDAS, Microscopy Center - UFMG.

Tridentate Schiff base derivated from diaminomaleonitrile and 3-hydroxy-salicylaldehyde and its Vanadium(V) complex: Synthesis and characterization

Thiago H. Döring (TM)*,¹ Lucas S. Mello (PG),² Edward R. Dockal (PQ),² José W. da Cruz Júnior (PQ)¹

thiago.doring@ufsc.br; lucasdossantosmello@hotmail.com; erdockal@gmail.com;
jose.w.cruz@ufsc.br.

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

²Universidade Federal de São Carlos (UFScar), Departamento de Química – São Carlos-SP

Palavras Chave: Schiff bases, Vanadium complexes, diaminomaleonitrile

Highlights

In this work, a tridentate Schiff base from diaminomaleonitrile and 3-hydroxy-salicylaldehyde and its respective Vanadium(V) complex were synthesized. The characterization was performed by melting point, conductivity measurements and UV-vis and FTIR spectroscopies. The ligand has its structure confirmed also by ¹H and ¹³C NMR.

Resumo/Abstract

Schiff bases are compounds having an imine group, R¹R²C=NR, which are formed by the condensation of a primary amine with a compound having a carbonyl group,¹ and the possible applications of the Schiff bases are pharmaceutical industry as antitumor, antibacterial, antifungal and antiviral agents among others.² Additionally, vanadium in its tri-, tetra-, and pentavalent oxidation states has the ability to interact with biomolecules, and offers interesting chemical and biochemical properties for the development of anti-parasitic drugs and anti-tumor properties in complexes.³ In this work, a tridentate Schiff base from diaminomaleonitrile and 3-hydroxy-salicylaldehyde and its respective Vanadium(V) complex were synthesized, following literature procedures⁴. The compounds were characterized by melting point, conductivity, UV/Vis and IR spectroscopies, and the ligand has its structure confirmed also by ¹H and ¹³C NMR (DMSO). The proposed structures for these are shown in Figure 1, and the general characterization data are shown in Table 1. The ¹H NMR showed signals between 6.72 ppm and 7.46 ppm attributed to the aromatic H, and signals in 7.83 ppm and 9.66 ppm attributed to the NH and OH groups, respectively. The ¹³C NMR showed signals in 103.38 ppm for the aliphatic sp² C, between 113.98 and 126,0 ppm for the aromatic C and in 145.67, 147.07, 153.77 ppm attributed to the nitrile groups, C-N and C-O, respectively. The conductivity measurement, in ethanol, showed the complex is non-electrolyte. The infrared spectra data are presented in Table 2. The electronic spectra presented bands of high molar absorptivity, attributed to the transitions π → π* (C=C; 270 nm) and medium absorptivity to π → π* (C=N; 354 nm) and n → π* (412 nm). It is possible to identify a band referring to the LMCT transitions observed in 550 nm for the complex.⁵ The characterization techniques point out the compounds obtained probably have the proposed structures.

| Band (cm ⁻¹) | Ligand | Complex |
|--------------------------|------------|-----------|
| νC=N | 1634 | 1612 |
| νC=O | 2217; 2234 | 2230L* |
| νV=O | - | 1004; 988 |

Table 2. Characteristic vibrations of the compounds.

* L = Large band

| Complex | MW (g mol ⁻¹) | Yield (%) | M.P (°C) | Conductivity in EtOH (μS cm ⁻¹) |
|---------|---------------------------|-----------|----------|---|
| Ligand | 228,21 | 78,02 | 235 | - |
| Complex | 310,14 | 40,02 | 190 | 1,96 |

Table 1. General characterization data of the compounds obtained.

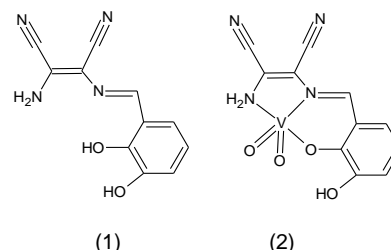


Figure 1. Representation of the proposed structures for the compounds obtained.

¹Cozzi, P. G. *Chem. Soc. Rev.*, **2004**, 33:410.

²Przybylski, P., et al. *Curr. Org. Chem.*, **2009**, 13: 124.

³Gambino, D. *Coord. Chem. Rev.*, **2011**, 255:2193.

⁴Maia, P. I. S. et al. *Polyhedron*, **2009**, 28: 398.

⁵Li, X. et al. *Inorg. Chem.*, **1988**, 25: 4657.

Área: TEC N° de Inscrição: 00383

Study of Sofosbuvir Patent Protection Process and its Commercialization in Brazil.

Bruno A. Cotrim (PQ),¹Raphaela A. Rafael (IC).^{2*}

bruno.cotrim@ifrj.edu.br; raphaela.azevedo@ymail.com

¹Instituto Federal de Educação Ciência e Tecnologia do Rio de Janeiro - Campus Rio de Janeiro; ²Instituto Federal de Educação Ciência e Tecnologia do Rio de Janeiro - Campus Nilópolis,

Palavras Chave: *Patent, Hepatitis C, Sofosbuvir, Organic Synthesis, Drug, Pharmaceutical Industry*

Highlights

Sofosbuvir for hepatitis C treatment. Sofosbuvir treatment has a high cost in Brazil. Patent application search for sofosbuvir synthetic routes. Sofosbuvir commercialization in Brazil.

Resumo/Abstract

Since the year 2011, new drugs such as sofosbuvir (Figure 1), daclastavir and boceprevir were approved for hepatitis C treatment. The use of these drugs led to success in 95% of the treated cases with less side effects compared to the drugs previously used in the therapy (ribavirin and interferon) (WHO, 2018). The high price charged by sofosbuvir in Brazil, however, decreases accessibility to it, since the full treatment, which takes three months, have already reached in recent past the cost of US \$ 84,000 in the country. The objective of this project was to search the patent applications for sofosbuvir, identify the synthetic routes presented in the applications and correlate it with the price and volume of the drug marketed in Brazil. Four different synthetic routes were found for the production of the active pharmaceutical ingredient. In addition, through this search, it were found which was considered the three main patent applications filed in Brazil related to the production of sofosbuvir. Government purchases made in 2017 and 2018 show that the price charged per pill was \$ 639.00. As a conclusion, it is believed that the price of the drug is not reflected by its mere cost of production and, not taking the cost of R & D to its development, which is difficult to measure, the price of the drug is very high. It is believed that public policies in favor of bargaining to lower drug prices are necessary.

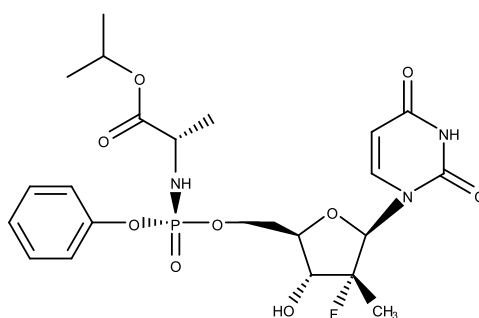


Figure 1 – Sofosbuvir Structure

WHO; **Hepatitis C, Fact Sheet**, 2018. Available on <<https://www.who.int/news-room/fact-sheets/detail/hepatitis-c>> . Accessed in Jan 21, 2019, 17:20:00.

Agradecimentos/Acknowledgments

The authors thank to IFRJ and CNPq.

Quality Control of Functional Food Prepared with Quercetin

Halliny S. Ruela (PQ)*, Erika B. Fonseca (PQ), Joel F. Bueno (PQ), Andréa B. da Silva (TM), Norma S. da Rocha (TM), Zoraia S. Ramos (TM), Carolina D. M. de Figueiredo (TM).

*halliny@marinha.mil.br

Departamento de Pesquisa em Ciências Farmacêuticas, Laboratório Farmacêutico da Marinha (LFM)

Palavras Chave: Quercetin, Functional Food, Flavonoid, Quality Control.

Highlights

A cereal bar was developed and analyzed for humidity, quercetin content and microbiological contamination. It's complies with the legislation, having potential for registration as a functional food.

Abstract

Military troops are often involved in high-intensity physical activity operations and physical and psychological stress situations, which can lead of injuries and chronic fatigue. The same can be considered for high performance athletes. In this sense, the specific foods consumption for recovery of military or athletes during or after strenuous events can be fundamental promoting their functions performance.⁽¹⁾

This work aims to evaluate the quality of a functional food, prepared with quercetin, that can be used in these groups diet. Initially, a cereal bar formulation containing 500 mg of quercetin was developed. It was analyzed for humidity, quercetin content and microbiological contamination. Humidity analysis was performed using the Brazilian Pharmacopoeia method, using the Karl Fischer equipment. For both the raw material and the bars, the results are in accordance with ANVISA specification⁽²⁾, which recommends that food humidity should not exceed 15%, presenting the values of 1.5% and 8.9%, respectively. Regarding the quercetin content (Figure 1), ANVISA⁽³⁾ determines a 20% variation of the label value. The analysis was performed by High Performance Liquid Chromatography (HPLC) with ultraviolet (UV) detection, as described in the American Pharmacopoeia. A content of 101.4% was observed for the raw material and 98.8% for nutritional bars, using quercetin USP standard. Regarding microbiological contamination, there was no evidence of *Bacillus cereus*, *Escherichia coli* and *Salmonella* sp.⁽⁴⁾

In conclusion, the analyzed formulation complies with the legislation, having potential for registration as a functional food.

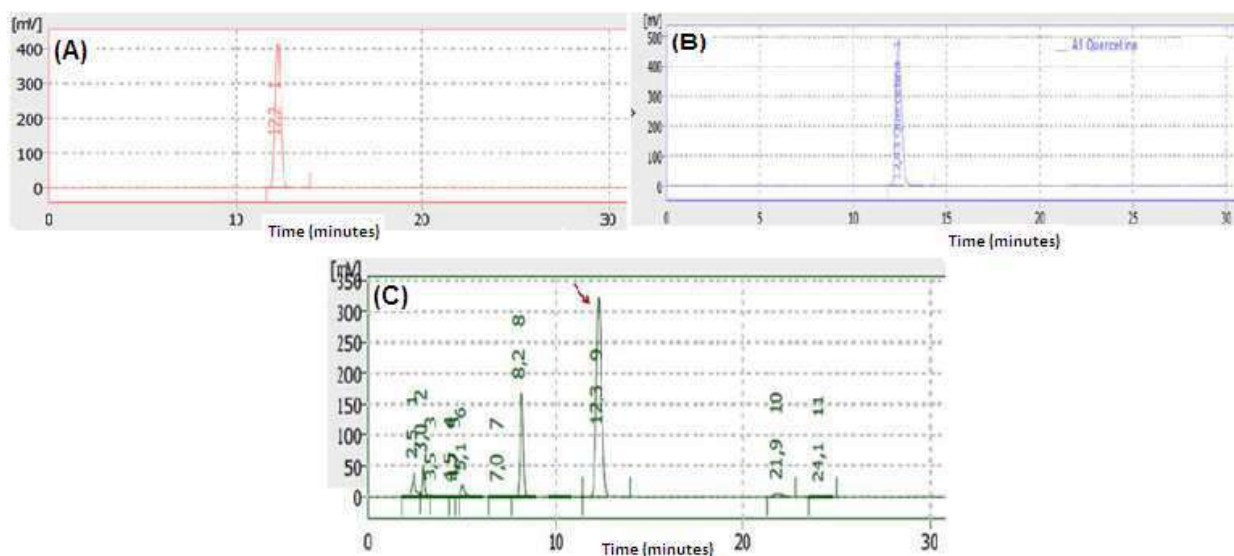


Figure 1: Chromatograms obtained for the HPLC-UV analysis of quercetin USP standard (A), quercetin raw material (B) and nutritional bar (C).

References: ⁽¹⁾Perez *et al.*, Pharmacological Research, 89:11–18, 2014; ⁽²⁾Brasil. ANVISA. Agência de Vigilância Sanitária. Resolução da Diretoria Colegiada (RDC) nº 263/2005; ⁽³⁾RDC nº 360/2003; ⁽⁴⁾RDC nº 12/2001.

Study of Blue CVS dye electrochemical reduction by using Molecular Modeling

Júlia P. Copola (IC),¹ Mariane M. de Souza (IC),¹ Patrícia A. Carneiro (PQ),¹ Julliane Yoneda (PQ).^{1*}
juliacopola@id.uff.br; jullianeyoneda@id.uff.br

¹ Departamento de Química, Instituto de Ciências Exatas, Universidade Federal Fluminense.

Keywords: Blue CVS Dye, Molecular Modeling, Infrared, NMR Chemical Shifts, Electrochemical Degradation.

Highlights

Applying Molecular Modeling to study the electrochemical degradation in acidic medium of Blue CVS dye.

Resumo/Abstract

The process of tissue production is carried out recklessly causing significant environmental impacts, such as contamination of the soil and effluents by the dumping of residue in the dyeing process. This residue is composed of several toxic and harmful chemicals, among them dyes, which are extremely difficult to be removed from the contaminated environment. It is estimated that 15% of all dye production is lost and released into the environment during its synthesis, processing and applications. Of these 15%, about 10 to 20% correspond to the incomplete fixation of the dyes during all the process of tissue fibers dyeing.^{1,2} Disperse dye Dispersol Black CVS is a textile dye that has three components identified as Orange CVS, Violet CVS and Blue CVS whose structures are represented in Figure 1.

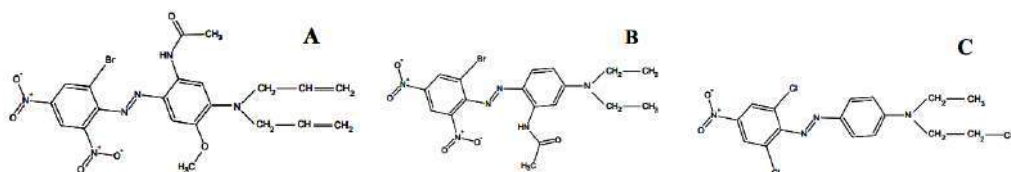


Figure 1. Molecular structures of the disperse dye Dispersol Black CVS's components: (A) Blue CVS, (B) Violet CVS and (C) Orange CVS.¹

This work aims to analyze the Blue component (A, Figure 1) of disperse dye Dispersol Black CVS, proposing possible products of its electrochemical reduction in acidic medium by using Molecular Modeling. Analyzing the Electrostatic Potential Map and the Map of the Lowest Unoccupied Molecular Orbital for the Blue CVS dye, it was possible to propose six probable products (D-I), represented in Figure 2. Infrared spectra and ¹H and ¹³C Nuclear Magnetic Resonance chemical shifts were obtained for each one of the products proposed by using Molecular Modeling. These results should be useful when performing the electrochemical degradation experimentally. They will not only facilitate the signaling of the experimental spectra, but also confirm the structures of the products obtained. Besides, they may be useful to lead to a mechanism for the reaction.

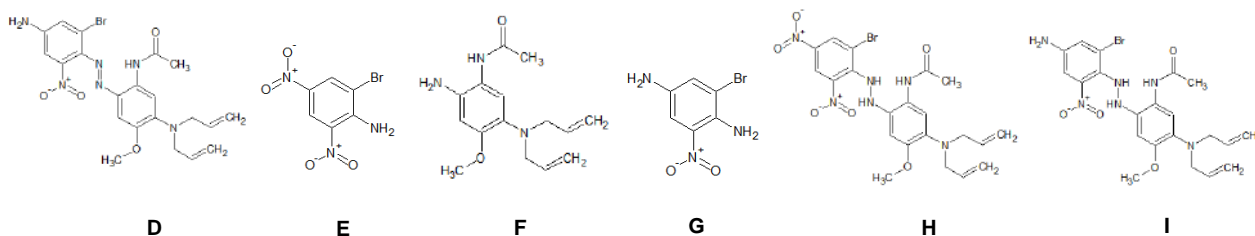


Figure 2. Probable products structures (D - I) of the electrochemical reduction of Blue CVS dye in acidic medium.

Acknowledgement: FAPERJ

¹ CARNEIRO, P. A. Determinação Cromatográfica e Degradação Fotoeletrocatalítica do Corante Disperso Dispersol Black CVS, Tese de Doutorado, UNESP, 2007.

² ZANONI, M.V.B., YAMANKA, H. Corantes: Caracterização química, toxicológica, métodos de detecção e tratamento. 1. ed. São Paulo: Cultura Acadêmica, 2016.

Metabolic profiling of indole monoterpene alkaloids from *Tabernaemontana catharinensis* (A. DC) Latex by GC-MS.

Bruna Higashi (PG),¹ José E. Gonçalves (PQ),² Regina A. C. Gonçalves (PQ),^{1,3} Arildo J. B. Oliveira (PQ).^{1,3*}

ajboliveira@uem.br

¹Programa de Pós-Graduação em Ciências Farmacêuticas, Universidade Estadual de Maringá (UEM), Maringá-PR;

²Programa de Mestrado em Tecnologias Limpas, Instituto Cesumar de Ciências, Tecnologia e Inovação, Maringá-PR;

³Departamento de Farmácia, UEM, Maringá; Departamento de Farmácia, UEM, Maringá-PR.

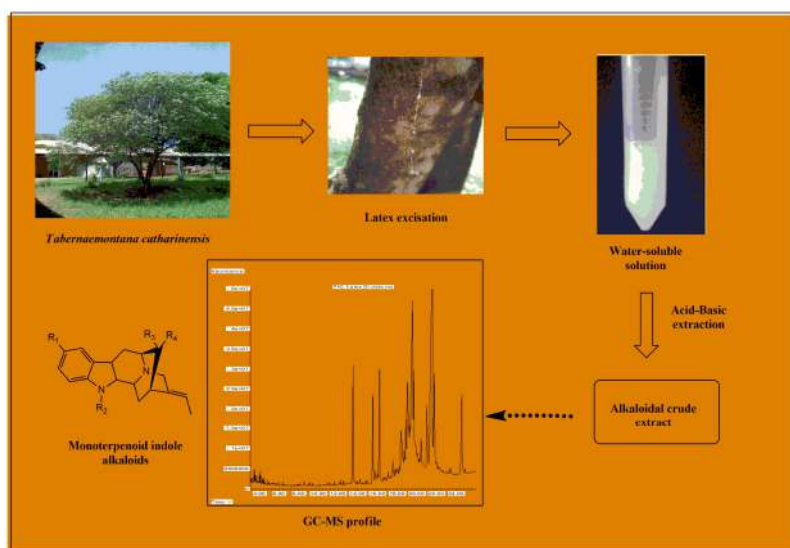
Highlights

- We obtained the alkaloidal fraction from *Tabernaemontana catharinensis* latex.
- The alkaloidal fraction obtained from *T. catharinensis* latex was analyzed by GC MS.
- Alkaloids are of the class of monoterpenoid indole alkaloids (MIAs).
- Antimalarial and antileishmanial MIAs were identified in the alkaloidal fraction.

Resumo/Abstract

Latex from *Tabernaemontana catharinensis* are known by to synthesize bioactive compounds, named monoterpene indole alkaloids (MIAs), which have several biological activities as shown cholinesterase inhibitors, analgesic, anti-inflammatory, bactericidal, antileishmanial, antitumoral, oestrogenic, and stimulant and depressant of the central nervous system. The objective this work was to perform the metabolite profiling of alkaloidal extracts from *T. catharinensis* latex. The alkaloidal fraction obtained from *T. catharinensis* latex was analyzed by Gas Chromatography coupled to Mass Spectrometry (GC-MS) and off-line ESI-MS-TOF. In this study the *T. catharinensis* latex was obtained after cutting the stem and allowing it to flow into tap water that it was submitted to acid-basic procedure for total MIAs extraction, that after were analyzed by GC-MS (Figure 1). The total MIAs extract was directly subjected to GC-MS without any derivatization step and which allowed the detection and identification of seven known and seven unknown MIAs. The described method resulted in effective integration of both GC-EI-MS and LC-ESI-TOF-MS strategies, which permitted the identification of known bioactive MIAs, as well as the structural elucidation of new MIAs with potential biological activities.

Figure 1. Scheme of extraction and analysis from alkaloidal fraction of latex from *T. catharinensis*.



Agradecimentos/Acknowledgments

The authors thank the research development agencies CNPQ, CAPES, *Fundação Araucária* de Apoio ao Desenvolvimento Científico e Tecnológico do Estado do Paraná and Research Support Center Complex, COMCAP) of the State University of Maringá.

Área: INO

Nº de Inscrição: 00390

Synthesis of Cu(II) and Zn(II) complexes containing bipyridine and coumarin ligands as potential cytotoxic agents

Lucas Costa de Melo (IC)¹, Patrícia S. V. B. de Almeida (PG)¹, Felipe V. Ribeiro (PG)¹, Arthur E. Kümmerle (PQ)¹, Guilherme P. Guedes (PQ)², Amanda P. Neves (PQ)¹.

¹ Departamento de Química, Universidade Federal Rural do Rio de Janeiro, Seropédica, Brazil

² Departamento de Química Inorgânica, Universidade Federal Fluminense, Niterói, Brazil

macarra.pbi15@gmail.com

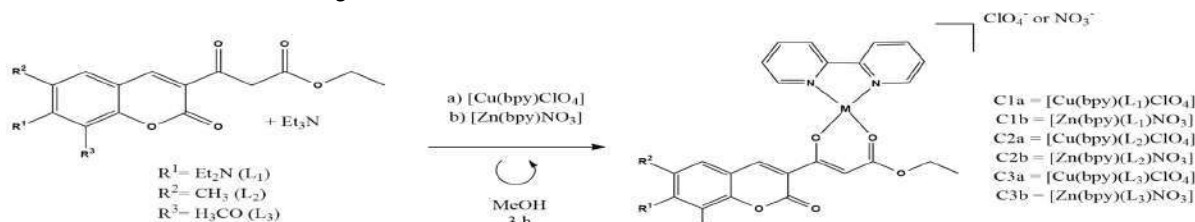
Keywords: Cu(II) complexes, Zn(II) complexes, bipyridine, coumarin- β -ketoester.

Highlights

This work describes the synthesis and characterization of new Cu(II) and Zn(II) complexes of the type [Cu(bpy)(L1-3)]ClO₄, **C(1-3)a** and [Zn(bpy)(L1-3)]NO₃, **C(1-3)b**.

Resumo/Abstract

Coumarin derivatives are widely used in medicinal chemistry and present significant biological activities, including anticancer¹. Metallic complexes are also explored for medicinal purposes². For this reason, we designed a novel series of Cu(II) and Zn(II) complexes containing coumarin- β -ketoester hybrids (L1-3), which were obtained according to the scheme 1.



Scheme 1: Synthesis of the Cu(II) and Zn(II) complexes

Crystals for X-ray diffraction were obtained by crystallization of C1a and C1b in a chloroform/acetonitrile mixture. The crystalline structures and cell parameters are shown in Figure 1.

| | C1a | C1b |
|--------------|--|--|
| Space Group | 2 ₁ /c | p1 |
| Cell Lengths | a 8.3203(2)(Å) b 22.6044(7)(Å) c 14.9447(5)(Å) | a 8.8792(4)(Å) b 11.0013(3)(Å) c 15.5718(2)(Å) |
| Cell Angles | α 90° β 92.545° (1) γ 90° | α 109.279°(3) β 99.165°(3) γ 101.538°(2) |
| Cell Volume | 2.087.96 (Å ³) | 1.364.39 (Å ³) |

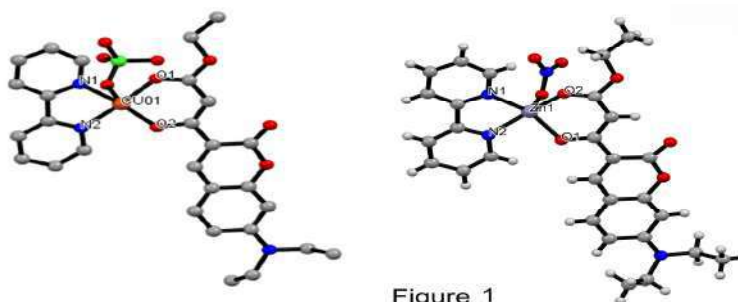


Figure 1

The metal atoms exhibit a distorted square pyramidal geometry, coordinated by the oxygens of the β -ketoester portion and the bipyridine ligand completing the coordination sphere. A counterion (ClO₄ and NO₃) neutralizes the charge of the complex. Characterization by IR, UV-Vis and conductivity are underway for all complexes and the ¹H NMR have been recorded for the Zn(II) complexes. The cytotoxic activities of the complexes will be investigated further.

Agradecimentos/Acknowledgments

CAPES, CNPq, Faperj, LDRX-UFF, PPGQ-UFRRJ.

¹S.EMAMI, S. DADASHPOUR. **Current developments of coumarin-based anti-cancer agents in medicinal chemistry**. European Journal of Medicinal Chemistry, 2018,102, 611-630.

²U. Ndagi, N. Mhlongo M. Soliman. **Metal complexes in cancer therapy - An update from drug design perspective..** Drug Design, Development and Therapy, 2017, 11, 599-616.

42ª Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química: Eixos Mobilizadores em Química

Selective extraction of Cr(III) using *Luffa cylindrica* fibers magnetically impregnated

Deborah C. Bagano Gonçalves (IC)¹, Carolina A. de S. Silva (PG)¹, Vanessa N. Alves (PQ)¹.
deborahbagano21@hotmail.com; vanessanalves@gmail.com

¹Unidade Acadêmica Especial de Química, UFG-Regional Catalão, Catalão/GO, Brasil.

Palavras Chave: *Bucha vegetal magnética, cromo, extração.*

Highlights

With the pH control a methodology the magnetic solid phase extraction was developed. *Luffa cylindrica* fibers magnetically impregnated was used for selective extraction of Cr(III) in aqueous samples.

Resumo/Abstract

Alimentos em geral podem ser contaminados por íons metálicos de diversas maneiras, seja através da própria matéria-prima, durante o processo de produção, acondicionamento ou transporte. Dentre os íons metálicos mais preocupantes, destaca-se o íon cromo, que pode ser encontrado em dois estados de oxidação (Cr^{3+} e Cr^{6+}), que se diferenciam por sua toxicidade. Diante disso, fica clara a necessidade do desenvolvimento de metodologias que consigam determinar esses íons mesmo em baixas concentrações, além da necessidade de diferenciar estas espécies nas amostras analisadas. A extração em fase sólida vem sendo muito utilizada para a determinação de íons metálicos. A alta disponibilidade de adsorventes, aliada ao baixo custo tornam essa técnica extremamente eficiente. Materiais naturais podem ser utilizados como adsorventes e podem ter sua superfície modificada a partir de diversas reações, dentre elas a derivação magnética, que confere ao adsorvente certo magnetismo, facilitando o processo de separação. Neste caso, a técnica de extração pode ser chamada de extração em fase sólida magnética (MSPE). Assim, esse trabalho tem por objetivo avaliar o uso da *Luffa cylindrica* (bucha vegetal) magneticamente impregnada, na extração seletiva de íons Cr(III) em meio aquoso. Inicialmente, foi realizada a impregnação do fluido ferromagnético, previamente sintetizado¹, na bucha vegetal e feita a caracterização do material obtido por Espectroscopia no infravermelho (IV) e análise do ponto de carga zero (PCZ). A análise de IV não apontou diferenças significativas na composição do material após a impregnação magnética, havendo apenas o surgimento de uma pequena banda em 480 cm^{-1} característica da ligação Fe-O. A análise do PCZ, aponta que o material adsorvente possui carga superficial nula na faixa de pH entre 6 e 8, adsorvendo preferencialmente cátions em valores maiores que estes, e ânions em valores inferiores. O comportamento adsorptivo do material sintetizado, frente às espécies inorgânicas de cromo foi avaliado variando-se o pH do meio. Para isso, foram preparadas soluções contendo separadamente os íons Cr(III) e Cr(VI) na concentração de 1 mg L^{-1} em valores de pH de 1 a 11. Nesse ensaio, 10 mL de cada uma das soluções, foram colocadas separadamente em agitação do tipo vórtex durante 5 minutos com 50 mg da bucha magneticamente impregnada. Em seguida um campo magnético externo (ímã) foi aplicado, promovendo a separação magnética. O sobrenadante foi analisado por espectroscopia de absorção atômica com atomização por chama (FAAS), a fim de determinar a quantidade de cada íon retida no adsorvente. Observa-se que a espécie trivalente é exclusivamente adsorvida em pH 5, enquanto a espécie hexavalente é pouco adsorvida em valores de pH ácidos. Com base nesse resultado a adsorção do íon Cr(III) foi otimizada pelo método univariado. Foram avaliados os parâmetros massa e tempo de agitação, tendo sido obtidas as melhores porcentagens de adsorção utilizando 25 mg do adsorvente e tempo de agitação de 10 minutos. Por conseguinte, foram realizados os ensaios para a dessorção do íon metálico. Um planejamento fatorial 2^3 foi utilizado, sendo avaliadas as variáveis tipo do eluente (HNO_3 e HCl), concentração ($0,1$ e 1 mol L^{-1}) e tempo da eluição (1 e 10 minutos), com volume do eluente em 2,5 mL. Observa-se que as melhores condições foram obtidas utilizando o HCl em sua menor concentração e tempo; $0,1\text{ mol L}^{-1}$ e 1 minuto. Constata-se então, que a bucha vegetal magneticamente impregnada possui capacidade adsorptiva para a extração seletiva da espécie trivalente do cromo, a partir da avaliação e otimização dos parâmetros que podem interferir na extração.

¹Marinovich M., Boraso M.S., Testai E., Galli C.L., Regulatory Toxicology and Pharmacology, 69, 2014, 416.

Agradecimentos/Acknowledgments

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

Uso do quantum dots CuInS_2 funcionalizado com glutationa para determinar curcumina no açafrão-da-índia

Nattany T. G. de Paula (PG),¹ Arthur L. S. de Araújo (IC),² Denilson V. Freitas (PG),¹ Richardson R. da Silva (PG),¹ Marcelo Navarro (PQ)¹, André F. Lavorante (PQ),² Ana P. S. Paim (PQ).^{1*}
*anaspaim@ufpe.br

¹Departamento de Química Fundamental, UFPE; ²Departamento de Química UFRPE

Palavras Chave: Quantum dots, Curcumina, Açafrão-da-Índia, Fluorescência.

Highlights

Use of CuInS_2 quantum dots functionalized with glutathione to determine curcumin in Indian saffron
Determination of curcumin by the quenching effect of quantum dot fluorescence
The electrochemical synthesis of the CuInS_2 quantum dots is a cleaner method
 CuInS_2 as a useful fluorescent analytical probe
The methodology is linear from 1.0 to 10.0 mg L^{-1} curcumin, $R = 0.9958$

Resumo/Abstract

O principal constituinte do açafrão, a curcumina [1,7-bis(4-hidroxi-3-metoxifenil)-1,6-heptadieno-3,5-diona], é um dos polifenóis mais populares provenientes do rizoma da erva *Curcuma longa* Linn (TYPEK et al., 2019). A curcumina tem se destacado devido às suas diversas atividades biológicas: antioxidante, antifúngica, anti-inflamatória, antiviral, anti-Alzheimer, Leishmanicida e outras (KUNATI et al., 2018). Neste trabalho, um procedimento analítico é proposto para a determinação de curcumina no açafrão-da-Índia baseado na supressão da fluorescência do quantum dot (QD) ternário, CuInS_2 . As nanopartículas foram sintetizadas pela metodologia eletroquímica, em meio aquoso e estabilizadas com glutationa, apresentando emissão em $\lambda_{\text{máx}} = 545 \text{ nm}$ e excitação em $\lambda_{\text{ex}} = 300 \text{ nm}$, Fig. 1. Após otimizar o procedimento proposto, a supressão da fluorescência foi observada em pH 11 (solução tampão $\text{NH}_2\text{CH}_2\text{COOH}/\text{NaCl}/\text{NaOH}$, $0,25 \text{ mol.L}^{-1}$). Foram utilizados $100 \mu\text{L}$ de QDs, $250 \mu\text{L}$ de solução tampão, volumes variados de solução padrão de curcumina 100 mg.L^{-1} e água para completar o volume para $1000 \mu\text{L}$. A resposta linear foi obtida para uma faixa de concentração entre $1,0$ e 10 mg.L^{-1} de curcumina ($F/F_0 = (0,0396 \pm 0,0018) * [C] + (0,9684 \pm 0,0110)$, $R = 0,9958$) (Fig. 2) à temperatura ambiente. Estudos complementares de adição, recuperação e repetitividade estão sendo realizados, posteriormente, amostras de açafrão-da-Índia serão analisadas e a exatidão do método será avaliada.

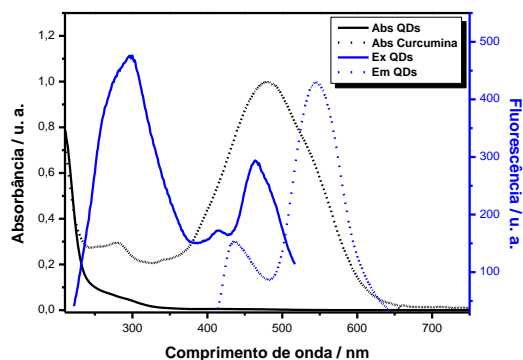


Fig. 1. Fluorescência e absorvância dos QDs de CuInS_2 e absorvância da curcumina.

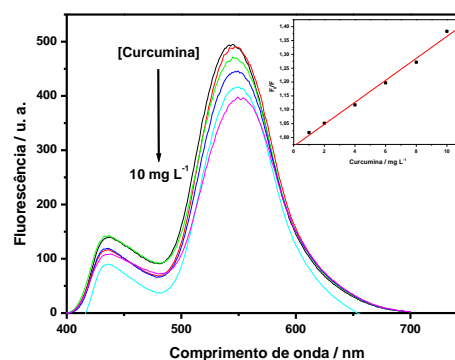


Fig. 2. Espectros de emissão obtidos para diferentes concentrações da curcumina.

KUNATI, S. R. et al. An LC-MS/MS method for simultaneous determination of curcumin, curcumin glucuronide and curcumin sulfate in a phase II clinical trial. **Journal of Pharmaceutical and Biomedical Analysis**, v. 156, p. 189–198, 2018.

TYPEK, R. et al. Formation of aqueous and alcoholic adducts of curcumin during its extraction. **Food Chemistry**, v. 276, p. 101–109, 2019.

Agradecimentos/Acknowledgments

À FACEPE (APQ-0557-1.06/15) e ao INCTAA pelo suporte financeiro, ao CNPq (Procs. 303352/2015-9 e 401541/2016-9) e CAPES pelas bolsas.

Evaluation of residual frying oil oxidation collected by Verde Vida Institute - Vila Velha-ES

Ícaro Marques Vasconcelos (IC),¹ Graziely Vieira Casagrande (IC),¹ Nalia Bozi (IC),¹ Raquel Augusta B. Vindilino (IC),¹ Christiane F. de C. Porto (TC),¹ Ana Brígida Soares (PQ),¹ Mauro Cesar Dias (PQ)^{1*}.

maurocesar@ifes.edu.br;

¹Coordenação do Técnico em Química e Coordenação de Licenciatura em Química, Instituto Federal do Espírito Santo, campus Vila Velha - ES

Keywords: RFO, Infrared, selective collection, recycle

Highlights

Soybean oil is the main reference to quantify the generation of residual frying oil (RFO) to be the largest edible oil consumption in Brazil. Verde Vida Institute (VVI) is the only non-governmental organization that selectively collects RFO in Vila Velha-ES. RFO quality monitoring is important for drafting future selective collection legislation, recycling and public awareness for the frying process in food preparation.

Resumo/Abstract

In this study RFO samples collected between January and May/2018 in Vila Velha-ES by VVI were evaluated. In general the results of Acidity Index (AI), Saponification Index (SI), Iodine Index (II) (Table 1) and Kreis test suggest significant changes in the RFO in relation to the reference values (RV) for virgin soybean oil (VO). The oxidation degree of RFO2 sample was verified by the low value of II and confirmed by the intensity decrease of the ν_{C-H} band at 3006 cm^{-1} (Fig 1A), of the cis-double bond ($=CH$) vibration stretch ($3006\text{-}3009\text{ cm}^{-1}$), in relation to the non-oxidized VO (Fig 1B). All analyzed RFO sample IR spectra showed this change (Fig 1A).

Table 1: Average parameters data media of analyzed RFO samples.

| Sample | IS/mg KOH g ⁻¹ | IA / % | II/g I ₂ 100 g ⁻¹ | Ip/meq O ₂ Kg ⁻¹ | PF/°C |
|-----------------|---------------------------|-------------|---|--|-------|
| RFO1 (Jan/2018) | 211.4 ± 2.1 | 1.19 ± 0.04 | 136 ± 4 | 2.3 ± 0.1 | 237.5 |
| RFO2 (May/2018) | 215.9 ± 2.2 | 0.58 ± 0.04 | 110 ± 8 | 2.2 ± 0.1 | 242.5 |
| RV- VO | 189 - 195 | 1 | 124 - 139 | 2.5 | 210 |

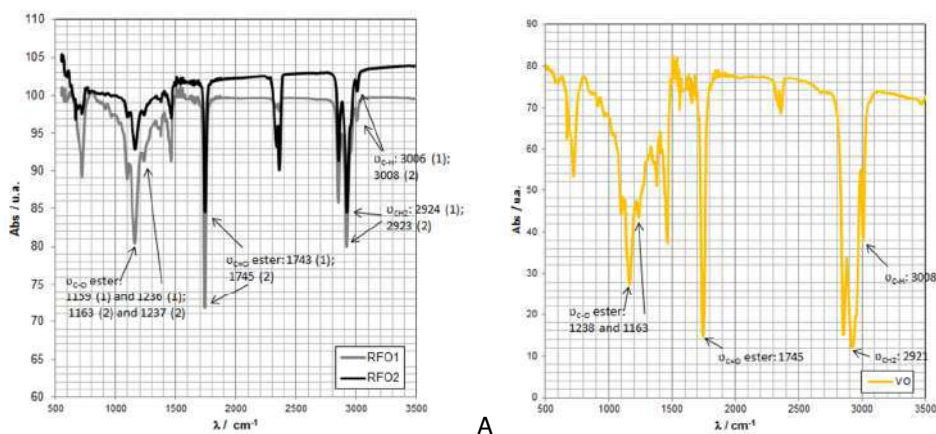


Figure 1: A - RFO samples IR spectra collected between Jan and May/2018. B – Virgin soybean oil (VO).

References:

- ANVISA, Farmacopeia Brasileira, volume 1. 5ª Ed. Brasília, 2010.
 N. Vlachos et al. *Anal. Chim Acta* **2006**, 573-574, 459-465.
 Q. Zhang et al *Food Chemistry* **2012**, 132, 1607-1613.

Green Biosynthesis of Gold Nanoparticles using *Sargassum cymosum*: Effect of Temperature and Antimicrobial Activity

Lucas Henrique da Costa (IC),^{1*} Johann Victor Hemmer (IC),¹ Otto M. S. Gerlach (IC),¹ Alexandre Bella Cruz (PQ),² Anelise Ehrhardt (PQ),¹ Márcio da Silva Tamanaha (PQ),¹ Gizelle I. Almerindo (PQ).¹

gizelle.almerindo@univali.br; lucas.hrqc@gmail.com

¹Cursos de Engenharia Química e Oceanografia - Escola do Mar, Ciência e Tecnologia, UNIVALI; ² Escola de Ciências da Saúde, UNIVALI.

Palavras Chave: Algae, Green Synthesis, *Staphylococcus aureus*, Nanomaterial.

Highlights

The synthesis variables of metal nanoparticles using algae has been little explored. A simple, and eco-friendly green method was introduced to synthesize gold nanoparticles successfully.

Abstract

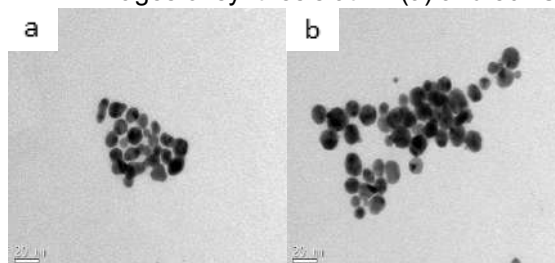
The utilization of toxic chemical compounds commonly used in the syntheses of metallic nanoparticles limits its application in studies aimed at biocompatibility.¹ In this sense, there is a necessity of developing alternate methods, for which nanobiotechnology presents a prominent role.¹ A comparison between different reaction temperatures or a relation with antimicrobial activity are not common in publications that use seaweed extracts for the synthesis of gold metallic nanoparticles (NPs-Au).² Therefore, the present work shows the effect of different reaction temperatures (21 and 80 °C) on the synthesis of NPs-Au with an aqueous extract of *Sargassum cymosum* seaweed, an abundant natural resource on the Brazilian coast. One gram of the seaweed was added on 100 mL of deionized water (agitation, 20 min, 60 °C). Then, the mixture as vacuum filtered. Table 1 presents the variables used for the synthesis.

Table 1. NPs-Au synthesis variables.

| T (°C) | Precursor (mL) | Extract (mL) | C _{HAuCl₄} (mg/L) | C _{Extract} (mg/L) | t (min) | pH | rpm |
|--------|----------------|--------------|---------------------------------------|-----------------------------|---------|-----|-----|
| 21 | 9.5 | 1.0 | 47.0 | 952.38 | 30 | 2–3 | 500 |
| 80 | 9.5 | 1.0 | 47.0 | 952.38 | 30 | 2–3 | 500 |

The formations of NPs-Au were determined by UV-visible spectrophotometry and TEM. There is a predominance of spherical nanoparticles of 10 to 35 nm in diameter (Figure 1). The increase in temperature from 21 to 80 °C provided a much faster stabilization/reduction, in addition to a greater polydispersity. The antimicrobial activity of NPs-Au was evaluated by dilution in broth in an attempt to determine the minimum inhibitory concentration (MIC) against *Staphylococcus aureus* (ATCC 25923). However, no activity was detected until the maximum theoretical concentration of 30.74 µg_{Au}/mL.

Figure 1. TEM images of synthesis at 21 (a) and 80 °C (b).



¹ RAJESHKUMAR, S.; MALARKODI, C.; GNANAJOBITHA, G.; PAULKUMAR, K.; VA- NAJA, M.; KANNAN, C.; ANNADURAI, G. *Journal of Nanostructure in Chemistry*, v. 3, n. 1, p. 44, 2013.

² AHMAD, B.; HAFEEZ, N.; BASHIR, S.; RAUF, A.; REHMAN, M. *Ur. Biomedicine and Pharmacotherapy*, v. 89, p. 414–425, 2017.

Acknowledgments

The authors gratefully acknowledge UNIVALI for financial support. Research supported by LCME-UFSC.

Área: MED

(Inserir a sigla da seção científica para qual o resumo será submetido. Ex: ORG, BEA, CAT)

Nº de Inscrição: 00397

(Inserir o número de inscrição do autor que fez a submissão)

Identificação de Hits a partir da Quimioteca do LASSBio®.**Mylena de Jesus Dutra (IC),¹ Lucas Silva Franco (PG),¹ Rodolfo do Couto Maia (PQ),¹ Júlia Galvez Bulhões Pedreira (PG),^{1*} Eliezer J. Barreiro (PQ).¹****jugalvez@gmail.com**¹Laboratório de Avaliação e Síntese de Substâncias Bioativas (LASSBio®).

Palavras Chave: Reposicionamento, Quimioteca, Química Medicinal.

Highlights

Identification of Hits from the LASSBio® Chemical Library. Chemical Libraries are the last iteration of the Drug Discovery paradigm. The LASSBio® Chemical Library presents an interesting feature because several of its compounds have shown some kind of *in vivo* activity, therefore, suggesting an adequate PK/PD profile. This makes the LASSBio® Chemical Library a great source for the identification of ligands for novel therapeutic uses and the network of collaborations with national pharmaceutical companies and academic research groups reflects that.

Resumo

O processo de descoberta de fármacos é complexo, apresentando várias etapas com demandas tecnológicas/científicas diversas e, portanto, exige multi- e interdisciplinaridade para ser executado com sucesso. Não é segredo que a iteração contemporânea do paradigma do processo de descoberta de fármacos baseia-se na exploração de grandes coleções de compostos, denominadas Quimiotecas, com o objetivo de identificar ligantes promissores que sejam adequados para otimização do seu perfil PK/PD, no processo conhecido como otimização *Hit-to-Lead*, visando descobrir um candidato a fármaco como sua meta final. Neste contexto, a Quimioteca do LASSBio® (<http://www.lassbio.icb.ufrj.br/quimioteca.html>), uma coleção de mais de 2000 compostos, exclusivamente planejados, ao longo dos últimos 25 anos de expertise e excelência em planejamento de fármacos, com a atividade farmacológica e o perfil farmacocinético adequado como principal prioridade. A grande maioria dos compostos apresentaram algum nível de atividade *in vivo*, indicando possuírem um adequado perfil farmacocinético. Outro fator que corrobora um bom perfil de biodisponibilidade oral dos compostos da Quimioteca são os parâmetros relacionados com as regras de Lipinski (Adv Drug Deliv Rev. **1997**; 23, 3) e Veber (J Med Chem. **2002**; 45, 2615). 85% dos compostos da Quimioteca respeitam todas as regras de Lipinski (Fig. 1), enquanto 95% respeitam as regras de Veber.

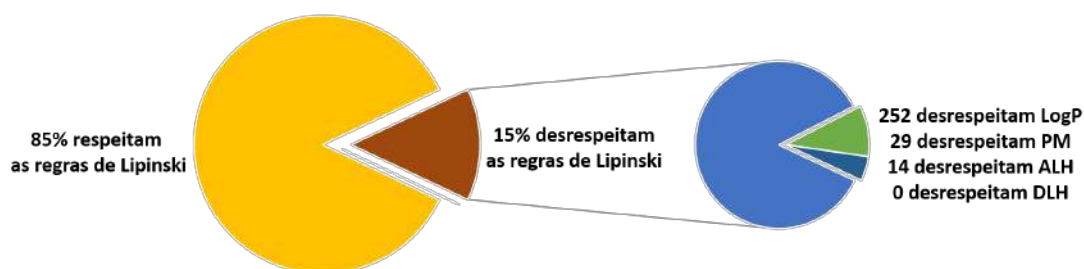


Fig. 1. Perfil de adesão dos compostos da Quimioteca frente às regras de Lipinski. PM: peso molecular; ALH:ceptor de ligação de hidrogênio; DLH: doador de ligação de hidrogênio.

A identificação de *Hits* promissores através da Quimioteca do LASSBio® tem sido executada no contexto de uma ampla diversidade de projetos por meio de colaborações tanto no âmbito acadêmico quanto com parceiros da iniciativa privada nacional do ramo farmacêutico. Neste contexto, este trabalho tem como objetivos a reposição e ampliação da Quimioteca do LASSBio®, via síntese orgânica, visando a identificação de *Hits* com potenciais novas aplicações terapêuticas, a partir do uso de diversas estratégias de modificação molecular da Química Medicinal.

Agradecimentos

Agradecemos ao LASSBio®, ao INCT-INOFAR (Processo #465.249/2014-0), a CAPES e ao CNPq pela infraestrutura e auxílio financeiro para a realização deste trabalho.

Área: COL

Nº de Inscrição: 00398

Balance between CTAB-dye and CTAB-polymer interactions determining partition behavior of anionic dye in aqueous two-phase systems

Wellington J. Reis (IC), Jussara A. Penido (PG), Gabriel M.D. Ferreira (PQ), Aparecida B. Mageste (PQ)*
wellington.reis@aluno.ufop.edu.br; *aparecida.mageste@ufop.edu.br

Laboratório de Físico-Química e Química Ambiental, Departamento de Química, ICEB, UFOP, Minas Gerais, Brazil

Keywords: *poly(ethylene oxide), poly(propylene oxide), CTAB, interaction*

Highlights

- CTAB aggregation and CTAB-anionic dye interaction were studied in high concentrations of polymers;
- The balance between CTAB-dye and CTAB-polymer interactions was influenced by the polymer nature and influenced the dye partition in aqueous two-phase systems.

Abstract

Partition studies of several solutes in aqueous two-phase systems (ATPS) has been extensively studied in order to understand the distribution behavior of them between the two phases of the ATPS and contribute with the development of extraction/separation methods of strategic analytes. Recently, we have evaluated the ability of the cetyl trimethylammonium bromide (CTAB) to promote the change of the partition behavior of anionic dyes in ATPSs formed by polymer and electrolyte, aiming upgrade the methods of separation using ATPSs. In these studies, we have noted that the influence of the surfactant on the partition behavior of the dye is directly dependent on the polymer forming the ATPS (Figure 1), making fundamental the understanding of the complex balance of interactions that govern the distribution of the anionic dye in the ATPS. As can be seen in Figure 1, the presence of CTAB in systems formed by poly(oxide ethylene) (PEO) change the partition behavior of the dye, a change which is not observed when the polymer forming the ATPS is the poly(oxide propylene) (PPO). Since the effect of CTAB on the dye partition in systems formed by PEO has been attributed to the formation of CTAB-dye aggregates that are more stable at the ATPS bottom phase, we have evaluated the CTAB-dye and CTAB-polymer interactions in systems formed by surfactant/polymer/dye and surfactant/polymer in order to understand those distinct results. The CTAB-dye interaction was confirmed by UV-vis spectroscopy in water and in the presence of low concentrations of the polymers and the stoichiometry of the CTAB-dye complex was 1:1 from the Job's method. Conductivity curves of CTAB (Figure 2) were similar in water and in the presence of PEO 20 % (w/w), with or without dye, indicating that CTAB micelles were also formed in the presence of the PEO, although at a higher critical micellar concentration (cmc). In addition, the ionization degree of the aggregate increased in the presence of the dye due to the presence of dye molecules in the micelle that decreased the electrostatic repulsion among the head groups of the surfactant, releasing bromide anions to the bulk. In the presence of PPO, cmc values, obtained from fluorescence with pyrene, were equal to 2.41 and 451 mmol L⁻¹ at 15.8 and 63.7 % (w/w) PPO, respectively, indicating that this polymer stabilized CTAB monomers, avoiding its interaction with dye molecules. This probably occurred because CTAB monomers interacted with PPO chain, and this interaction was more favorable than the CTAB-dye interaction in ATPS, making the partition behavior of the dye the same in the presence and absence of CTAB.

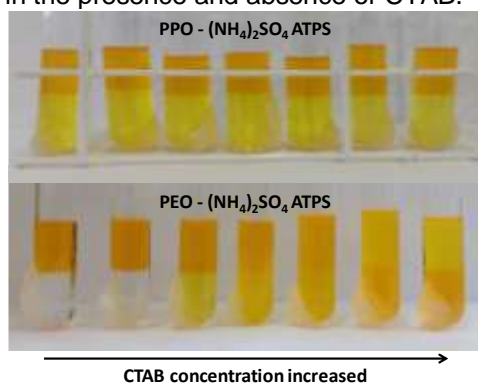


Figure 1. Effect of CTAB on the partition of an anionic dyes in ATPSs formed by different polymers.

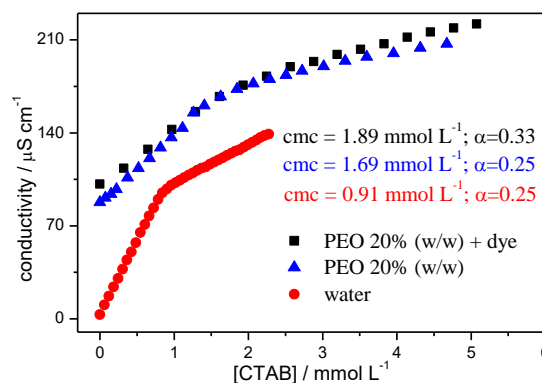


Figure 2. Conductivity curves of CTAB in different solvents.

Acknowledgments

PROGRAD, UFOP, DEQUI, CAPES, FAPEMIG, CNPq

42ª Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química: Eixos Mobilizadores em Química

Área: ANA

Nº de Inscrição: 00497

Feasibility of microwave-induced combustion and inductively plasma mass spectrometry for bromine and iodine determination in human nail

Diogo L. R. Novo (PG),^{1*} Alessandra S. Henn (PG),² Filipe S. Rondan (PG),¹ Fernanda P. Balbinot (PG),¹ Emily F. Rodrigues (IC),¹ Marcia F. Mesko (PQ).^{1*}

diogo.la.rosa@hotmail.com; marciamesko@yahoo.com.br

¹ Centro de Ciências Químicas, Farmacêuticas e de Alimentos, Universidade Federal de Pelotas, 96160-000 Capão do Leão, RS, Brazil; ² Departamento de Química, Universidade Federal de Santa Maria, 97105-900, Santa Maria, RS, Brazil.

Palavras Chave: Biological samples, Biological analysis, Sample preparation, Halogens determination, Ultra-trace concentration, Routine analysis.

Highlights

A method based on combustion reaction was developed for human nail digestion allowing the bromine and iodine determination by ICP-MS free of interferences. It can be used to obtain accurate results in a variety of fields

Abstract

Nowadays, there is an increasing interest in the determination of bromine and iodine in biological samples, since they play important physiological functions and, in inappropriate concentration they can cause several adverse effects. Bromine acts as a sedative-hypnotic and it has important functions in the formation of collagen IV and in the activation of α -amylase in saliva. Iodine is primarily involved in the synthesis of thyroid hormones. However, depending on the concentration, both elements can be associated with several adverse effects. In this sense, bromine is associated with hematologic and thyroid diseases, growth retardation and insomnia, while iodine is associated with dysfunction and pathologies in the human organism related to the thyroid gland. Among the biological samples, human nail can be highlighted when compared to blood and urine for biological monitoring of these elements, especially in view of the simplicity of sampling and handling, as well as ease of storage and transport. However, the challenge begins with the choice of the analytical method to be used because only few techniques allow the determination of Br and I in biological samples at trace levels. In addition, there are few studies that report the determination of Br and I in human nails with suitable precision and accuracy. Recently our research group proposes methods for the determination of Br and I in human hair and human saliva. We are now evaluating a new analytical tool for the determination of Br and I in human nail. The proposed method consists in the digestion of human nail (50 to 200 mg), in a powder form, using microwave-induced combustion (MIC), and the determination of Br and I was performed using inductively coupled mass spectrometry (ICP-MS). Human nail is digested based on combustion reaction and 50 mmol L⁻¹ NH₄OH was used for analytes absorption. The digests obtained were fully compatible with ICP-MS analysis and an additional dilution step was not necessary. Recovery tests at two levels (50% and 100%) using a standard solution or mixtures of the sample with certified reference materials (CRMs) were carried out, and suitable recoveries ranging from 95% to 102% for both analytes were obtained. It is important to mention that the recovery tests using CRM were performed by mixing the sample with 150 mg of CRM 2704 (buffalo river sediment) or 200 mg of CRM 8433 (corn bran) with 100 mg of hair sample (both mixed in powder form with a spatula prior the sample preparation). It allows to obtain lower limits of quantification for Br and I (Br: 0.06 $\mu\text{g g}^{-1}$ and I: 0.03 $\mu\text{g g}^{-1}$) when compared to the others published methods. Thus, ultra-trace concentration of Br and I can be determined in human nail, demonstrating that the proposed method is a suitable strategy for this purpose. It presents important characteristics for routine analysis, such as suitable selectivity, sensitivity and high sample throughput, low waste generation, among others. The proposed analytical method will be applied to the analysis of human nails collected from different volunteers. Thus, the results obtained using the proposed method may assist different research fields to better understand several diseases, which involve variations in Br and I concentration in human organism, such as hyperthyroidism and hypothyroidism.

Acknowledgments

The authors are grateful to CNPq – Brazil (grant numbers 409357/2016- 2 and 496 309424/2016-0), CAPES – Brazil (finance code 001), and FAPERGS – Brazil (grant 497 number 16/2551-0000561-8) for supporting this study.

DMSO-based ruthenium complexes with aniline as further ancillary ligand: Synthesis, characterization and catalytic activity for olefin metathesis

Daniele M. Martins (PG),^{1*} **Benedito S. Lima-Neto** (PQ).¹

martins.mdq@usp.br; benedito@iqsc.usp.br

¹Instituto de Química de São Carlos – Universidade de São Paulo – São Carlos, SP.

Palavras Chave: Aniline, Dimethyl sulfoxide, Ruthenium, Ancillary ligand, ROMP

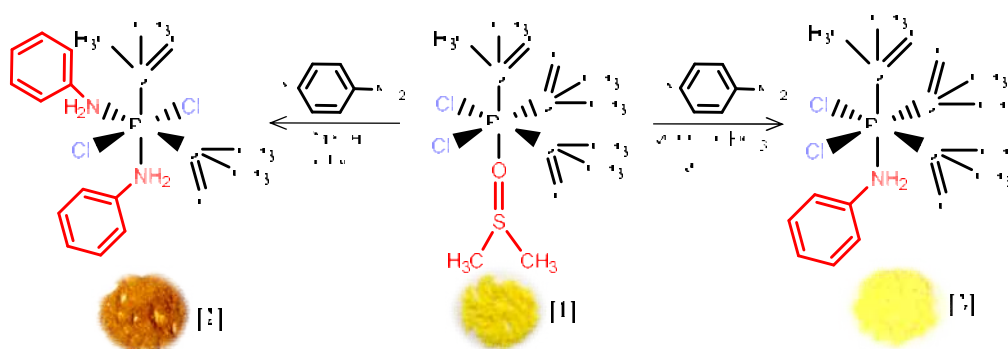
Highlights

- Simple changes in synthesis procedures with aniline produced new Ru-dmsO complexes.
- Electronic and steric effects from aniline combined with dmsO changed the Ru activity for ROMP.

Abstract

Reactions of *cis, fac*-[RuCl₂(dmsO-O)(dmsO-S)₃] (**1**) with aniline (NH₂Ph) produced the new complexes *trans, cis*-[RuCl₂(dmsO-S)₂(NH₂Ph)₂] (**2**) and *cis, fac*-[RuCl₂(dmsO-S)₃(NH₂Ph)] (**3**), under reflux or at room temperature, respectively (dmsO is dimethyl sulfoxide bounded by O or S atom; Figure 1). The complexes were characterized by CHN-elemental analysis and spectroscopic techniques (infrared; UV-vis spectrophotometry; ¹H and ¹³C NMR). The influence of NH₂Ph in dmsO-type complexes was then evaluated for ring-opening metathesis polymerization (ROMP) in presence of ethyldiazoacetate with different [monomer]/[Ru] molar ratios. Yields for ROMP of norbornene (NBE) were 20-30% higher than with **1**, with molecular weights in the order of magnitude of 10⁵ g.mol⁻¹ (~ 80% for 5000 [NBE]/[Ru] molar ratio; 25 °C; 5-30 min). ROMP of norbornadiene (NBD) or dicyclopentadiene (DCPD) also resulted in higher yields with **2** or **3** (~ 40% at 50 °C for 30 min; 8% with **1**); polymers were insoluble in CHCl₃. ROMP of NBE in presence of NBD or DCPD produced copolymers with high amount of co-monomers at 50 °C for 30 min (~ 35% yield with 80% of co-monomer; 15% with **1**). It is concluded as successful the presence of aniline in the Ru-dmsO type complexes, driving the induction period in different steps than the pure halo-dmsO complex. The geometric arrangement of aniline and dmsO in the complexes affected the Ru activity for ROMP because the resulting electronic and steric effects.

Figure 1. Synthesis routes of Ru-dmsO complexes with aniline ligand.



Acknowledgments

FAPESP, CAPES and CNPq.

Synthesis, Thermal and Spectroscopic Studies of Fe(II) and Ni(II) Complexes

Geórgia A. C. Zangaro (PG),^{1*} Ana C. S. Carvalho (PG),² Bruno Ekawa (PG),² André L. C. S. do Nascimento (PG),¹ Wilhan D. G. Nunes (FM),² Richard P. Fernandes (PG),¹ Massao Ionashiro (PQ),¹ Flávio J. Caires (PQ).^{1,2}

georgia.zangaro@unesp.br

¹Departamento de Química Analítica, IQ/UNESP–Ar; ²Departamento de Química, Faculdade de Ciências/UNESP

Palavras Chave: NSAID, Complexes, Precipitation, Thermal Analysis, Spectroscopy

Highlights

Synthesis of Lornoxicam metal complexes.
Effective, cheap and fast synthesis method.
Thermal and spectroscopic studies of Lornoxicam compounds.

Abstract

Human health is the target of several studies related to the search for new treatments and medicines for various diseases. Several studies show that non-steroidal anti-inflammatory (NSAIDs) act as chelating agents and may enhance their biologic activities when they form complexes with metal ions¹. Lornoxicam (HLor) is a NSAID and has antipyretic and analgesic properties, being widely used in cases of fever, pain and inflammation². In this work, precipitation methodology was used to synthesize transition metal complexes with HLor as a ligand. Thermal studies and characterization were performed by TGA-DSC, TGA-FTIR and FTIR. The complexes were represented by M(Lor)₂·nH₂O, where M represents the transition metals Fe(II) and Ni(II) and n = 4.0. TGA-DSC curves and TGA-FTIR showed that anhydrous compounds, under oxidizing conditions, presented mass losses in three steps and released, in general, CO₂, CO, SO₂, COS and HCN. In addition, FTIR analysis indicated that carbonyl and pyridyl groups of Lor are involved in coordinating of transition metals. Thus, the results obtained showed that the synthesis method was effective. However, future studies are needed to verify the thermal decomposition mechanism and the study of biological activity.

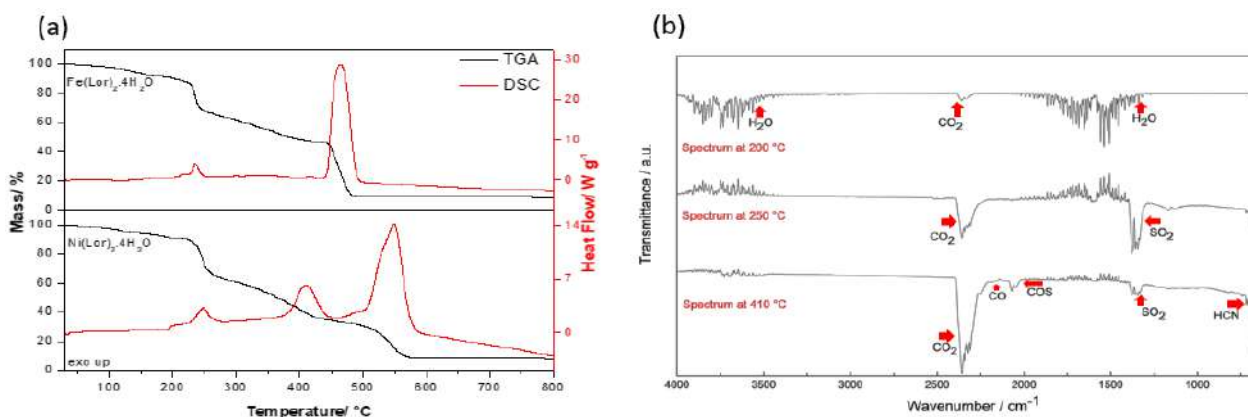


Figure 1. a) TGA-DSC curves of Fe(II) and Ni(II) compounds b) TGA-FTIR spectra for the identified evolved gas products of Ni(II) compound in air atmosphere.

References: ¹C.N. Banti, S.K. et al. Eur. J. Inorg. Chem. 2016 (2016) 3048. ²M. Suhasini, E. et al. J. Mol. Struct. 1100 (2015) 116.

Acknowledgments

The authors thanks FAPESP (proc. 2018/24378-6, 2018/12463-9 and 2017/14936-9), CNPq (proc. 421469/2016-1) and CAPES foundations (Brazil) for financial support.

42ª Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química: Eixos Mobilizadores da Química

Área: ORG

Nº de Inscrição: 00402

Luehea candicans increase in vitro cell cancer metabolism even with high polyphenols content

Fernando J.C. Carneiro (PQ)¹; Marcos B. P. Camara (PG)*¹, Ana C. S. Rabelo (PG)², Rodrigo da S. N. Barreto (PQ)², Maria A. Miglino (PQ)², Antonio J. C. Filho (PQ)¹, Jessica Borghesi (IC)², Fernanda Bessa (IC)²

fernandocarneiro@ifma.com.br; quimarcosbispo@hotmail.com.

¹Department of Chemistry, Federal Institute of Education, Science and Technology of Maranhão, Campus São Luís-Monte Castelo, Maranhão, 65030-005, Brazil; ²Laboratory of Stem Cell, Department of Anatomy of Domestic and Wild Animals, Faculty of Veterinary Medicine and Animal Science, University of São Paulo (USP), São Paulo, 05508 270, Brazil.

Palavras Chave; antitumor effect, breast cancer, Chemical characterization, mass spectrometry, osteosarcoma tumor.

Highlights

The aim of this investigation was characterize by mass spectrometry – FIA-ESI-IT-MS) and evaluate the antitumor potential of crude hydroethanolic extract from the bare stem parts of *Luehea candicans*.

Resumo/Abstract

Brazil is the country with the greatest biodiversity, however, most of the plants are used empirically, without scientific evidence. *Luehea candicans*, popularly called as “açoita-cavalo”, is a specie characteristic of the Brazilian Cerrado Biome, used for fight hemorrhages, dysenteries, diarrhea, rheumatism and tumors. On the other hands, there are practically no studies about chemical composition and assess of their biological effects. For the characterization, the crude extract was submitted to qualitative (phytochemical screening and analysis by direct flow injection by mass spectrometry – FIA-ESI-IT-MS) (Figure 01) and quantitative tests (determination of phenolic compounds and determination of total flavonoids and anthocyanins). In order to study the antitumor potential, MTT technique was used to evaluate the cellular metabolism of canine breast cancer tumor cells (TCM) and osteosarcoma (OST). The results demonstrated the presence of polyphenols, mainly flavonoids and tannins. In addition, were observed an increase in metabolism when TCM and OST cells were incubated with all extracts of *L. candicans*. Based on this, *L. candicans* in these tumor types should be careful use, and that *in vivo* studies should be performed to prove the true effects of this plant.

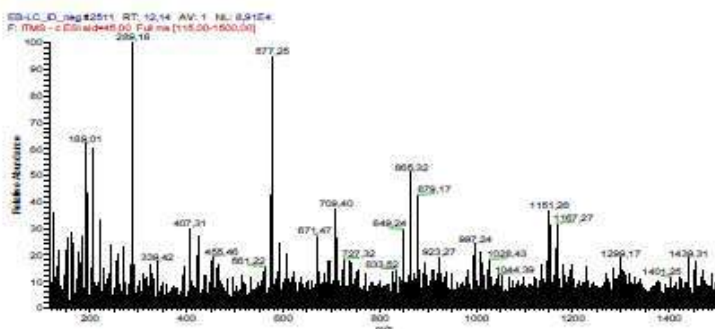


Figure 1: Typical direct flow injection analysis FIA-ESI-IT-MS fingerprint spectra obtained in negative ion mode of the 80% (EtOH/H₂O) from the leaves of *L. candicans*.

References

- Anfinsen, K.P., Grotmol, T., Bruland, O.S., Jonasdottir, T.J., 2011. Breed-specific incidence rates of canine primary bone tumors-A population based survey of dogs in Norway. *Can J Vet Res.* 75, 209–215.
- Barbosa, D. F. S., Reed, E., 2005. Caracterização química das drogas obtidas a partir das folhas do açoita-cavalo,” 57a Reunião Anual da SBPC.

Agradecimentos/Acknowledgments

IFMA (Instituto Federal do Maranhão- Campus São Luís Monte Castelo -DAQ); USP (Laboratory of Stem Cell, Department of Anatomy of Domestic and Wild Animals, Faculty of Veterinary Medicine and Animal Science); USP; FAPEMA (Fundação de Amparo a Pesquisa do estado do Maranhão)

Síntese de conjugados isatina-naftoquinona com potencial atividade biológica

Vitor B. Boechat (IC),^{1*} Bárbara V. Silva (PQ),¹ Sabrina T. Martinez (PQ).²

vboechat@eq.ufrj.br

¹Instituto de Química (IQ), Universidade Federal do Rio de Janeiro (UFRJ), Ilha do Fundão, Rio de Janeiro, RJ, Brazil;

²Centro Interdisciplinar de Energia e Ambiente (CIEnAm), Universidade Federal da Bahia (UFBA), Campus de Ondina, Salvador, BA, Brazil.

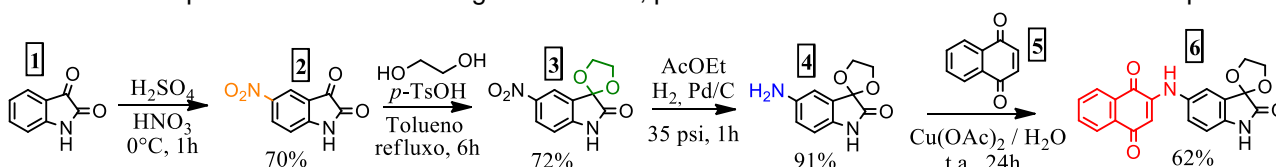
Palavras Chave: Isatina, Naftoquinona, Atividade Biológica

Highlights

Synthesis of isatin-naphthoquinone conjugates with potential biological activity. Isatin and naphthoquinone derivatives are shown in literature to have potential biological activity. Conjugate reactivity was studied and further reactions with various organic groups are planned.

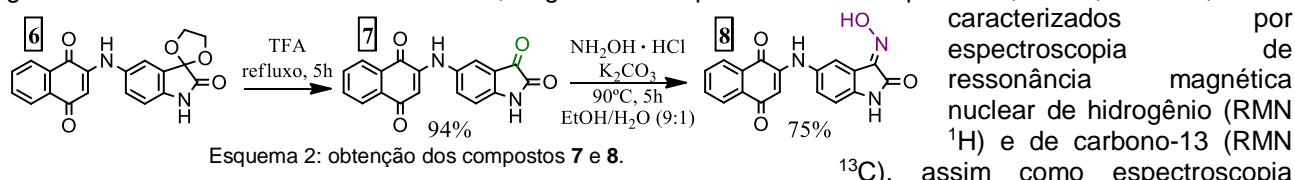
Resumo/Abstract

A isatina foi sintetizada em 1841 e já foi detectada em plantas, sapos e em fluidos corporais de mamíferos [1]. Além de apresentar grande versatilidade sintética, possui diversas atividades biológicas [2]. As naftoquinonas existem em plantas de diversos gêneros, em animais, alguns fungos e têm também atividades biológicas comprovadas [3]. Alguns de seus derivados são essenciais em processos celulares [4]. Este trabalho tem como objetivo sintetizar um conjugado isatina-naftoquinona (**6**) como precursor de derivados com potencial atividade biológica. De início, procedeu-se a rota sintética mostrada no Esquema 1.



Esquema 1: rota sintética empregada para a obtenção do conjugado **6**.

Após a obtenção do composto **6**, foi testada a reatividade das carbonilas presentes no núcleo naftoquinônico na presença de hidroxilamina em meio de etanol a 90 °C por 5 horas com catálise de piridina e, depois, carbonato de potássio; nenhuma das tentativas apresentou consumo do material de partida. Assim, partiu-se para a hidrólise do cetal do núcleo isatínico através de *p*-sulfônico-4-calixareno em meio aquoso, sob aquecimento em micro-ondas. Variou-se os parâmetros de reação diversas vezes, mas não houve consumo total do material de partida, o que motivou a mudança de metodologia. Decidiu-se realizar a hidrólise do cetal dioxolano com ácido trifluoroacético sob refluxo por 5 horas, o que levou ao produto desejado em 94% de rendimento. Em seguida, reagiu-se o composto **7** com cloridrato de hidroxilamina para gerar a oxima **8** em 75% de rendimento, segundo o Esquema 2. Os compostos **6**, **7** e **8**, inéditos, foram



Esquema 2: obtenção dos compostos **7** e **8**.

caracterizados por espectroscopia de ressonância magnética nuclear de hidrogênio (RMN ¹H) e de carbono-13 (RMN ¹³C), assim como espectroscopia

de infravermelho (IV). O composto **7** será usado como material de partida para todas as reações subsequentes. Planeja-se adicionar à carbonila cetônica do núcleo isatínico grupos relacionados na literatura a diferentes atividades biológicas.

Referências: [1] Silva J.F.M. et al. J. Braz. Chem. Soc. 12, 2001, 273. [2] Silva, B. V. J. Braz. Chem. Soc. 24, 2013, 707. [3] Ekennia, A.C. et al. Apld. Org. Chem. 32, 2018, 18p. [4] Franco, C.F.J. et al. J. Braz. Chem. Soc. 22, 2011, 187.

Agradecimentos/Acknowledgments

O presente trabalho foi realizado com apoio da CAPES – Código de Financiamento 001.

Área: ANA

Nº de Inscrição: 00405

Optimization of a bar adsorption method for Cd preconcentration using SrTiO₃ as adsorbent.

Amanda S. Monteiro (IC),¹ Vanessa N. Alves (PQ),²

santosmonteiro.amanda@gmail.com

¹Departamento de Química, UFG- Regional Catalão.

Palavras Chave: cádmio, extração, adsorção, spe.

Highlights

Otimização de um método de adsorção em barra para a preconcentração de Cd usando SrTiO₃ como adsorvente foi realizada. O método é novo e simples, de acordo com os princípios da química analítica verde.

Resumo/Abstract

Os íons metálicos geralmente são encontrados na natureza na sua forma dissociada, e em alguns casos em baixas concentrações nos mais diversos tipos de matrizes. Visando a determinação destes íons, o uso de diversas técnicas espectroanalíticas têm sido estudadas. Entretanto, apesar das opções disponíveis, em virtude de suas baixas concentrações, faz-se necessária a utilização de etapas de extração e/ou pré-concentração. A extração em fase sólida (SPE) é a técnica de extração mais comumente utilizada por apresentar diversas vantagens. Dentro da SPE, a técnica de adsorção em barra mostra grande eficiência na adsorção de íons metálicos, onde tem-se uma barra recoberta com material sólido adsorvente, disposto em uma solução contendo o analito de interesse. O desenvolvimento de uma metodologia de adsorção em barra foi desenvolvido, para extração de íons metálicos em amostras aquosas utilizando SrTiO₃ como adsorvente. Este trabalho tem por objetivo a otimização das variáveis que possivelmente afetam o sistema de extração, pelo método univariado. Inicialmente o pH do meio foi avaliado, utilizando soluções contendo o íon Cd²⁺ na concentração de 1 mg L⁻¹ e variando-se o pH do meio de 5 a 11. Para isso, 5 mL destas soluções foram colocadas em contato com as barras recobertas, em agitador magnético durante 5 minutos, posteriormente a barra recoberta foi retirada e o sobrenadante levado para análise por espectroscopia de absorção atômica por chama (FAAS). Observa-se que em valores de pH acima de 5, o material apresenta aproximadamente 100% de adsorção para os íons cádmio. Para que maiores porcentagens de adsorção sejam obtidas é importante trabalhar com um valor de pH onde se tenha o íon metálico preferencialmente com carga oposta à carga superficial do material adsorvente, assim o pH 9 foi fixado para os demais ensaios, garantindo melhores condições de adsorção, bem como aumentando a seletividade da técnica. Após comprovar o potencial de adsorção do material pelo íon Cd, estudo cinético foi realizado a fim de avaliar o mecanismo de adsorção envolvido no processo. Assim, o sistema experimental se adequou ao modelo cinético de Avrami, indicando que o processo de adsorção acontece de acordo com o modelo de ordem múltiplas, se adequando tanto a Langmuir quanto a Freundlich. A influência das variáveis tempo de agitação, tamanho da barra, tipo e concentração do eluente foram avaliados. O tamanho da barra de adsorção variou entre 0,5 e 2,0 cm, enquanto o tempo variou entre 2 e 60 min. Para a dessorção o ácido clorídrico e nítrico foram avaliados. De acordo com os resultados, a barra de 1,0 cm apresenta melhor desempenho, sendo que o processo de adsorção apresenta cinética rápida, uma vez que com 5 minutos o equilíbrio já é atingido. Por sua vez, o ácido clorídrico se mostrou mais eficiente no processo de dessorção do metal. Assim, SrTiO₃ tem se mostrado um adsorvente eficiente, de síntese fácil e de baixo custo, podendo ser utilizado com êxito no desenvolvimento de metodologias de adsorção em barra, visando a extração/pré-concentração de íons cádmio em amostras aquosas.

Agradecimentos/Acknowledgments

Agradecimentos às unidades de fomento, FAPEG, CAPES, à Universidade Federal de Goiás-Regional Catalão, ao instituto de Química, e à Universidade Federal de Uberlândia.

Área: MED

Nº de Inscrição: 00406

Isolation of Natural Prenylated Xanthenes, Synthesis of Derivatives, and Assessment of Their Antiparasitic Activity

Douglas Chaves Alcântara-Pinto (PG)¹, Paulo Pitasse-Santos (PG)¹, Afonso Santine M. Mesquita-Velez (IC)¹, Luan Lucas Gonçalves (IC)¹, Débora Decoté-Ricardo (PQ)², Marco Edilson Freire de Lima (PQ)¹

Douglasdoti@hotmail.com; marcoedilson@gmail.com

¹Dep. de Química Orgânica-IQ; ²Dep. de Microbiologia e Imunologia Veterinária-IV-Universidade Federal Rural do Rio de Janeiro, BR 465, Km 07-Seropédica, RJ.

Keywords: *Trypanosoma cruzi*, Chagas' disease, *Garcinia mangostana*, natural products.

Highlights

In this work we report the isolation of prenylated xanthenes α -mangostin and gartanin from the fruit peels of *G. mangostana* as well as the synthesis and antiparasitic effects of derivatives prepared from α -mangostin; The IC₅₀ values against amastigotes of *T. cruzi* were 1,06 $\mu\text{g}\cdot\text{mL}^{-1}$ (2.58 $\mu\text{mol}\cdot\text{L}^{-1}$) for α -mangostin; 1,19 $\mu\text{g}\cdot\text{mL}^{-1}$ (3.00 $\mu\text{mol}\cdot\text{L}^{-1}$) for gartanin; and 1,57 $\mu\text{g}\cdot\text{mL}^{-1}$ for the crude extract. The activities of the synthetic derivatives are under evaluation.

Abstract

Chagas' disease (American Trypanosomiasis) is a zoonosis caused by the protozoan *Trypanosoma cruzi* (Kinetoplastida: Trypanosomatidae). This parasitic infection is recognized by WHO as one of the thirteen most neglected diseases in the World.¹ There are only two drugs for the treatment of chagasic patients: the nitro-heterocyclic derivatives benznidazole and nifurtimox.¹ However, none of them meets the criteria (i.e. parasitological cure both in acute and chronic phases of the infection and reduced side effects) required to be an optimal drug to treat this illness. Natural products are important sources of both raw materials and inspiration for obtaining new molecules with potential applications in the area of drug development. Our group has been working in the application of abundant natural products from accessible sources as precursors in the synthesis of new molecules showing antiparasitic activity.² The natural xanthenes α -mangostin and gartanin are potential precursors of new antichagasic agents. These molecules have a wide variety of biological activities described, including anti-inflammatory, antitumor and antibacterial.³ The main natural source of these prenylated xanthenes is fruit of *Garcinia mangostana*, (Clusiaceae). The crude extract of the fruits of *G. mangostana* was obtained by continuous extraction in Soxhlet apparatus having ethanol as solvent. The two natural xanthenes, gartanin and α -mangostin, were isolated by column chromatography (silica gel), having hexane-ethyl acetate mixture as eluent. The two natural xanthenes as well as the crude extract had their activities evaluated against *T. cruzi* (amastigotes, Tulahuen strain C2C4 LacZ). The observed IC₅₀ values were 1.06 $\mu\text{g}\cdot\text{mL}^{-1}$ (2.58 $\mu\text{mol}\cdot\text{L}^{-1}$) for α -mangostin, 1.19 $\mu\text{g}\cdot\text{mL}^{-1}$ (3.00 $\mu\text{mol}\cdot\text{L}^{-1}$) for gartanin, and 1.57 $\mu\text{g}\cdot\text{mL}^{-1}$ for the crude extract. Benznidazole was used as positive control (IC₅₀= 0.39 $\mu\text{g}\cdot\text{mL}^{-1}$; 1.49 $\mu\text{mol}\cdot\text{L}^{-1}$). Since α -mangostin is the major component of the crude extract and due to its best activity profile, it was chosen as precursor of new derivatives aiming antiparasitic activity optimization. Starting from α -mangostin we were able to prepare an acetylated derivative, a chromone, obtained from cyclization reaction of one of the prenyl groups with one of the phenolic hydroxyls, and Mannich derivatives, obtained from the reaction of α -mangostin with some cyclic amines (e.g. piperidine and morpholine) in the presence of formaldehyde. These derivatives, along with others that are currently being synthesized, will be evaluated against amastigotes of *T. cruzi*. The set of results obtained herein will provide us a profile of SAR for this family of compounds.

Acknowledgments

CAPES, CNPq, FAPERJ

¹WHO-World Health Organization (2012). Research priorities for Chagas disease, human African trypanosomiasis and leishmaniasis. Technical report series, nr. 975; ²Franklin, T.N. et al. *J. Braz. Chem. Soc.*, 2019 (in press); ³Pedraza-Chaverri, et al. *Food Agric. Toxicol.* 46(10), 3227, 2008.

Área: AMB

(Inserir a sigla da seção científica para qual o resumo será submetido. Ex: ORG, BEA, CAT)

Nº de Inscrição: 00408

(Inserir o número de inscrição do autor que fez a submissão)

Characterization of humic-like material extracted of process water from hydrothermal carbonization and interaction with Cu(II)

Vinicius Sarracini Santos (IC),^{1*} Isabela C. Constantino (PG),¹ Márcia C. Bisinoti (PQ),¹ Altair B. Moreira (PQ),¹ Odair P. Ferreira (PQ),²

vinicius.sarracini@unesp.br;

¹Instituto de Biociências, Letras e Ciências Exatas, UNESP – Campus de São José do Rio Preto-SP; ²Universidade Federal do Ceará – Fortaleza-CE

Keywords: Humic-like Substances, Hydrothermal Carbonization, Characterization, Process Water.

Highlights

Humic-like material (HLM) was extracted from process water (PW), its characterization and interaction with Cu(II) was investigated. HLM showed an aromatic character, many functional groups and interaction with Cu(II) was observed.

Abstract

Introduction: Hydrothermal Carbonization (HTC) is used in the conversion of wet biomass and produces: hydrochar (solid phase) and process water (PW) (liquid phase). Thus, sugarcane bagasse and vinasse, residues of sugarcane industry, have been used in HTC¹. The PW presents high concentrations of organic matter and nutrients.² This study aimed to extract the humic-like material (HLM) from the PW, to characterize it using optical techniques and to evaluate its interaction with Cu(II), as well.

Experimental: HTC was conducted with sugarcane bagasse and vinasse, with addition of 1% H₂SO₄ (232°C, 13 h). The PW was filtered in 0.45 µm membrane, HLM extractions were made using XAD-8 resin, and the extracts were eluted with NaOH, followed by purification and lyophilization.³ The HLM was characterized by UV-VIS, infrared and fluorescence in Emission-Excitation mode (EEM) spectroscopy. For the complexation assays, 10 mg L⁻¹ of HLM solution (pH 6) were used and [Cu(II)] ranged from 0.01 to 10 mg L⁻¹ and set under agitation during 24h. Then, fluorescence spectra ($\lambda_{Exc} = 270$ nm; λ_{Em} ranged from 220 to 530 nm) were obtained and the data were treated using Stern-Volmer model⁴.

Results and Discussion: The E₄/E₆ ratio (465/665 nm) was 3.0, indicating that the HLM has an aromatic structure.⁵ EEM spectra showed maximum fluorescence intensity at Ex/Em=300-370/400-500, indicating the presence of a hydrophobic “humic-like” fraction in this material.⁶ Infrared spectra showed the presence of several functional groups, such as hydroxyl, carboxylic, aromatic and ester carboxyl groups. In the Cu(II) complexation assays, fluorescence suppression was observed with the increasing of metal ion concentration, indicating the formation of complexes, with the stability constant determined as 7.05.

Conclusion: It is concluded that the HLM extracted from the PW presented interesting characteristics, besides have been observed the interaction with the Cu(II), given great perspectives for future applications of this material, which will be studied.

References

¹MELO, C. A.; JUNIOR, F.H.S.; BISINOTI, M.C.; MOREIRA, A.B.; FERREIRA, O.P. Transforming Sugarcane Bagasse and Vinasse Wastes into Hydrochar in the Presence of Phosphoric Acid: An Evaluation of Nutrient Contents and Structural Properties. WasteBiomass Valor

²SILVA, C. C. Efeito do uso de diferentes aditivos na produção de hidrochar obtido da mistura bagaço de cana-de-açúcar e vinhaça com potencial para aplicação agrícola. Dissertação de Mestrado, Instituto de Biociências, Letras e Ciências Exatas da Universidade Estadual Paulista “Júlio de Mesquita Filho”, São José do Rio Preto, 2017.

³International Humic Substances Society procedure

⁴LAKOWICZ, J. R. Principles of Fluorescence Spectroscopy. 2ª Edição, New York, Kluwer Academic/ Plenum Publisher, 1999.

⁵SANCHES, S. M.; DE CAMPOS, S. X.; VIEIRA, E. M. Caracterização das frações das substâncias húmicas de diferentes tamanhos moleculares. Eclética Química, v. 32, n. 1, p.49–56, 2007.

⁶HUDSON, N., BAKER, A., REYNOLDS, D. Fluorescence analysis of dissolved organic matter in natural, waste and polluted waters - a review. River Res. Appl. V.23 p.631-649,2010

Acknowledgments

To financial support and the scholarship granted from FAPESP (Project nº 2018/05673-7 and 2017/26718-6) and CNPq

Photooxidation behavior of Hantzsch Ester in aqueous media and envisioned restrain on macrocyclic complexation

Giovana Schmitt Wecker (IC),* Leandro Scorsin (PG), Ricardo Ferreira Affeldt (PQ).

agiovanawecker@gmail.com; ricardo.affeldt@ufsc.br

Laboratório de Catálise e Fenômenos Interfaciais, Departamento de Química, Universidade Federal de Santa Catarina, Campus Universitário – Trindade, CEP 88040-900;

Keywords: 1,4-Dihydropyridines, Hantzsch Ester, Photochemistry, Photooxidation, Pharmaceuticals, Supramolecular.

Highlights

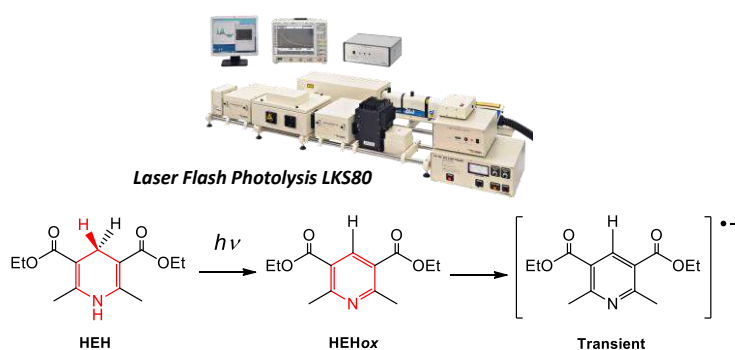
Photooxidation of Hantzsch Ester (**HEH**) in aqueous solution, identifying the excited state specie formed with a laser pulse source and a combination of spectroscopic techniques.

Abstract

1,4-Dihydropyridines (1,4-DHPs) comprise low molecular mass compounds with fascinating pharmacologic properties as Calcium channel blockers, been used as antihypertensive, antibiotic, anti-inflammatory and antifungal. Additionally, 1,4-DHPs pursue structure and oxidative behavior similar of NADH/NAD⁺ system, been capable of hydride donation. Despite this property is an important role for synthetic chemistry, the oxidation to the pyridine derivatives causes the inactivation of the pharmaceutical compound on the biological medium.^{1,2}

With the concern of pharmaceutical efficiency of these compounds, the aspiration of this work is to investigate the photostability of 1,4-DHPs in aqueous media, elucidating the photooxidation mechanism and identifying short-lived chemical species employing the Laser Flash Photolysis (LFP) technique. Furthermore, evaluate the microenvironment variation on the inclusion of the 1,4-DHPs on a macrocyclic cavity, modifying the excited state characteristics and the photostability of the molecule.

Preliminary experiments for the Hantzsch Ester (**HEH**) were performed. Both reactant and pyridine product (**HEHox**) were characterized by UV-Vis and fluorescence spectroscopy, presenting distinct behavior with the structure aromatization. The 1,4-DHP absorbs light in 375 nm and emits with high fluorescence in 463 nm. In contrast, the pyridine product of the oxidation absorbs light in 280 nm and dispossess emission of fluorescence. LFP experiments reveal an excited state specie formed with excitation in 320 nm, which appears only with the presence of the pyridine specie. Also, with an increasing number of pulses, promoting the photooxidation - and later degradation of the compound - were obtained a decay constant (k_{obs}) of $4.86 \times 10^5 \text{ s}^{-1}$ and half-life of 1.43 μs for the photolysis of the HEH in aqueous solution.



Scheme 1. Photooxidation of diethyl 1,4-dihydro-2,6-dimethyl-3,5-pyridinedicarboxylate (**HEH**) and anion radical specie observed in the photolysis technique.

¹ Fasani, E., Albini, A., Mella, M. *Tetrahedron*, **2008**, 64, 3190.

² Affeldt, R. F., Benvenuti, E. V., Russowsky, D. *New J. Chem.*, **2012**, 36, 1502.

Acknowledgments

INCT-Catálise, FAPESC, CNPq, CAPES and UFSC for the financial support.

42ª Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química: Eixos Mobilizadores em Química

Área: AMB

Nº de Inscrição: 00410

Interactions between organic ligands and Copper (II) studied by Time-Resolved Fluorescence and fluorescence quenching

João Vitor dos Santos (IC),^{1*} Lais G. Fregolente (PG),¹ Stéphane Mounier (PQ),² Houssam Hajjoul (PQ),² Altair B. Moreira (PQ),¹ Odair P. Ferreira (PQ),³ Marcia C. Bisinoti (PQ).¹

joaovitor_piaca12@hotmail.com

¹Department of Chemistry and Environmental Sciences, UNESP Rio Preto ; ²MIO Laboratory, CNRS-IRD-Université de Toulon-AMU ; ³Department of Physics, Federal University of Ceará

Key Words: Humic acids, Fluorescence, Characterization, CP/PARAFAC

Highlights

.Soils humic acids (HA) and hydrochars humic like acids were analyzed by Time-Resolved Fluorescence and Fluorescence Quenching.

.One component (C_A) was found in soils HA and two components in hydrochars humic like acid (C_B and C_C).

.Components A and C showed similar emission and excitation of fluorescence wavelengths, as well as Log K and lifetime values, then, suggesting excitation of the same group of molecules.

Abstract

In several regions of the Amazon are found pre-columbian anthropogenic soils called Terra Mulata, which are rich in organic matter as well macro and micronutrients, showing high fertility. The humic substances (SH) is one of the components of soil organic matter, and according to its solubility SH can be fractionated in humic acids (HA), fulvic acids (FA) and humin (HU). Studies have been developed aiming the production of materials with similar characteristics of these soils, trying to obtain a material capable to improve the quality of damaged/poor soils. One of the methods used is the hydrothermal carbonization of biomass, to highlight the "vinasse" and sugarcane "bagasse", whose solid material is called hydrochar, and it is rich in carbon and nutrients. Through the determination of chemical properties of organic matter as well as its interaction with metals it is possible to obtain important information to understand the role of humic fractions and hydrochar humic like fractions. Thus, the aim of this study was to analyze the structural and molecular composition of HA of Amazonian anthropogenic soils, and humic like acids of hydrochar from sugarcane industries by-products using Excitation-Emission Matrix (EEM) of Fluorescence Spectroscopy and Time-Resolved Fluorescence Spectroscopy (TRF). After that, CP/PARAFAC was applied to data. Soil HA samples showed a contribution of one component (C_A) at $(\lambda_{Ex}/\lambda_{Em})=290/510$ nm related to low energy peaks known to be typically of terrestrial humic acids, while hydrochars humic like acids showed two components, the first one (C_B) in $(\lambda_{Ex}/\lambda_{Em})=260/425$ nm characteristic of humic substances from terrestrial environments, and another one (C_C) in $(\lambda_{Ex}/\lambda_{Em})=275/500$ nm more related to soil fulvic acid. The C_A from soil AH and C_C from hydrochars humic like acids showed a slight red shift of emission wavelength, characterizing the presence of fluorescent groups with more aromatic rings, whereas C_B , from humic like acids of hydrochar, showed a slight blue shift, characterizing the presence of more aliphatic fluorescent groups¹. The values of conditional stability constant toward copper (Log K) for C_A were between 4.89 to 4.98 mol L⁻¹, while C_B from 3.73 to 4.17 mol L⁻¹ and 3.96 to 4.48 mol L⁻¹ for C_C . In general, both components A and C presented higher values for Log K, and added to the fact that they have a red shift, it can be observed that the fluorophores found in these components are more complexant and conjugated, suggesting the presence of more humified compounds with good copper binding capability¹. The amount of complexation sites (CL) were analyzed, and both components B and C showed higher values. Therefore, by Log K and CL, it was observed that C_A of soil HA showed lower amounts of complexation sites but strongly active; C_B showed large amounts of sites, but weakly bonded to metal; and C_C presented a large number of active sites with good interaction with metal ion. In addition, also through TRF only one component was found for soil HA with lifetime (τ) ranging from 5.2 to 6.3 ns (τ_A), and two components for hydrochars HA with τ_B ranging from 11.0 to 13.0 ns and τ_C 4.0 to 5.0 ns. Finally, Components A and C had similar fluorescence peaks, as well as close Log K and lifetime values, then, suggesting the presence of the same group of excited molecules.

References: ^[1]Mounier, S.; Zhao, H.; Garnier, C.; Redon, R. *Biogeochemistry*. v. 106, p. 107–116, 2011.

Acknowledgments

São Paulo Research Foundation through the processes 2018/09914-9, 2017/05408-9 and 2015/22954-1; and thank MIO Laboratory (Université de Toulon/France) for supporting the development of the research.

Área: CAT

Nº de Inscrição: 00412

Reactive dye degradation and decolorization: A convenient study applying two DyP-type peroxidases (TfuDyP and SviDyP)

Carolline Schreiber (IC),¹ Franklin Matheus França de Souza (IC),¹ Eduardo Zapp (PQ),^{1*} Patrícia Bulegon Brondani (PQ)

carollineschreiber@gmail.com; patyqmc@gmail.com

¹Departamento de Ciências Exatas e Educação, UFSC

Palavras Chave: Biocatálise, Peroxidases, Corantes Reativos.

Highlights

- Use of new peroxidases in a complete study about dye degradation/decolorization.
- DyP-type peroxidases is a new family among peroxidases.
- High level of degradation and decolorization achieved.

Resumo/Abstract

Synthetic reactive dyes are extensively used in industry and their presence in wastewater can deeply affect the aquatic life.^{1,2} Enzymatic approaches have been attracting much interest in the remediation of the wastewater as an alternative strategy to conventional treatments.² Dye-decolorizing peroxidases (DyPs) are a recently discovered family of peroxidases which have attractive catalytic properties.^{1,3} The main goal of this work was to apply two different DyPs (SviDyP and TfuDyP) in order to study the reactive dye degradation and decolorization. After the initial evaluation of the stability and activity of the enzymes, the reactions (final volume of 3 mL) were carried out using one of the DyP peroxidases (300 nmol.L⁻¹), H₂O₂ (100 μmol.L⁻¹), the selected dye (50 μmol.L⁻¹) and the selected buffer system (phosphate/tris-HCl pH 3, 4, 5 or 7) in the presence or not of UV light as additive. The reactions were analysed using UV spectroscopy to calculate the percentage of degradation and the decolorization was checked by visual observation. The best results were observed in 12 h, showing high degradation and decolorization. The UV light was not effective as an additive in the reaction. Most of the time good results in terms of degradation/decolorization were observed, for example the 100% degradation observed for the Reactive Green 19 in the presence of SviDyP. The enzyme SviDyP was more effective in the degradation and decolorization for the majority of the tested dyes.

¹ Ogola, H. J. O., Ashida, H., Ishikawa, T. & Sawa, Y. in *Advances in Bioremediation of Wastewater and Polluted Soil* 111–144 (2015).

² Cristóvão, R. O., Tavares, A. P. M., Loureiro, J. M., Boaventura, R. A. R. & Macedo, E. A. *Environ. Technol.* **29**, 1357–1364 (2008).

³ Fraaije, M. W. *Enzym. Eng.* **01**, 2–4 (2012).

Optimization the use of alkaline, acid, ionic liquid and oxidative pretreatments for conversion coconut residues in fermentable sugars

Magale K. D. Rambo (PQ),^{1*} Polyana M. de Melo (PG),² Michele.C.D. Rambo (PQ),³ Cláudio C. Santana Junior (PG)¹.

magalerambo@mail.uft.edu.br

¹Programa de Pós Graduação em Ciências do Ambiente, UFT; ²Programa de Pós Graduação em Ciência e Tecnologia de Alimentos, UFT, ³Curso de Matemática, IFTO.

Palavras Chave: Biomass, Experimental design, Response surface, Sugar yield, Lignin yield.

Highlights

Different pretreatments on coconut husk for fermentable sugars were studied.> The sugar yield increased with the crystallinity>The microscopy and infrared spectroscopy shows changes in the biomass.

Resumo/Abstract

Cocos nucifera L, is a palm tree of paramount importance for the food and chemistry industries, among others; however, a substantial part of its biomass is inedible. Thus, the aim of the current study is to investigate different pretreatments applied to coconut husks (CH) based on acid, alkaline, liquid ionic (LI) and peroxidative solutions in order to produce fermentable sugars through acid hydrolysis. Pretreatments were optimized (time and temperature) to maximize reducing sugar yield and to remove total lignin after acid hydrolysis. Reducing sugar yield (70%) was higher when coconut husk waste was alkaline pretreated under the following conditions: time, 2h; temperature, 76.21 °C. The highest lignin removal rate was recorded when peroxide and alkaline solutions were used. Ionic liquid did not increase the sugar contents. These outcomes were confirmed through Fourier-transform infrared spectroscopy. Scanning electron microscopy indicated increased porosity and biomass changes during the alkaline, acid and liquid ionic pretreatments. Crystallinity index significantly increased after each pretreatment, besides being directly associated with sugar content.

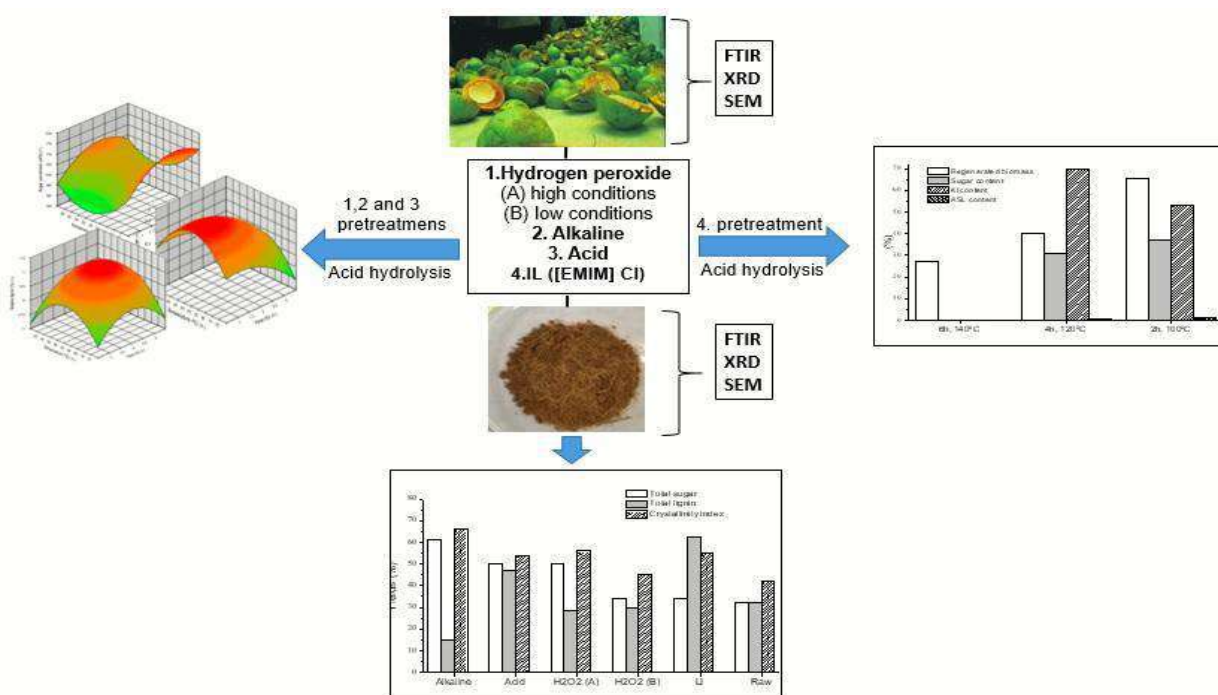


Figure 1. Experimental procedure.

References

- Q. Qing, Q. Guo, L. Zhou, X. Gao, X. Lu, Y. Ind. Crops Prod. 109 (2017) 391–397.
F.L. Shimizu, P.Q. Monteiro, P.H.C. Ghiraldi, R.B. Melati, F.C. Pagnocca, Ind. Crops Prod. 115 (2018) 62–68.

Área: AMB

Nº de Inscrição: 00414

Properties of hydrochar obtained from byproducts of the sugarcane industry: an evaluation of the use of phosphoric acid

Lucas R. Bento (PG),^{1*} Camila A. Melo (PQ),¹ Odair P. Ferreira (PQ),² Altair B. Moreira (PQ),¹ Alessandro Piccolo (PQ)³, Riccardo Spaccini (PQ)³, Márcia C. Bisinoti (PQ).

bento_rai@hotmail.com

¹Departamento de Química e Ciências Ambientais, UNESP; ²Departamento de Física, UFC; ³Dipartimento di Scienze del Suolo, della Pianta e dell'Ambiente, Università degli studi di Napoli Federico II.

Palavras Chave: *Bagasse, Vinasse, Hydrothermal Carbonization, Hydrochar.*

Highlights

Bagasse and vinasse were carbonized via hydrothermal carbonization. The phosphoric acid addition in the medium reaction increased the degradation of biomass and the phosphorus content in hydrochar.

Abstract

Hydrothermal carbonization (HTC) has been used as treatment of different biomass, it produces a solid material rich in carbon called hydrochar. HTC is conducted in aqueous medium reaction which allows the use of vinasse. The mixture of bagasse and vinasse in HTC showed that is possible the formation of a hydrochar rich in carbon and nutrients that can be applied to improve the soil quality, storage carbon and water retention (Bento et al., 2019; Melo et al., 2017). Were produced 6 hydrochars employing bagasse, vinasse and mixture bagasse and vinasse, with and without phosphoric acid addition (4%, v/v). HTC reactions were performed in a high-pressure autoclave reactor, in self-generated pressures, employing the temperature of 232 °C for 13 hours. The hydrochar was separated by vacuum filtration and dried at 50 °C. Both biomasses and the hydrochars produced were characterized by elemental composition, total phosphorus, ¹³Carbon-Nuclear Magnetic Resonance using a Cross-Polarization Magic Angle Spin (¹³C-CPMAS-NMR) and off-line thermochemolysis-gas chromatography-mass spectrometry (GC-MS). The Van Krevelen plots obtained with the elemental ratios showed that the hydrochars are in the same char region. HTC caused the degradation of the polysaccharides structures of the raw materials (O-Alkyl compounds) and the synthesis of new compounds, increasing the intensity in hydrochar NMR spectra of new aromatic and aliphatic moieties (C-Aryl and Alkyl). The aromatic and aliphatic moieties were identified through of thermochemolyses-GC-MS as benzene derivatives, phenolic and fatty acids. The use of phosphoric acid increased the degree of carbonization of the hydrochar, besides that increased the phosphorous content (range of 4.0 to 23.5 g kg⁻¹). The hydrochar can act stabilizing the organic matter on soil (soil carbon sequestration). The aromatics and fatty acids synthesized can be responsible for it. Since the hydrophobic compounds and the progressive self-association on soil, generates a chemical protection caused by the non-hydrophilic nature that excludes the water and microbes soluble enzymes (Piccolo et al., 2018). Thus, the results suggest that the hydrochar from bagasse and vinasse can be a new approach for agricultural proposes, employing the by-products from sugarcane industry.

References

- Bento, L.R., Castro, A.J.R., Moreira, A.B., Ferreira, O.P., Bisinoti, M.C., Melo, C.A., 2019. Release of nutrients and organic carbon in different soil types from hydrochar obtained using sugarcane bagasse and vinasse. *Geoderma* 334, 24–32. doi:10.1016/j.geoderma.2018.07.034
- Melo, C.A., Junior, F.H.S., Bisinoti, M.C., Moreira, A.B., Ferreira, O.P., 2017. Transforming Sugarcane Bagasse and Vinasse Wastes into Hydrochar in the Presence of Phosphoric Acid: An Evaluation of Nutrient Contents and Structural Properties. *Waste and Biomass Valorization* 8, 1–13. doi:10.1007/s12649-016-9664-4
- Piccolo, A., Spaccini, R., Drosos, M., Vinci, G., Cozzolino, V., 2018. The Molecular Composition of Humus Carbon: Recalcitrance and Reactivity in Soils, in: *The Future of Soil Carbon*. doi:10.1016/B978-0-12-811687-6.00004-3

Acknowledgments

This work was supported by *Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de São Paulo* (FAPESP) process 18/15733-7 and National Council for Scientific and Technological Development (CNPq). L.R.B. acknowledges the scholarship from FAPESP (2017/05575-2 and 2017/17991-0).

^{42ª} Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química: Eixos Mobilizadores em Química

Área: AMB

Nº de Inscrição: 415

Citrus peel and rice husk as biomass for solid biofuel

Maria Julia de Assunção Ezirio (IC),¹ Vitoria de Godoy Saciloto (IC),² Susana Claudete Costa (PG),³ Rachel Faverzani Magnago (PQ),^{3*}

rachel.magnago@unisul.br

¹Engenharia Ambiental e Sanitária; ²Engenharia Química; ³Programa de Pós-graduação em Ciências Ambientais, UNISUL

Palavras Chave: Rice husks; Citrus peels; Solid biofuel; Higher heating value; Lower heating value.

Highlights

Potential of citrus peels with rice husks as solid biofuel. The quality parameters of citrus peels with rice husks as a biofuel were determined. The higher heating value obtained for mandarin peels with rice husks.

Resumo/Abstract

Biomasses such as citrus (mandarin, orange and lemon) peels and rice husks are among the most abundant and accessible sources for the conversion of crops into solid biofuel. It is important to highlight that sustainable bioenergy must have high efficiency; therefore, higher and lower heating values of the specimens produced from rice husks, yellow potato, orange, lemon, mandarin peels were evaluated. For the preparation of the specimens, yellow potato peel was weighed and mixed in of distilled water. The mixture was then heated for 10 min at a temperature of 100 °C. When the mixture showed a gel-like aspect, and ground rice hulls and citrus peels was added. The total moisture content, ash content, and higher and lower heating values of the six specimens were determined. Assessment of the smoke was performed by using the Ringelmann scale. The compressive strength was also determined, by which all samples presented a maximum resistance (0.3-0.5 MPa) appropriate for the storage and handling of the developed solid biofuel. The solid biofuel with orange peels showed greater higher and lower heating values, which were 17.01 ± 0.04 MJ/kg and 15.64 ± 0.05 MJ/kg, respectively. All developed specimens were shown to be capable of replacing traditional heat sources, such as firewood (7.12-10.47 MJ/kg), with better energy performance. The smoke emitted of the specimens during burning was not black.

Reference

Perea-Moreno, A.-J., Perea-Moreno, M.-A., Dorado, M.P., Manzano-Agugliaro, F. J Clean Produc. 190, 53-62, 2018.

Evaluation of single reaction chamber microwave system for digestion of refractory substances using hydrogen peroxide and nitric acid.

Kéllen F. Anschau (PG),¹ Leonardo Z. Silva (IC),¹ Michele S.P. Enders (PG),¹ Caroline M. Senger (PG),¹ Fabio A. Duarte (PQ),¹ Edson I. Muller (PQ).^{1*}

keellenfrancine@gmail.com; edson_muller@yahoo.com

¹Departamento de Química, UFSM

Keywords: *Hydrogen peroxide, Single reaction chamber, Refractory substances, Residual carbon content.*

Highlights

Evaluation of the digestion efficiency of SRC system for refractory substances (RS)
Comparison of digestion efficiency using H₂O₂ or HNO₃ for RS

Abstract

The refractory characteristics of histidine, linoleic acid, phenylalanine and tryptophan to wet digestion using HNO₃ as oxidant in low pressure system was well reported in the literature.¹ On the other hand, the digestion efficiency of single reaction chamber (SRC) microwave system using HNO₃ or H₂O₂ for the refractory substances (RS) was not deeply discussed in the literature. In this context, the evaluation of SRC for RS digestion HNO₃ (SRC- HNO₃) or H₂O₂ (SRC-H₂O₂) was proposed in this work. The efficiency of the digestion using HNO₃ or H₂O₂ in SRC for RS was evaluated based on residual carbon content (RCC) and presented in Table 1. Firstly, it is important to mention that the use of SRC system presented lower RCC values lower than those reported in the literature, with exception of linoleic acid using H₂O₂. This can be explained due to higher temperature and pressure provided by SRC system. Using SRC-HNO₃ the highest RCC values were observed for the phenylalanine and tryptophan (aromatic compounds) because the electrophilic attack on the aromatic nucleus provide the production of very stable products. On the other hand, the SRC-H₂O₂ digests for the aromatic compounds presented RCC values lower or quite similar those obtained for SRC-HNO₃ digests.

Table 01 - Residual carbon content (%) for refractory substances with decomposition in SRC system using H₂O₂ and HNO₃.

| Organic compounds | SRC-H ₂ O ₂ | SRC-HNO ₃ | Literature values |
|-------------------|-----------------------------------|----------------------|-------------------|
| Histidine | 4.1 ± 0.3 | 0.24 ± 0.04 | 31 |
| Linoleic acid | 17 ± 1 | 1.2 ± 0.2 | 10.3 |
| Phenylalanine | 9.3 ± 1.4 | 25 ± 3 | 57 |
| Tryptophan | 6.7 ± 0.4 | 6.4 ± 0.5 | 12.2 |

Acknowledgments

CAPES, CNPq, FAPERGS and UFSM.

1. Wurfels, M., Jackwerth, E. and Stoepler, M. *Analytica Chimica Acta*, 226, 1, 1989.

Self-assembled films based on reduced graphene oxide/polyaniline/iron oxide composites as supercapacitors

¹Vitor H.N. Martins (IC),¹Luis G.E.S. Mendes (IC),¹Victor H.R. Souza (PQ)

vitorhugotl@icloud.com; victorsouza@ufgd.edu.br

¹Laboratório de Materiais Cerâmicos Avançados (LMCA), Faculdade de Ciências Exatas e Tecnologia (FACET), Universidade Federal da Grande Dourados (UFGD)

Palavras Chave: Reduced graphene oxide, polyaniline, iron oxide, self-assembled films, supercapacitors.

Highlights

- Self-assembled films prepared from graphene oxide/polyaniline/iron precursor gel using the doctor blade technique;
- Graphene oxide is reduced using hydrazine vapor;
- Energy storage measurements from the self-assembled films.

Abstract

The new technology of electronic devices seeks materials which can be processable as thin self-assembled films with low volume and weight. The purpose is not different for energy storage systems, like supercapacitors and batteries, which are an integral part of these electronic devices. Such systems must provide high energy storage capability (like high energy and/or power density) using a low amount of material in a restrict space since modern devices claims for miniaturized and portable systems with high performance. Among the several materials available for such applicability, graphene is considered an outstanding 2D material due to the well-known properties like high electronic transport and surface area.^[1] The storage energy properties of graphene are tune-up introducing conductive polymers like polyaniline and metal transition oxides such as iron oxide, which improve the capacitive properties of the final composite.^[2] Herein, we prepared self-assembled reduced graphene oxide(rGO)/polyaniline(PAni)/iron oxide films casting a high viscosity mixture of graphene oxide, emeraldine-base polyaniline and iron chloride over a glass substrate by doctor blade technique. Hydrazine vapor was used to convert graphene oxide into reduced graphene oxide. Bare graphene, rGO/PAni and rGO/PAni/iron oxide films were prepared and electrochemical measurements were employed to calculate the specific capacitance of such composites. Figure 1 shows the galvanostatic charge/discharge measurements for all materials and is clearly noticed the better performance of the rGO/PAni/iron oxide, with the specific capacitance value of 130.8 F g⁻¹. The cycling stability of all materials and the fabrication of an all-solid capacitor will be further explored.

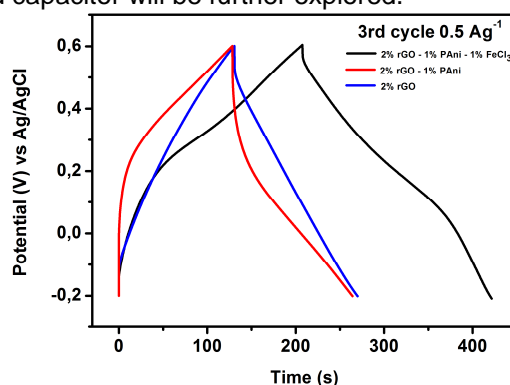


Figure 1 - Galvanostatic charge/discharge curves for bare rGO, rGO/PAni and rGO/PAni/FeCl₃ self-assembled films.

[1] Zhu, Y.; Murali, S.; Cai, W.; Li, X.; Suk, J. W.; Potts, J. R.; Ruoff, R. S., Graphene and Graphene Oxide: Synthesis, Properties, and Applications. *Advanced Materials* **2010**, *22* (35), 3906-3924.

[2] Xiong, P.; Huang, H.; Wang, X., Design and synthesis of ternary cobalt ferrite/graphene/polyaniline hierarchical nanocomposites for high-performance supercapacitors. *Journal of Power Sources* **2014**, *245*, 937-946.

Acknowledgments

Vitor H.N. Martins and Luis G.E.S. Mendes thanks *Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq)* and *Universidade Federal da Grande Dourados (UFGD)* for the scholarship.

42ª Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química: Eixos Mobilizadores em Química

Área: AMB

(Inserir a sigla da seção científica para qual o resumo será submetido. Ex: ORG, BEA, CAT)

Nº de Inscrição: 00421

(Inserir o número de inscrição do autor que fez a submissão)

DETERMINAÇÃO DE HIDROXILAMINA NA REAÇÃO DE REDUÇÃO CATALÍTICA DO NITRATO EM ÁGUA POR HPLC-DAD.

Vivianne Galvão Martins (PG)^{1,2*}, Tainá de Souza Vargas (TM)¹, Marco André Fraga (PQ)^{1,2}
vivianne.galvao@int.gov.br

¹ Instituto Nacional de Tecnologia, RJ, Rio de Janeiro, Brasil, CEP 20081-312 ; ² Instituto Militar de Engenharia, RJ, Rio de Janeiro, Brasil, CEP 22290-270

Palavras Chave: Hidroxilamina, Nitrato, Redução, Água, HPLC/DAD.

Highlights

Determination of hydroxylamine in the reaction of catalytic reduction of nitrate in water by HPLC-DAD. This work demonstrates that there was no hydroxylamine formation in the catalytic reduction of nitrate in water using a bimetallic catalyst 5% Pd - 2,5% Cu/ Nb₂O₅. Hydroxylamine is a substance that is associated with mutagenicity and various acute toxic effects.

Resumo/Abstract

O excesso de íon nitrato em água potável é um perigo potencial à saúde humana, uma vez que pode resultar em meta-hemoglobinemia em recém-nascidos e em adultos, além de estar associado a ocorrências de câncer e hipertensão. Nesse contexto, os níveis de nitrato em água têm sido regulados em diversos países a fim de garantir a qualidade da água. A quantidade de espécies nitrato permitidos, na água potável, pela Organização Mundial de Saúde, é de 5 mgL⁻¹. No Brasil, a Portaria 2.914 de 2011 do Ministério da Saúde e o CONAMA 357 de 2005 estabelecem que o valor máximo permitido de íons nitrato é de 10 mgL⁻¹. Na última década, a redução catalítica tem sido considerada um método promissor para remoção de íons nitrato em água. Nesse processo, um catalisador promove a redução seletiva dos íons nitrato a nitrogênio molecular, minimizando, ou preferencialmente inibindo, a formação secundária de íons nitrito ou amônio. Durante a redução catalítica do nitrato pode haver a formação da hidroxilamina, que está associada à mutagenicidade e a vários efeitos tóxicos agudos. A partir de uma solução contendo 100 mgL⁻¹ de NO₃⁻, foi realizada a reação de redução em reator de vidro, utilizando o catalisador 5% Pd - 2,5% Cu/ Nb₂O₅ preparado por impregnação sucessiva obtendo uma redução do nitrato de 99% (Figura 1) e a concentração do íon nitrito e amônio foram 0,00 e 7,92 mgL⁻¹, respectivamente. Após 420 minutos de reação foi feita a determinação de hidroxilamina por HPLC-DAD, seguindo as condições descritas na Tabela 1. Na análise do padrão foi observada a hidroxilamina com tempo de retenção de 21,33 minutos. As amostras retiradas das reações obtiveram perfil cromatográfico semelhante ao do branco. Nossos resultados demonstram que não existe formação de hidroxilamina nas condições reacionais utilizadas nesse trabalho.

Figura 1: Conversão do nitrato utilizando o catalisador 5%Pd-2,5%Cu/Nb₂O₅.

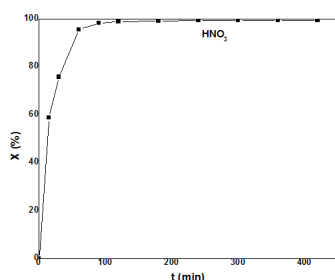


Tabela 1: Condições cromatográficas para determinação da hidroxilamina.

| Detector de arranjo de díodos (DAD) | |
|--|--|
| Coluna | Zorbax Eclipse XDB-C18 (4.6 x 250 mm) 5 micron. |
| Fase móvel | 100 mL de acetonitrila; 5 mL de ácido fosfórico 0,1 molL ⁻¹ ; 120 mg ácido octanosulfônico; 120 mg acetato de sódio; 70 mg de dihidrogenofosfato de potássio e água milli-q para completar 1 L. |
| Quantidade de amostra | 20 µL |
| Fluxo | 1,00 mLmin ⁻¹ |
| Comprimento de onda | 250 nm |

- 1 SOARES, O. S. G. P., ÓRFÃO, J. J. M., PEREIRA, M. F. R., Activated Carbon Supported Metal Catalysts for Nitrate and Nitrite Reduction in Water, *Catalysis Letters*, 2008.
2 SOARES, O.S.G.P., Nitrate removal by catalytic reduction with hydrogen, Dissertação de Doutorado, Universidade do Porto, Porto, 2010.

Área: ORG

Nº de Inscrição: 00423

(Bio)Electrochemical reduction of acetophenone: A viable alternative to the production of the corresponding alcohol

Eduarda Boing Pinheiro (IC),¹ Patrícia Bulegon Brondani (PQ),^{1*} Eduardo Zapp (PQ).¹

eduardaboingpinheiro@gmail.com; p.b.brondani@ufsc.br.

¹Departamento de Ciências Exatas e Educação, UFSC-Blumenau.

Palavras Chave: *Organic Synthesis; Electrochemistry; Biocatalysis; Bioelectroreduction*

Highlights

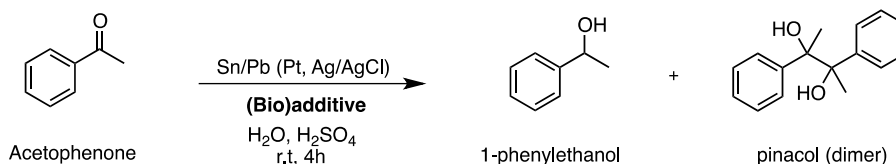
- (Bio)Electroreduction of acetophenone;
- Production of the corresponding alcohol as major product;
- The presence of cheap (bio)additives can help to reduce the dimerization;

Resumo/Abstract

Electrosynthesis is a technique that uses the transfer of electrons combined with a chemical reaction. In spite its great potential and nice features, such as being cheap, mild and ecologic friendly, electrochemistry is still underused in organic synthesis.

Biocatalysis, a well-known tool in organic synthesis, has already been coupled with electrochemistry, but this is uncommon when applied directly in a chemical transformation.¹⁻⁴

The main goal of this study is to develop a new methodology for the reduction of ketones (acetophenones) applying (Bio)electrosynthesis. The electroreduction of ketones is a challenge leading, most of the time, to the dimer and not to the desired corresponding alcohol. (Bio)additives are being tested to stabilize the intermediates and produce the alcohol as major product.¹⁻⁴



In order to optimize the methodology different work electrodes (C, Al, Sn/Pb), solvents (acetonitrile, ethanol, water), electrolytes (TBAF, Na₂SO₄, H₂SO₄), additives (β-Cyclodextrin and commercially available lipases such as Novozym 388, Cal-B 435, etc), time and temperature were tested. The best outcome was reached using Sn/Pb as work electrode, Pt as counter electrode, Ag/AgCl as reference electrode, H₂O as solvent, H₂SO₄ as the electrolyte and 2.0 V of potential at room temperature in 4h. Good conversion in favor of the alcohol was observed by the use of the (bio)additives. The progress of the reaction was checked using TLC, GC analysis and UV spectroscopy. Further analysis using NMR observation and cyclic voltammetry are planned. Other ketones will also be tested.

¹Comptes Rendus Chim. 14, 745–765 (2011).

²Electrochemistry 77, 1002–1009 (2009).

³J. Org. Chem. 62, 2494–2499 (1997).

⁴J.Chem. Soc. Rev. 26, 157–167 (1997).

Electrodeposition of copper-indium alloys from non-aqueous solutions

David A. Assis (PG), Camila P. Sousa (PQ), Othon S. Campos (PQ), Pedro de Lima-Neto (PQ), Adriana N. Correia (PQ)

adriana@ufc.br; davidalvesace@gmail.com

Grupo de Eletroquímica e Corrosão, DQAFQ-UFC, Campus do Pici, 60440-900, Fortaleza-CE-Brazil

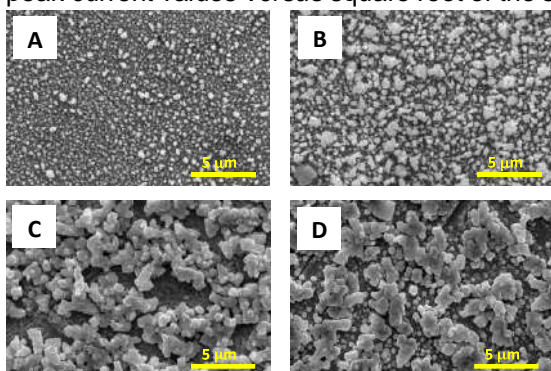
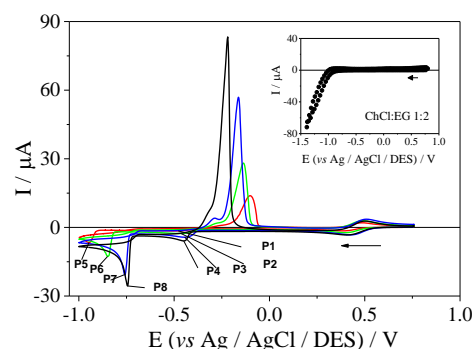
Palavras Chave: Eletrodeposição, Cobre-índio, Solvente não aquosos, Cloreto de colina, Etilenoglicol, Platina.

Highlights

Reduction processes of CuIn were diffusion-controlled.
Temperature has influence on the morphology of CuIn deposits.
Higher indium contents were obtained at higher temperatures.

Abstract

Electrodeposition is a versatile method to obtain advanced materials, like coatings or thin layers. In aqueous solutions electrodeposition presents some limitations, such as the hydrogen evolution reaction which reduces its efficiency and diminishes the quality of the electrodeposits. An alternative to water as solvent is the use of the deep eutectic solvents (DES) based on choline chloride (ChCl) and ethylene glycol (EG). This type of solvents has some advantages, such as: low vapor pressure, wide electrochemical window and solvability of many metallic salts. Therefore, the objective of this work was to obtain and to characterize the electrodeposits of copper-indium alloys (CuIn) using equimolar quantities ($50 \times 10^{-3} \text{ mol L}^{-1}$) of CuCl_2 and of InCl_3 in a DES containing a 1: 2 molar ratio of ChCl:EG. Voltammetric experiments were conducted with inversion potential of -1.0 V between $23.5 \text{ }^\circ\text{C}$ and $80 \text{ }^\circ\text{C}$, which exhibited two reduction peak potentials for Cu^{2+} ions reduction ($P_1 = -0.49 \text{ V}$, $P_2 = -0.47 \text{ V}$, $P_3 = -0.45 \text{ V}$ and $P_4 = -0.45 \text{ V}$) did not affected those values. For In^{3+} ions reduction, the reduction peak potential ($P_5 = -0.95 \text{ V}$, $P_6 = -0.85 \text{ V}$, $P_7 = -0.76 \text{ V}$ and $P_8 = -0.74 \text{ V}$) were shifted towards less negative values. After inversion potential, the oxidation peak potential of the alloy was shifted towards more negative potentials and the current intensity was increased, meaning that the CuIn alloy has thermodynamic stability due to shifted the values of the peak potential. The dependence of peak current values versus square root of the scan rate was linear, indicating a diffusion-controlled processes.



Scanning electron microscopy (SEM) analysis were realized in electrodeposits obtained in different temperatures (from $23.5 \text{ }^\circ\text{C}$ and $80 \text{ }^\circ\text{C}$) at (A = -0.95 V , B = -0.85 V , C = -0.75 V and D = -0.75 V during 15 minutes). It was possible to conclude that the CuIn morphologies had changed significantly from dense and compact layer at $23.5 \text{ }^\circ\text{C}$ with reduced grains to layer with agglomeration of CuIn porous and nonuniform particles at $80 \text{ }^\circ\text{C}$. Although the Cu:In ratio was equimolar in the bath composition, analysis by energy dispersive X-ray spectroscopy showed a decrease of %In (from 63% to 57%) and an increase of %Cu (from 37% to 43%) when temperature increases. Thus, it was possible to conclude that CuIn alloys obtained in ChCl:EG were

temperature-dependent with the value of the reduction potential of In^{3+} ions towards less negative values, and SEM images showed that the CuIn alloys more compact layer were obtained at higher temperatures.

Acknowledgments

CAPES, CAPES-PNPD, PRONEX-FUNCAP-CAPES, CNPq, FINEP.

Área: INO

Nº de Inscrição: 00428

bis-Benzimidazolium salts: A versatile catalysts for the selective conversion of carbon dioxide into cyclic carbonates or polycarbonates

Werberson de Almeida Bezerra (IC), *¹ Ângelo de Fátima (PQ),² Rafael Pavão das Chagas (PQ)¹

*E-mail: werberson.98@hotmail.com

¹Instituto de Química, UFG, Goiânia, GO, Brazil; ²Departamento de Química, UFMG, Belo Horizonte, MG, Brazil.

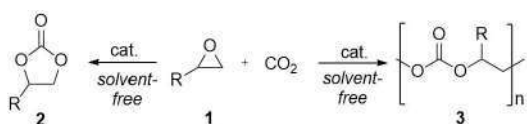
Keywords: Carbon dioxide, Cyclic carbonates, Organocatalysts, Indium(III) halide, Zinc(II) bis-benzimidazole complex, Homogenous catalysis.

Highlights

◆ A new catalytic system, based on the cooperation of protic salts and a Lewis acid additive, capable of selectively producing cyclic carbonates and polycarbonates from CO₂ was developed.

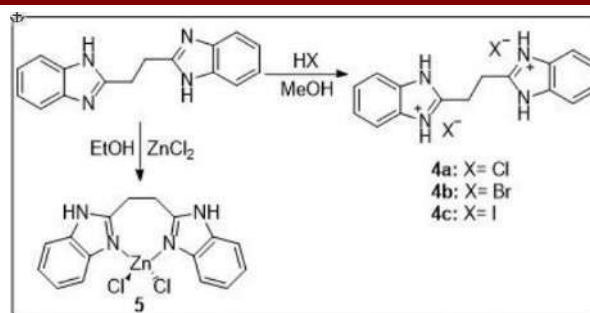
Abstract

Chemical fixation of carbon dioxide (CO₂), an inexpensive, abundant and renewable carbon source, considered a crucial strategy for mitigate the CO₂ emission and in turns to decrease the global warming caused by anthropogenic action. Therefore, the development of new catalytic methodologies is needed to overcome the kinetic and thermodynamic stability of CO₂. In this scenario, a very promising way for the effective CO₂ capture, is the selective transformation of CO₂ into cyclic carbonates **2** or polycarbonates **3**, through the coupling reaction of CO₂ with epoxides **1** (Scheme 1). Polycarbonates are candidates for biological applications, and in the automotive and electronic industries. Cyclic carbonates are electrolytes for Li-ion batteries, polar aprotic solvent, fuels additives and organic intermediates in the preparation of pharmaceuticals and others fine chemicals product.^{1,2}



Scheme 1. Synthesis of cyclic carbonates **2** and polycarbonates **3** from coupling of CO₂ with epoxides **1**.

In this work, we have synthesized zinc(II) complex bearing *bis*-benzimidazole ligand **5** and a new class of organocatalyst derived from protic *bis*-benzimidazolium salts **4a-c** (Scheme 2). These compounds were tested in the catalytic system for fixation of CO₂. When the protic salts was combined with indium(III) chloride, the reaction gives rise to an extremely active and selective catalytic system to produce cyclic carbonates (Table 1, entries 1-3). Alternatively, when the protic salts were combined with zinc(II) *bis*-benzimidazole complex **5**, the system showed to be useful for the production of polycarbonates (Table 1, entries 4-6).



Scheme 2. Synthesis of protic *bis*-benzimidazolium salts **4a-c** and zinc(II) *bis*-benzimidazole complex **5**.

Table 1. Coupling of CO₂ with propylene oxide (**1a**)^a

| Entry | Catalyst | Additive | Conversion (%) ^b | Selectivity (%) ^c | | TOF (h ⁻¹) ^d |
|----------------|-----------|-------------------|-----------------------------|------------------------------|------------------------|-------------------------------------|
| | | | | 2a ^f | 3a ^g | |
| 1 | 4a | InCl ₃ | 45 | 74 | 20 | 11.1 |
| 2 | 4b | InCl ₃ | 80 | 80 | 14 | 21.5 |
| 3 | 4c | InCl ₃ | 97 | 98 | 2 | 31.7 |
| 4 ^e | 4a | 5 | 18 | 0 | 96 | 14.4 |
| 5 ^e | 4b | 5 | 47 | 0 | 98 | 38.4 |
| 6 ^e | 4c | 5 | 41 | 11 | 55 | 22.5 |

^aReaction conditions: **1a** (25mmol), catalyst and additive (1mmol % each), 3h, 100°C, 30bar CO₂.^b Conversion of epoxide determined by ¹H NMR spectroscopy analysis of crude reaction mixture. ^c The selectivity criteria reflect the absence of other reaction products. ^d TOF= turnover frequency¹. ^e Catalysts (0,4mmol% each). ^f Propylene carbonate (**2a**). ^g Poly- propylene carbonate (**3a**).

In summary, we have developed a new catalytic system, based on protic *bis*-benzimidazolium salts cooperating with a Lewis acid additive, exceptionally active and easily modulable for the synthesis of cyclic carbonates or polycarbonates from CO₂ and epoxides. The optimal reaction conditions of each catalytic system have been systematically studied.

Acknowledgments

PIBIC/CNPq, FAPEG, CAPES (Financial code 001), FAPEMIG and LabRMN/UFG.

1. J. L. S. Milani et al., *J. CO₂ Util.*, 30 (2019), 100- 106.

2. J. L. S. Milani et al., *Chin. J. Catal.*, 39 (2018) 245-249.

Área: EDU

Nº de Inscrição: 00429

AS INSTITUIÇÕES DE ENSINO SUPERIOR BRASILEIRAS E SUAS RELAÇÕES GEOGRÁFICAS

Junfanlee Manoel O. Feliciano (IC);¹ Luana Cristeinsen Silva¹ (IC); Janaína F. de Ornellas (PQ)²

¹junfanleemanoel@hotmail.com; ²ornellas.uftm@gmail.com

¹ Curso de Licenciatura em Química, UFTM; ² Departamento de Educação em Ciências, Matemática e Tecnologias, UFTM.

Palavras Chave: *Instituição de Ensino Superior, Desigualdade Social, Políticas Públicas.*

Highlights

BRAZILIAN HIGHER EDUCATIONAL INSTITUTIONS AND THEIR GEOGRAPHICAL RELATIONS. This paper goal to present an overview of Brazilian IES and their geographic relationship.

Resumo/Abstract

Este trabalho apresenta resultados parciais da pesquisa de Iniciação Científica realizada no âmbito do Grupo FORPEC vinculado a Universidade Federal do Triângulo Mineiro (UFTM) que visa discutir as relações sobre a distribuição das Instituições de Ensino Superior (IES) no Brasil com sua região (localização). Assim, este resumo tem como objetivo apresentar o panorama das IES Brasileiras de acordo com a sua região, e ao mesmo tempo, apresentar a análise das possíveis relações entre a localização geográfica das IES com os investimentos que estas recebem. A pergunta que tentamos responder é: existe alguma relação entre a quantidade de IES e a região do Brasil em que estas se encontram? Para isso, foram analisados: 1) Documentos como Aspectos Fiscais da Educação no Brasil, disponibilizado pelo Tesouro Nacional; 2) Relatórios disponibilizados pelo INEP, como por exemplo, os microdados da Educação Superior (ES); 3) Nota estatística do Censo da ES 2016; e 4) também utilizamos como suporte à discussão estudos sobre a temática que estão disponíveis na literatura, como Sá, Moura e Vasconcelos (2007) e Barros (2015). A análise dos dados possibilitou encontrar como estão distribuídas as IES no Brasil, por região. Identificamos que existe uma concentração na região Sudeste, que representa 46,8% das IES, a região com a segunda maior concentração de IES é Nordeste com 19,9%, seguido do Sul com 16,8%, e Centro-Oeste com 10%. Já o, Norte é a região que tem o índice mais baixo com 6,5%. Percebemos que há uma centralização de IES em regiões com uma alta concentração de riqueza, consequência essa de uma lógica de mercado capitalista e mercantil da educação que não deixa claro as implicações diretas que essa possui sobre a realidade social destas diferentes regiões. Dentro desse panorama os dados indicam uma política de favorecimento de regiões que já estão em estágios mais avançados em relação à infraestrutura e investimentos, que é ditado pela concentração do capital que se retrata no quadro de IES privadas quanto das 2111 total 973 estão alocadas somente no Sudeste. Desta maneira pode-se constatar que os dados apontam uma problemática nas distribuições de IES no Brasil, que acaba por reproduzir e perpetuar desigualdades sociais e de oportunidade que se encontra em diversos níveis e setores evidenciado em diferentes regiões tanto nas condições de acesso às IES, como de qualidade existente nos diferentes níveis da educação e que se manifesta em condições estruturais e de recursos humanos bem como outros fatores. Assim a ES torna-se uma máquina de produção de desigualdade no Brasil, e para amenizar essas implicações [...] é necessário priorizar, em termos de recursos para a educação, sucessivamente: os estados mais pobres e, nestes, as regiões mais pobres; priorizar as regiões mais pobres dos estados com maior poder econômico; priorizar as regiões de maior déficit das áreas metropolitanas. Dessa forma procurar-se-á garantir a equalização educacional digna para todos os cidadãos brasileiros. (CONED, 1997, p. 38) papel assumido pelas IES públicas que busca dar acesso, garantir a permanência com ensino de qualidade a pessoas que vivem em regiões tidas como periféricas e que não é de interesse do setor privado. Com isto, "a expansão da ES, para ser democrática e não se tornar mera massificação, deve apoiar-se em pelo menos dois componentes: igualdade de condições de acesso, de escolha de cursos e carreiras a cursar, e de permanência com sucesso até a titulação." (SGUISSARDI, 2014, p. 81)

Síntese e caracterização de nanopartículas de prata estabilizadas com a enzima tripsina

José G. M. Siqueira (PG)^{1*}, Leidiane A. Santos (PG)¹, Elaine A. de Farias (PQ)², Marccus V. A. Martins (PQ)³, Jocélia P. de C. Oliveira (PQ)¹

guilhermejms22@hotmail.com

¹Unidade Acadêmica especial de Química, Universidade Federal de Goiás / Regional Catalão – UFG/Regional Catalão;

²Instituto Federal de Goiás, Campus Inhumas – IFG / Inhumas. ³Instituto Federal Goiano, Campus Avançado Catalão – IF Goiano / Catalão

Palavras Chave: Nanomaterial, nanopartículas de prata, tripsina.

Highlights

Synthesis and characterization of silver nanoparticles stabilized by trypsin.

Synthesis of silver nanoparticles with reduction of silver nitrate by sodium borohydride and stabilized trypsin, Characterization UV-VIS spectroscopy and scanning electron microscopy.

Resumo/Abstract

As nanopartículas (NPs) tem atraído grande interesse em diversas pesquisas devido ao melhoramento de suas propriedades físico-químicas e biológicas.¹ E ao se tratar de nanopartículas de prata (NpAg), esses nanomateriais são extensivamente aplicados em áreas como catálise, material bactericida associados a biomoléculas, etc.² Dentro desse contexto, realizou-se a síntese e caracterização da nanopartícula de prata estabilizada com a enzima tripsina (Tri) por meio das técnicas de Espectroscopia na região do Ultravioleta e Visível (UV-Vis) e Microscopia Eletrônica de Varredura (MEV). A síntese foi realizada a partir da redução dos íons Ag^+ com borohidreto de sódio (NaBH_4) na presença da enzima tripsina, como agente de estabilização. Espectroscopicamente, observa-se na figura 1 (linha preta) uma banda em 300 nm referente às transições eletrônicas dos elétrons presentes nos orbitais d do íon Ag^+ . Após a síntese na presença da enzima observa-se nitidamente uma banda com absorção máxima na região de 407 nm, típica de prata em tamanho nanométrico. Por meio da imagem de MEV (figura 2) foi possível obter informações morfológicas e geométricas das Nps. Nesta figura, observa-se nanopartículas com geometria aproximadamente esférica e diâmetro variando de 5 a 30 nm. Esses resultados preliminares indicam que a enzima tripsina atua como uma boa matriz de estabilização para nanopartículas de prata, possibilitando futuras aplicações em testes enzimáticos.

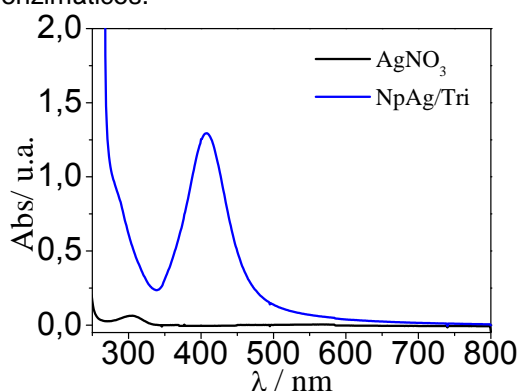


Figura 1: Espectros UV-Vis para AgNO_3 (preto) e NpAg/Tripsina (azul).

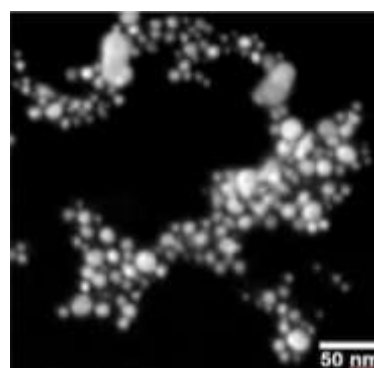


Figura 2: Imagem de Microscopia Eletrônica de Varredura das NpAg/Tripsina.

1. ZHANG, X. Nanopartículas de Ouro: Recentes Avanços nas Aplicações Biomédicas. *Cell Biochemistry and Biophysics*, v. 72, n. 3, p. 771–775, 2015.
2. Liu, J; Yu, S; et al. Métodos para Separação, Identificação, Caracterização e Quantificação de Nanopartículas de Prata. *TrAC Trends in Analytical Chemistry*, v. 33, p. 95–106, 2012.

Agradecimentos/Acknowledgments

A UFG/Regional Catalão e a Capes pela bolsa de mestrado concedida.

Investigation on the binding mode of chromenes with DNA: a molecular docking and molecular dynamic approaches

Edjan Carlos Dantas da Silva (PG),^{1*} Marina M. da Silva (PG),¹ Maria Dayanne A. Dantas (PG),¹ Josué C. C. Santos (PQ),¹ Isis M. Figueiredo (PQ),¹ Suvankar Das (PQ),² Goutam Brahmachan (PQ),² Ângelo de Fátima (PQ),³ Cleiton M. Silva (PG),³ Ana Lúcia T. Góis Ruiz (PG),⁴ Thiago Mendonça de Aquino (PQ)^{1,*}

thiago.aquino@iqb.ufal.br

¹Instituto de Química e Biotecnologia, UFAL, Brazil; ²Departamento de Química, Universidade de Visva-Bharati, India; ³Departamento de Química, UFMG, Brazil; ⁴Centro Pluridisciplinar de Pesquisas Químicas, UNICAMP, Brazil

Keywords: Chromenes; Molecular docking; Molecular dynamic; ctDNA; Intercalation; Cancer.

Highlights

Molecular Docking and Molecular Dynamic studies of active chromenes against cancer cell lines and DNA shown that these compounds intercalated in the DNA bases and the results are according with experimental spectroscopic data.

Abstract

Chromenes are a common structural motif found in variety of natural and non-natural products that possesses great medicinal interest due to their wide range of biological activities, such as antitumor, anti-inflammatory, among others. In addition, some of them have been used as photochemical dyes for protein labeling and DNA interaction studies. By using spectroscopic techniques, such as UV-vis and molecular fluorescence, we have demonstrated that the antiproliferative effects of eight chromenes (**1-8**) against human cancer cell lines are, in part, due to their ability to bind to ctDNA model (unpublished data). Indeed, the interaction of **1-8** with ctDNA furnished a supramolecular complex and competition studies employing ethidium bromide associated with KI suggests that such interaction occurs *via* intercalation. In order to validate the binding mode of **1-8**, molecular docking (MD) and molecular dynamic (MD) were performed. For the molecular modeling studies, the dodecamer structure was taken from Protein Data Bank (code PDB: 1BNA). A blind docking was performed using Autodock Vina[®]. The MD was performed using GROMACS[®] MD package. The CHARM99 force fields were applied to the DNA and ligands structures, using the TIP3P as solvation model. In the first stage, the ligands and DNA structure were fixed in a 1.0 nm box cubic, and the water molecules and ions were added to the system, and they were minimized by the 10.000 and 20.000 steps, respectively, by the conjugate gradient method. The system was submitted to the NVT ensemble up to 300 K in 1 ns with a time interval of 2 fs. Then, the system density was equilibrated under NPT ensemble conditions during 1 ns. Finally, the simulation was performed at 40 ns. Molecular docking analysis revealed that all compounds interacted with the larger DNA groove by non-covalent interactions. After, these conformations were chosen as the initial point for MD simulations. After 40 ns of simulation, MD revealed that all compounds intercalated between the DNA base pairs, as well as modifications in the conformation, separation of some base pairs and double helix elongation of DNA, due to the presence of the ligands between the DNA base pairs. These deformations in the trajectories of the DNA atoms can also be seen through the RMSD plots. In the first 5 ns of simulation, it is possible to observe a greater deviation of the DNA atoms, caused by the change in the mode of interaction of the compounds. After, the RMSD values decrease and remain stable until the end of the simulation, demonstrating the stability of the interactions for all derivatives by intercalation mode. The means of these deviations did not exceed 0.25 nm, evidencing that the DNA did not denature during the simulations. Among the compounds analyzed, chromene **4** showed lower RMSD values during MD simulation, evidencing a higher stability of this intercalation mode. This result may explain the fact that this compound presented higher affinity in the fluorescence assays and better activity in the cytotoxicity assays, suggesting that DNA may be the main biological target for cytotoxicity against cancer cell lines. Finally, for all derivatives studied, the Van der Waals and H-bond interactions observed after DM study are in accordance with negative values of the thermodynamic parameter ΔS and ΔH calculated by molecular fluorescence.

Acknowledgment: FAPEAL, FAPEMIG, CNPq and CAPES.

Área: QVE*(Inserir a sigla da seção científica para qual o resumo será submetido. Ex: ORG, BEA, CAT)***Nº de Inscrição: 00433***(Inserir o número de inscrição do autor que fez a submissão)*

Microwave assisted 5-HMF production from water-soluble sugars using betaine-based natural deep eutectic solvents (NADES)

Gustavo R. Gomes (PG),^{1*} Julio C. Pastre (PQ),¹

gustavo.rodriques@iqm.unicamp.br; jpastre@unicamp.br

¹*Institute of Chemistry, State University of Campinas- UNICAMP*

Keywords: HMF; Natural deep eutectic solvents; Betaine; Fructose; Sucrose

Highlights

- Ethyl acetate was the best extraction solvent for HMF production in biphasic system;
- Tartaric acid was the HBD for conventional heating, however malic acid had the best performance under microwave irradiation;
- HMF was obtained in 94% yield from fructose and in 72% yield from sucrose using BHC: malic acid: water (1:1:1) deep eutectic solvent under microwave irradiation.

Resumo/Abstract

The synthesis of bio-based building blocks, such as furan derivatives, is usually made under conventional heating, such as using oil baths. However, microwave irradiation is a faster and cleaner method to synthesize platform chemicals in good yields. In this work, HMF was successfully produced from fructose-based carbohydrates using betaine hydrochloride (BHC) based natural deep eutectic solvents as solvent/catalyst under microwave irradiation. Firstly, a study of fructose dehydration under conventional heating was carried out in order to evaluate the system. Ethyl acetate was the best extraction solvent among 12 green solvents evaluated for HMF production. Five different NADES were applied, using the following acids as hydrogen bonding donors (HBD): citric, malic, tartaric, lactic and glycolic acids for fructose dehydration. Citric, malic and tartaric acids provided good yields from fructose (above 60%) in both conventional heating and microwave irradiation. Tartaric acid was the HBD of choice for conventional heating, however malic acid had the best performance under microwave irradiation (**Table 1**). For the microwave experiments, a 2³ factorial design (factors: time, temperature and stirring) was carried out in order to optimize HMF yields; the principal contribution being the interaction between time and temperature.

Table 1. Comparative study between conventional and microwave heating for fructose dehydration.

| Heating | HMF yield (%) | | |
|---------------------------|-------------------------|-------------------------|-------------------------|
| | BHC/TA/H ₂ O | BHC/MA/H ₂ O | BHC/CA/H ₂ O |
| Conventional ^a | 76 ± 2 | 60 ± 3 | 66 ± 1 |
| Microwave ^b | 81 ± 2 | 94 ± 1 | 82 ± 2 |

Conditions: Carbohydrate: 0.1 mmol; NADES: 1.0 mmol; Ethyl acetate: 3 mL,

^a t: 45 min; T: 110 °C; stirring: 600 rpm;

^b t: 11 min; T: 140 °C; stirring: 600 rpm

After the experiments involving fructose, a 2² factorial design (factors: time and temperature) was carried out for the sucrose dehydration using the BHC/MA/H₂O system. The highest HMF yield from sucrose was 72 %. Citric and tartaric acids as HBD provided low HMF yields (40 and 32% respectively). The work is now in progress to evaluate HMF production mediated by NADES using raw feedstocks, such as sugarcane molasses.

Short-chain alcohols as potential systems to capture CO₂: DFT simulation

Gabriella R.B. Correia (IC),¹ Rodolfo Goetze Fiorot (PG),^{1,2} José Walkimar de M. Carneiro (PQ)²
 correia.gabriella@outlook.com; rodolfo.fiorot@ifrj.edu.br; jose_walkimar@id.uff.br

¹Instituto Federal de Educação, Ciências e Tecnologia do Rio de Janeiro (IFRJ)-campus Realengo, Rio de Janeiro, 21715-000, Brazil. ²Instituto de Química, Universidade Federal Fluminense (UFF), Niterói, Rio de Janeiro, 24020-141, Brazil.

Keywords: Carbon dioxide capture, Molecular modeling, Global warming.

Highlights

The amount of carbon dioxide released into the atmosphere has increased, intensifying global warming and its consequences. This computational chemistry study aims to develop new systems based on short-chain alcohols to capture CO₂.

Abstract

The environmental impacts caused by the increase of atmospheric carbon dioxide are alarming and the expectations are catastrophic. To reverse this situation, the investment in Carbon Capture and Storage (CCS) technologies is growing.¹ In this work, new systems based on the association of short-chain alcohols and pyridine were designed and had their efficiency in the CO₂ capture evaluated by computational methodology, according to the proposed mechanisms (**Figure 1**).

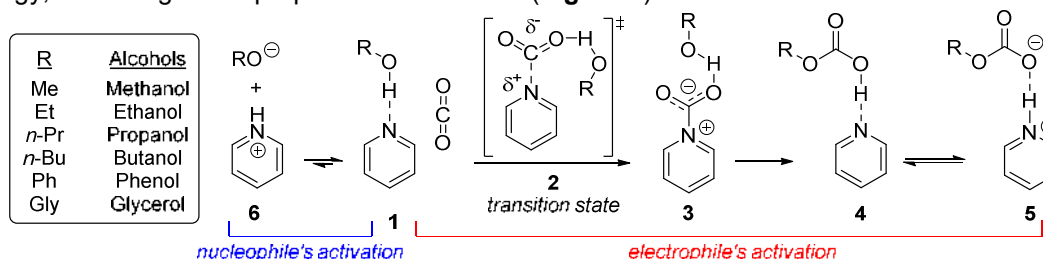
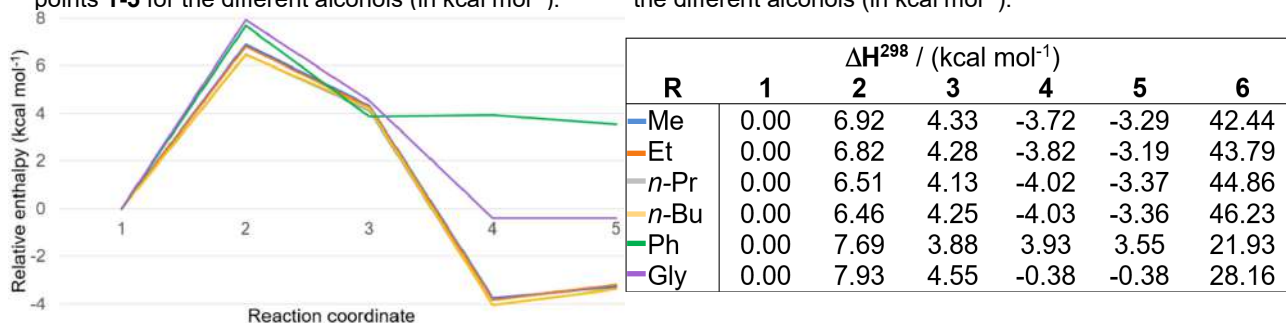


Figure 1: Mechanisms proposed to CO₂ capture by nucleophile's and electrophile's activation.

Initially, we proposed the electrophilic activation of CO₂ by a base, forming the zwitterion **3**, which undergoes alcoholysis to produce the carbonate **4**. The equilibrium between **4** \rightleftharpoons **5** was also evaluated. The activation of the nucleophile was considered as well: deprotonation of alcohol to form alkoxide, which may act as CO₂ scavenger (pair **6**). The stationary points were optimized at the CAM-B3LYP/6-311+G(d,p) level and characterized by frequency calculation. Implicit solvation (IEFPCM) was modeled along the pathway with the same alcohol, except for phenol and glycerol (solvent=water).

Graph 1: Enthalpy change at 298 K (ΔH^{298}) for points **1-5** for the different alcohols (in kcal mol⁻¹).

Table 1: Enthalpy change at 298 K (ΔH^{298}) for points **1-6** for the different alcohols (in kcal mol⁻¹).



Despite the energetic increase for nucleophilic activation (**6**), the path regarding electrophilic activation demonstrated that simple alcohols can constitute potentially efficient systems to capture CO₂, with energy release in the formation of the products and low barrier.

¹ Santos, T. C. Ronconi, C. M. *Revista Virtual de Química*, **2014**, *6*, 112-130; D'alessandro, D.; Smit, B.; Long, J. R. *Angewandte Chemie International Edition*, **2010**, *49*, 6058-6082.

Área: ORG

Nº de Inscrição: 00439

Use of Tribromoisocyanuric Acid / Triphenylphosphine System for the Conversion of Aldoximes to Nitriles under Appel Conditions

Tatiana Medeiros Boaventura (IC), Vitor S. C. de Andrade (PG), Marcio C. S. de Mattos* (PQ)

tatimb.ufrj@gmail.com

Departamento de Química Orgânica, Instituto de Química, UFRJ

Palavras Chave: Nitriles, Aldoximes, Tribromoisocyanuric acid / PPh₃, Appel reaction

Highlights

- New methodology for preparation of nitriles from aldoximes
- Easily available reagents
- Mild reaction conditions

Resumo/Abstract

Nitriles are important precursors in organic synthesis, used as intermediates for the preparation of amides, carboxylic acids, amines, and nitrogen-containing heterocycles. Among many reported procedures for their synthesis, dehydration of aldoximes is one of the cleanest routes, avoiding inorganic cyanides.¹

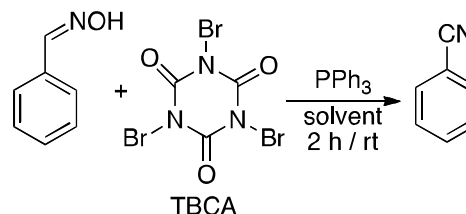
Recently, we have been exploring the chemistry of tribromoisocyanuric acid (TBCA) as a green reagent for electrophilic bromination of diverse reactions.² One of these approaches involves the generation of the Appel reagent ([Br-PPh₃]⁺) to prepare alkyl bromides, esters and amides.³

Herein we present the study of the TBCA/ PPh₃ system for the conversion of aldoximes to nitriles via Appel reaction.

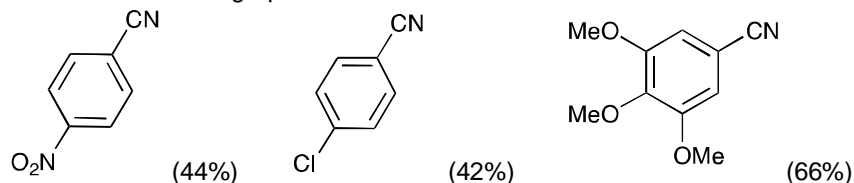
First, it was done an optimization of the reaction using benzaldoxime as a model substrate, obtaining chromatographic yields of benzonitrile (20 – 75%).

| PhCHNOH/PPh ₃ /TBCA | Solvent | Yield (%) |
|--------------------------------|---------------------------------|-----------|
| 1/0,5/1,5 | CH ₂ Cl ₂ | 68 |
| 1/0,5/2 | CH ₂ Cl ₂ | 75 |
| 1/0,5/2 | MeCN | 20 |
| 1/0,5/2 | CH ₂ Cl ₂ | 35 * |

* P(OPh)₃ used in the place of PPh₃



Using these optimized conditions, we extended the methodology to other aldoximes. The Appel reaction was performed under mild conditions (rt, fast reaction, no special equipment) and furnished the corresponding nitriles after chromatographic column.



1. Ghorbani – Vaghei, R.; Shiri, L.; Ghorbani- Choghamarani, A., *Chin. Chemic. Lett.*, **2013**, *24*, 1123

2. de Mattos, M. C. S.; Esteves, P. M.; de Almeida, L. S., *Cur. Org. Synth.*, **2014**, *1*, 94

3. de Mattos, M. C. S.; de Andrade, V. S. C., *Cur. Org. Synth.*, **2015**, *12*, 309

Agradecimentos/Acknowledgments

CNPq / PIBIC

42ª Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química: Eixos Mobilizadores em Química

Chemical Composition and Antibacterial and Antifungal activities from Leaves Essential Oil of *Psidium myrtoides* O. Berg

Francisco J. T. Aquino (PQ)^{1*}, Renieidy F.C. Dias (PG)^{},¹ Luis C. S. Cunha, (PQ),² Sergio A. L. Morais(PQ)¹, Alberto de Oliveira (PQ)^{1*}, Maria A. L. V. Ambrósio (PQ),³ Carlos H. G. Martins(PQ)³, João M. Souza (IC)⁴. Email: franciscojose.torresdeaquino@gmail.com*; flavia.clemente@ufrgs.br****

¹ Núcleo de Pesquisa em Produtos Naturais, Universidade Federal de Uberlândia, CEP 38400-902, Uberlândia-MG;²Núcleo de Estudos em Alimentos e Produtos Naturais – Instituto Federal de São Paulo, CEP 18707-150, Avaré-SP. ³ Laboratório de Pesquisa em Microbiologia Aplicada, Universidade de Franca, CEP 14404-600, Franca-SP,. ⁴Núcleo de Bioprospecção em Produtos Naturais – Instituto Federal do Triângulo Mineiro, CEP 38064-790, Uberaba-MG.

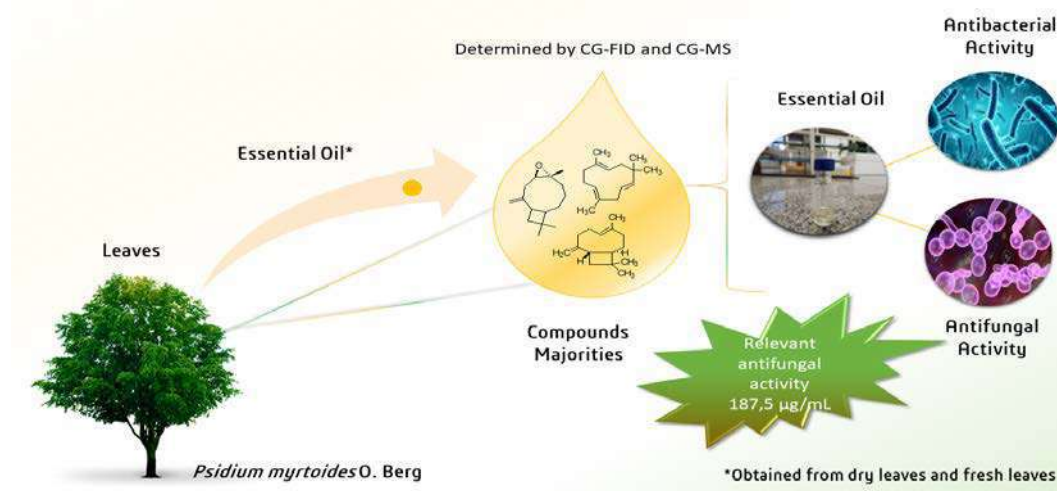
Palavras Chave: *Psidium myrtoides* O. Berg; Essential Oil; Chemical composition; Antimicrobial activities.

Highlights

The aim of the study was characterize by CG-MS and CG-FID the chemical composition of the essential oil from *Psidium myrtoides* O. Berg leaves and test the antibacterial and antifungal activity.

Resumo/Abstract

The essential oil (EO) from fresh and dry leaves from *Psidium myrtoides* O.Berg was obtained by hydrodistillation and analysed by GC–MS and CG-FID. The major components of the EO were trans-caryophyllene (18.02%), alpha-humulene (13.56%), oxide caryophyllene (20.66%). However, the quantitative percentual of the components of the EO from dry leaves were trans-caryophyllene (27.38%), alpha-humulene (16.18 %), oxide caryophyllene (11.41%). The EO of the fresh leaves and dry leaves *P. myrtoides* O. Berg was tested against seven bacterial and three yeasts by the microdilution broth method (MBM). The oils of the fresh and dry leaves exhibited moderate activity against *Streptococcus mutans*, *Streptococcus mitis* and *Aggregatibacter actinomycetemcomitans* (MICs values of 200 µg mL⁻¹), and *Streptococcus sanguinis*, *Porphyromonas gingivalis*, *Fusobacterium nucleatum*, *Actinomyces naeslundii* with minimum inhibitory concentrations (MICs) of 400 µg mL⁻¹. The fresh and dry EO showed a relevant potential to inhibit the growth of *Candida glabrata* (MIC values 187.5 µg mL⁻¹ and 375 µg mL⁻¹, respectively). Both oils also showed activity against *C. albicans* and *C. tropicalis* with MIC values ranging from 375 to 1500 µg mL⁻¹.



Agradecimentos/Acknowledgments

CAPES, FAPEMIG, IQ-UFU, UNIFRAN, NuPPEN, IFTM.

PROPRIEDADES DE MEMBRANAS DE ACETATO DE CELULOSE COM EXTRATO DA CASCA DE TANGERINA (*Citrus reticulata*).

Igor F. Valezan (IC),¹ Nathan P. A. V. da Costa (IC),² Thais A. Walber (IC),³ Morgana Souza (PG),⁴ Edivandro Giroto (PQ),⁵ Anna P. Piovezan (PQ),⁴ Luiz A. Kanis (PQ),⁴ Rachel F. Magnago (PQ)^{6*}.

igorvalezan@gmail.com; rachelfaverzanimagnago@gmail.com

¹Engenharia Química, Unisul; ²Engenharia Ambiental e Sanitária, Unisul; ³Medicina; ⁴Programa de Pós-Graduação em Ciências da Saúde, Unisul; ⁵Laboratório de Cristais Líquidos, UFSC; ⁶Programa de Pós-Graduação em Ciências Ambientais, Unisul.

Palavras Chave: Bioembalagem, Casca da tangerina, *Citrus reticulata*, Embalagens ativas, Atividade antimicrobiana.

Highlights

Properties of cellulose acetate membranes with tangerine peel extract (*Citrus reticulata*). Incorporation of tangerine peel extract in cellulose acetate membranes. Inhibition of strains from the use of the extract of Tangerine. Potential of biomass in the production of active packaging.

Resumo/Abstract

Material para bioembalagem foi obtido por incorporação de 100 mg extrato de casca de tangerina (*Citrus reticulata*, ECT) em 1 g de acetato de celulose (CA) em solução de acetona, seguido de evaporação a temperatura ambiente do solvente. O filme de CA/ECT mostrou-se homogêneo por IV e DSC. Na Figura 1 tem-se espectros IV do ECT (A), CA (B) e CA/ECT (C).

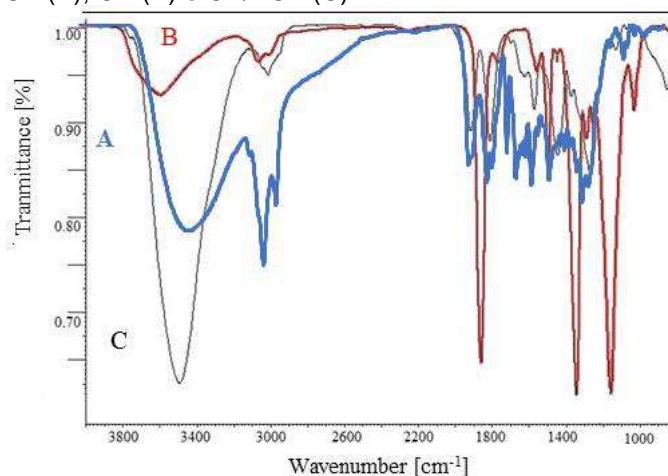


Figura 1. IV do ECT (A), CA (B) e CA/ECT (C).

No espectro de IV observa-se bandas típicas dos componentes puros, que estão presentes no CA/ECT, sendo 3447 cm^{-1} (OH), 2926 cm^{-1} (C-H alifático), 1750 cm^{-1} (C=O), 1633 cm^{-1} (aromático).

A curva DSC do CA/ECT apresentou dois picos amplos endotérmicos em 185 °C e 211 °C . O CA/ECT apresentou-se com capacidade de absorção de água 2% maior que CA e liberação do ECT do CA/ECT foi limitada a $0,020\text{ mg/cm}^2$ que ocorreu em até 8 h. A baixa absorção de água ($12,23\%$ em 24 h) faz que se tenha uma barreira com meio externo e a liberação do ECT foi suficiente para impedir o crescimento das cepas Gram positiva (*Staphylococcus aureus* ATCC 25923) e Gram negativa (*Pseudomonas aeruginosa* ATCC 0027). A presença do ECT levou a uma redução de 13% da resistência mecânica à tração e de 11% na deformação do filme. Esta biomassa mostrou-se potencial para bioembalagem ativas que podem gradualmente substituir embalagens não renováveis aproveitando descartes agrícolas.

Referência

Hafsa, J. et al. (2016). Food Science and Technology, 68, 356-364.

Comparative study of simple and rapid methodologies for the detection of formaldehyde in milk.

Jorge Paulino Neto (IC)¹, Arilson O. F. Filho (PQ),² Renato S. Oliveira (PG), Maria Clara S. Oliveira (TC) Bruna Oliveira (TC), Nathan Gomes (TC). Carlos Eduardo P. Silva (IC).

producao@macofren.com; ainesio@macofren.com

¹Macofren Tecnologias Químicas

Keywords: formaldehyde, milk, food security.

Highlights

In 2012 the biggest scandal of milk fraud in Brazil was launched. The fraudsters added agricultural urea, which has formaldehyde, to the milk. New agile methods of quality checking needed to be developed.

Abstract

A partnership between the Public Ministry and the Ministry of Agriculture, in 2012, discovered that some samples of raw and processed milk were adulterated with formaldehyde. This fact was attributed to the irregular addition of agricultural urea to milk, used as a reconstituent to mask the addition of water. According to IN MAPA No. 62/2011, method B of AOAC 931.08 is established as the official form of formaldehyde detection. Such method requires the distillation of the sample, which makes it extremely time-consuming for the industrial routine. Researches developed in the academy and industries allowed the deployment of some fast alternative methodologies. In this study, a comparison was made between three alternative products, about the time analysis and sensitivity to formaldehyde: the first by the State University of Londrina - UEL; the second by the University of Brasília - UnB and third by the Macofren Research Laboratory, still under industrial secrecy. Tests were conducted following manufacturers guidelines. The results obtained are shown in Table 1 and exemplified in Figure 1.

Table 1: Perception of presence (+) or absence (-) of formaldehyde for each method.

| Formaldehyde concentration | UEL | | | | UnB | | | | Macofren | | | |
|----------------------------|-----|-----|-----|-----|-----|-----|-----|-----|----------|-----|-----|-----|
| | 5' | 10' | 15' | 30' | 5' | 10' | 15' | 30' | 5' | 10' | 15' | 30' |
| 370 ppm | + | + | + | + | + | + | + | + | + | + | + | + |
| 94 ppm | + | + | + | + | + | + | + | + | + | + | + | + |
| 51 ppm | + | + | + | + | - | + | + | + | + | + | + | + |
| 21 ppm | + | + | + | + | - | - | - | - | + | + | + | + |
| 15 ppm | - | + | + | + | - | - | - | - | - | + | + | + |
| 9 ppm | - | - | + | + | - | - | - | - | - | + | + | + |
| 5ppm | - | - | + | + | - | - | - | - | - | + | + | + |
| 3,7 ppm | - | - | - | - | - | - | - | - | - | - | - | - |

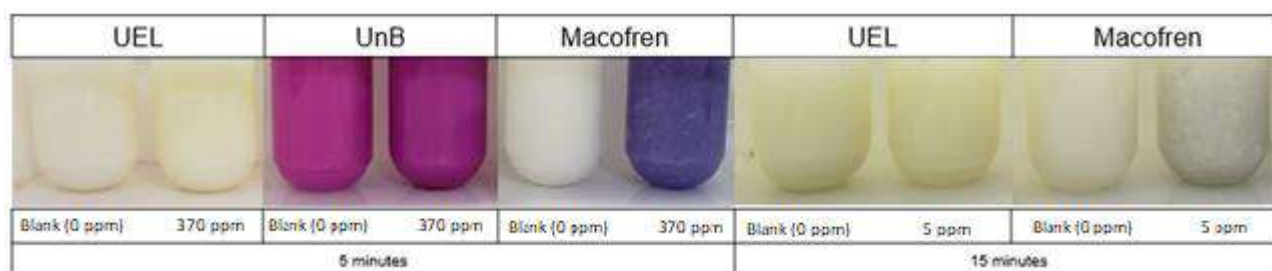


Figure 1: Photographs taken at the times, concentrations and methods indicated in the image.

The methods developed at UEL and Macofren have been more sensitive, yet they are less sensitive than the official method. Other methods will be evaluated in the course of the study.

Acknowledgments

To all employees of Macofren Chemical Technologies.

Área: EDU

Nº de Inscrição: 00445

Percepções sobre a influência da iniciação científica (IC) na vida acadêmica de docentes e estudantes de pós-graduação.

Ariane Carolina Ferreira Beltrame (IC)*, Alessandra Stevanato (PQ)¹.

ariane_beltrame@hotmail.com*, stevanato@utfpr.edu.br

¹Universidade Tecnológica Federal do Paraná (UTFPR) – Câmpus Londrina, Av. dos Pioneiros, 3131 CEP 86036-370 Londrina – PR.

Palavras Chave: Iniciação Científica, Pós-Graduação, Docentes, Pós-graduandos, Percepções.

Highlights

Perceptions about the influence of scientific initiation (CI) on the academic life of teachers and postgraduate students. Teachers and graduate students' view on the importance and influence of scientific initiation in academic life and professional growth.

Resumo/Abstract

O conceito de iniciação científica (IC) foi construído dentro das universidades brasileiras com a finalidade de imergir o aluno da graduação no mundo da ciência, das técnicas científicas e do desenvolvimento de projetos de pesquisa. Nessa perspectiva a criação desse programa permitiu uma aproximação intensa entre as vertentes: ensino e pesquisa, teoria e prática e graduação e pós-graduação (BERNARDI, 2003; CABERLON, 2003; DAMASCENO, 1999; ALMA, 2003, apud MASSI, Luciana; QUEIROZ, Salete Linhares, 2010). Para Calazans (2002) essa aproximação, permite ao aluno de IC o desenvolvimento de “habilidades” acadêmicas que contribuem para uma formação (profissional e pessoal) de qualidade. Sendo assim, essa pesquisa tem por objetivo verificar a influência e o impacto da IC na vida acadêmica de um grupo de docentes e estudantes de pós-graduação da área de química, bem como suas percepções a respeito dessa pesquisa científica. Para isso, foi desenvolvida uma pesquisa virtual, por meio de um questionário eletrônico semi-estruturado com 20 profissionais e estudantes de universidades públicas dos Estados do Paraná e São Paulo, em que 11 são professores e 9 acadêmicos da pós-graduação. As questões que nortearam a pesquisa foram: 1) Durante a graduação você fez parte de algum projeto de iniciação científica? 2) A experiência como aluno de iniciação científica teve influência na sua escolha de cursar a pós-graduação? Ela foi relevante no ingresso ou durante a sua pesquisa? 3) Você atua como docente em alguma instituição de ensino superior? 4) Você orienta ou orientou aluno de iniciação científica durante a graduação ou na pós-graduação? 5) Levando em consideração a sua experiência profissional, você considera que alunos que frequentaram iniciação científica durante a graduação desenvolvem características e/ou habilidades específicas durante a pós-graduação devido a essa experiência? Se sim, explique. 6) Qual(is) característica(s) foi/foram desenvolvida(s) na pós graduação que são reflexos da iniciação científica? Fazendo uma análise dos dados coletados, percebeu-se que 95% dos entrevistados fizeram IC durante a graduação, 72,7% e 66,6% dos docentes e pós-graduandos, acreditam que a IC teve influência e foi relevante durante a pós-graduação e posteriormente. Dos professores entrevistados 45% atuam em instituições de nível superior e 65% já supervisionaram alunos de IC ao longo da carreira. Levando em consideração esses percentuais e fazendo uma categorização das respostas levantadas na questão 5, cerca 95% dos indivíduos pesquisados acreditam que a IC pode contribuir para o desenvolvimento de habilidades científicas, como: independência, autonomia, criticidade e liderança. Esse percentual complementa e confirma as respostas levantadas na questão 6, conforme é verificado nas falas: “As atividades da IC ajudam significativamente a postura científica. O aluno passa a desenvolver habilidades, tais como, escrita científica e trabalho colaborativo”, “Independência científica e autonomia de investigação para elucidar sistemas complexos”, “Senso de pesquisa, pró atividade, liderança, entre outros”. Essas dados evidenciam a relevância da IC para o desenvolvimento intelectual dos futuros pesquisadores.

REFERÊNCIAS

- [1] CALAZANS, Julieta. **Iniciação científica: construindo o pensamento crítico**. São Paulo: Cortez, 2002.
[2] MASSI, Luciana; QUEIROZ, Salete Linhares. Estudos sobre iniciação científica no Brasil: Uma revisão. **Cadernos de Pesquisa**, v. 40, n. 139, p.173-197, 2010.

Área: MAT

Nº de Inscrição: 00447

Síntese e estudo de propriedades ópticas de nanocompósito formado por nanopartículas de ouro, polímero condutor e complexo luminescente.

Maria Izabel Xavier Scapolan (IC),¹ Marcela Mohallem Oliveira (PQ),¹ Renata Danielle Adati (PQ),¹ izabelscapolan@gmail.com

¹Departamento Acadêmico de Química e Biologia - DAQBi, UTFPR.

Palavras Chave: Európio, Nanopartículas de ouro, Polipirrol, Luminescência, Nanocompósito.

Highlights

Synthesis and study of nanocomposite containing gold nanoparticles, conducting polymer and luminescent complex. Nanocomposite was obtained and their optical properties were studied.

Resumo/Abstract

O interesse por novos nanocompósitos tem crescido acentuadamente, a combinação de nanopartículas de metais e complexos de lantanídeos é interessante, sobretudo para o estudo das propriedades ópticas. O objetivo deste trabalho foi sintetizar um nanocompósito polimérico luminescente contendo nanopartículas de ouro (AuNP) e o complexo luminescente de európio, para futura aplicação em dispositivos ópticos. O nanocompósito foi obtido através de uma rota em etapa única, onde o monômero escolhido, o pirrol, que sofre polimerização oxidativa, foi utilizado para reduzir o precursor de ouro, HAuCl_4 , concomitantemente à sua polimerização, num meio reacional contendo o complexo luminescente $[\text{Eu}(\text{tta})_3(\text{H}_2\text{O})_2]$ (Eutta), bastante estudado devido à sua intensa emissão no vermelho. Em um balão de fundo redondo foi adicionado 5 μmol de $[\text{Eu}(\text{tta})_3(\text{H}_2\text{O})_2]$, diluídos em 10 ml de etanol, e 5 μmol HAuCl_4 , diluído em 10 mL de água. Sob agitação magnética, aproximadamente 500 μmol de pirrol, previamente destilado, foi adicionado. A solução progressivamente adquiriu cor esverdeada, escurecendo até tornar-se preta. Após 24h de reação a solução manteve a cor observada, e nenhum precipitado. A solução resultante foi analisada por espectroscopia de absorção no UV-Vis e fotoluminescência. Observou-se bandas em 465 e 550nm no espectro de absorção, tanto do sistema com ou sem o complexo de európio, que são atribuídas às bandas do polipirrol (Ppy) e de absorção plasmônica das AuNPs formadas, respectivamente, confirmando, portanto, a formação do nanocompósito. Os espectros de excitação de Eutta e nanocompósito (NPPyEutta) ambos apresentaram máximo em 377nm, além de absorção em 300nm para o complexo e 320nm para compósito, estas, atribuídas às transições do anel tiofeno da β -dicetona, o deslocamento de 20nm em relação ao espectro do

complexo está relacionado a interação do grupo funcional do ligante tta com as AuNP. Os espectros de emissão, exibem transições intraconfiguracionais características do íon európio, $^5\text{D}_0 \rightarrow ^7\text{F}_J$ ($J=0-4$). Na Figura 1 identifica-se que quando monitorados diferentes comprimentos de onda de excitação, a emissão do nanocompósito é alterada, em vermelho o espectro ($\lambda_{\text{exc.}} = 377\text{nm}$) exibe bandas em 420 e 490 nm devido a hidrólise parcial do complexo. A banda em 767nm associada aos fenômenos de espalhamento e/ou harmônicos será melhor investigada. Ao comparar os espectros do complexo e nanocompósito a transição hipersensível $^5\text{D}_0 \rightarrow ^7\text{F}_2$ diminui de intensidade, provavelmente devido ao quenching por proximidade de centros luminescentes e nanopartículas de ouro. A investigação de propriedades ópticas correlacionadas serão estudadas para outras concentrações de AuNps e complexo luminescente.

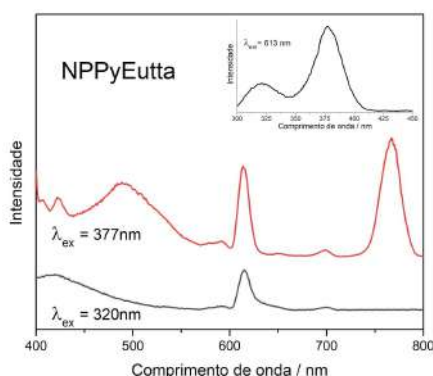


Figura 1: Espectros de emissão do nanocompósito. No canto superior direito, espectro de excitação.

Agradecimentos/Acknowledgments

CNPq e CAPES pelo auxílio financeiro. LSiNCOL-UTFPR e LAMAQ-UTFPR.

Synthesis of new 4-(phenilamino)quinoline-3-carbonitriles Derivatives as Potential Inhibitors of HIV-1 Reverse Transcriptase.

Beatriz F. Abreu (IC),¹ Guilherme S. Vergnano (PQ),¹ Alice Maria. R. Bernardino (PQ),² Júlio C. Borges (FM).^{1,*}

Abreubia7@gmail.com; julio.borges@ifrj.edu.br

¹Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia do Rio de Janeiro – Campus Nilópolis – Rua Cel. Délio Menezes Porto, 1045 – CEP: 26.530-060 – Nilópolis/RJ; ²Universidade Federal Fluminense – Dpto. de Química Orgânica – Instituto de Química – Outeiro São João Batista, s/n - Valonguinho, 24020-150, Niterói/RJ.

Palavras Chave: *quinoline, synthesis, HIV-1, reverse transcriptase.*

Highlights

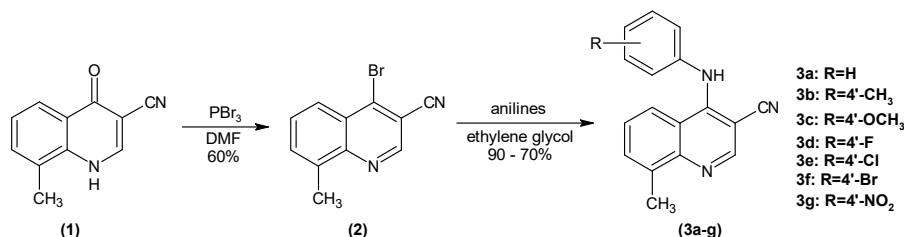
Seven quinoline derivatives were prepared.
Their structures were fully elucidated by spectroscopic and spectrometric methods.
All the synthesized molecules will be sent for anti-HIV evaluation.

Resumo/Abstract

Human immunodeficiency virus (HIV) is the causative agent of Acquired Immuno Deficiency Syndrome (AIDS) and has evolved as one of the most successful pathogens infecting humans.¹ It destroys immune system leaving the victim vulnerable to opportunistic infections. Despite several research efforts, it remains unabated.²

With regard to the search for new prototypes, with antiviral action, the presence of the quinolonic nucleus is very interesting. Quinoline derivatives are extensively studied for their anti-HIV-1 activity and found to act through inhibition of HIV-1.³ Our research group reported the synthesis of various quinolinic derivatives that showed antiviral activity⁴, based on these results we report the synthesis of 7 derivatives of the 4-(phenilamino)quinoline-3-carbonitrile system to evaluate its potential as anti-HIV-1 agent.

The 4-(phenilamino)quinoline-3-carbonitrile derivatives (**3a-g**) were readily prepared from 4-bromoquinolines⁵ (**2**), that can be readily made by methodology similar to the Gould-Jacobs.^{6,7}



The structures of 4-(phenilamino)quinoline-3-carbonitrile derivatives were fully elucidated by spectroscopic and spectrometric methods and will be evaluated on their potential as anti-HIV-1 agent.

1. Saxena R, Vekariya U, Tripathi R. *Life Sciences*. **2019**, 219, 322.
2. Li G *et al. Retrovirology*. **2015**, 12, 18.
3. Shah P *et al. Bioorganic Chemistry*. **2018**, 80, 591.
4. Melo BCL, Borges JC *et al. Journal of Heterocyclic Chemistry*. **2017**, 54, 3051.
5. Borges, JC *et al. Journal of Brazilian Chemical Society*. **2014**, 25, 980.
6. Yajima T, Munakata K. *Chemistry Letters*. **1977**, 891.
7. Bernardino AMR *et al. Bioorganic & Medicinal Chemistry*. **2006**, 14, 5765.

Agradecimentos/Acknowledgments

IFRJ, UFF, CAPES, CNPq, FAPERJ.

Área: EST

Nº de Inscrição: 00450

New Polymorph of isopropyl Xanthate of Sb(III): Experimental and theoretical characterization

Victor H.M. da Silva (IC)¹, Marcelo M. Marques (PQ)², José M.S. Junior (PQ)¹, Glaucio B. Ferreira (PQ)¹
victormalamace@gmail.com; glauciofb@gmail.com

¹Departamento de Química Inorgânica, Universidade Federal Fluminense, CEP: 24020-141 Niterói, RJ, Brazil

²Colegio Universitário Geraldo Reis, Universidade Federal Fluminense, CEP: 24210-200, Niterói, RJ Brazil,

Palavras Chave: Xanthate, Antimony, Spectroscopy, Crystallography.

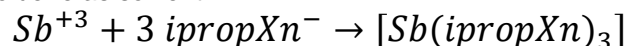
Highlights

Xanthate is a class of ligand that show a wide range of applications. This study reports new polymorph for [Sb(ipropXn)₃] with an analysis theoretical-experimental for auxiliary in spectroscopy characterization this system.

Resumo/Abstract

O-alkyldithiocarbonates, so-called xanthates (Xn), are a class of ligands that in metallic complexes derivatives have an extensively applications in the industrial with flotation removal of heavy metals, catalytic reactions and photovoltaic devices and also antimicrobial activities^[1,2]. Xanthates have the propriety of decompose in broader temperature ranges and also it is easily synthesized in large scale. Literature has some studies of structural and spectroscopic characterization for some aryl xanthates^[2], and only one known structure for the isopropyl xanthate of antimony (III)^[3].

This study presents a new polymorph for [Sb(ipropXn)₃]. The analysis theoretical-experimental spectroscopy for the crystals obtained by the synthesis route are described in the equation below, similar with the literature^[4], using toluene as solvent:



The spectroscopy characterization of the polymorphs was performed in solid phase using FT-IR, FT-Raman and UV-vis present in LAME-UFF. The X-ray data for mono and polycrystal, at room temperature were collected from a Bruker D8 Venture and Advance present in LDRX-UFF. The mixture of phases of these polymorphs was evaluated by the Topas academic program. Molecular theoretical analysis were conducted with the DFT method CAM-B3LYP/6-311+G(d,p) for light elements (C, O, S and H) and the ECP-LANL2DZ basis set for Sb atom, using Gaussian 09 program. The study in periodic boundary condition (PBC) was performed with the program CP2K used DFT-XGGA (PBE-D3/ MOLOPT).

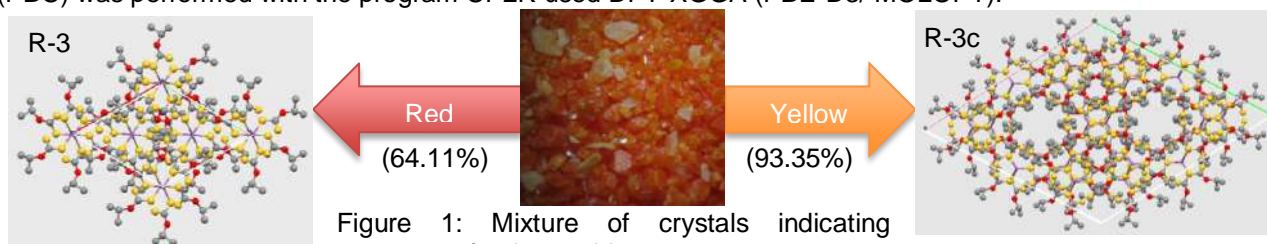


Figure 1: Mixture of crystals indicating presence of polymorphism.

Vibrational modes analysis for the IR (Raman) spectroscopy demonstrated the following value in cm^{-1} : $\nu(\text{C-H}) - 2977$ (2977), $\sigma(\text{HCH}) - 1375$ (1335), $\nu(\text{C-O}) - 1226$, $\nu(\text{C=S}) - 1008$ (1021), $\nu(\text{C-S}) - 899$ (801), $\nu(\text{Sb-S}) - 319$ (326). The UV-vis spectra showed significant peaks at the wavelength of 234, 302 and 365 nm. The X-ray data confirm a polymorphism that was distinct by its colors, the red one already described in literature^[3] and a new yellow structure. Both crystal has a melting range between $130^{\circ}\text{C} - 135^{\circ}\text{C}$.

Further study of this compound aims the analysis of others solid state properties, as band gap and electronic structure, for better understanding of this group of ligand and its complex.

References: [1] M. Z. Aldin *et al*, Dalton Trans. 47 (2018) 13926; [2] H. M. Torshizi *et al*, Iran. J. Chem. Chem. Eng. 36 (2017) 43; [3] B. F. Hoskins *et al*, Inorg Chim. Acta, 99 (1985) 177; [4] C. L. Raston *et al*, Aust. J. Chem. 31 (1978) 1493;

Agradecimentos/Acknowledgement

Acknowledgement: CNPq, FAPERJ, PIBIC, PROPPi UFF, LAME-UFF, LDRX-UFF and LMQC-UFF.

Estudo da qualidade da água do rio Macacu, Rio de Janeiro

Isabela Felix de Oliveira Silva (TM),¹ Juliana Aben Athar do Nascimento (TM),¹ João Victor Guidone da Silveira Travassos Gonçalves (TM),¹ Ana Beatriz da Franca Foradini Magalhães (TM),¹ Julianna Maria de Almeida Martins (PQ), Cristiane Ribeiro Mauad (PQ).^{1*}

cristiane.mauad@ifrj.edu.br

¹Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia do Rio de Janeiro

Palavras Chave: Rio Macacu, Índice de Qualidade da Água, Eutrofização

Highlights

Water quality study of Macacu river, Rio de Janeiro. Determination of the Water Quality Index in five sample points. The water quality obtained for the Macacu river were reasonable, bad and vary bad.

Resumo/Abstract

Introdução

O Índice de Qualidade das Águas (IQA) avalia parâmetros biológicos, químicos e físico-químicos classificando as águas de um corpo hídrico em ótima, boa, razoável, ruim ou péssima⁽¹⁾. O rio Macacu, possui nascente dentro do Parque Estadual de Três Picos no município de Cachoeiras de Macacu e foz na APA de Guapimirim, nordeste da Baía de Guanabara, abastecendo aproximadamente 2,5 milhões de habitantes nos municípios de Cachoeira de Macacu, Guapimirim, Itaboraí, São Gonçalo e Niterói. Em setembro de 2018 coletou-se amostras de água em 5 pontos do rio Macacu com garrafa Van D'orn para avaliação dos parâmetros componentes do IQA (Tabela 1).






Resultados e discussão

Todos os valores de OD obtidos foram acima de 5 mg L⁻¹ (Tabela 1), que é o mínimo para rios de classe 2 de acordo com a resolução CONAMA 357. P1, mais próximo a nascente, apresentou qualidade da água razoável, assim como P3 e P4. Embora P5 esteja localizado na APA de Guapimirim, por se tratar do ponto mais próximo a foz, apresentou péssima qualidade da água visto acumular o impacto de atividades antrópicas ao longo do rio. Os principais parâmetros que contribuíram para essa classificação foram OD, ST, CT e Tur.

Tabela 1: Resultados do cálculo de IQA para os pontos amostrais do rio Macacu, assim como suas coordenadas geográficas e resultados dos parâmetros individuais analisados.

| Ponto | Latitude | Longitude | IQA ^b | Parâmetros individuais ^a | | | | | | | | | |
|-------|--------------|--------------|------------------|-------------------------------------|------------------------------|-----------------------------|-----------------------------|-----------------------------|--------------------|--------------|-----|-------------------|-------------------|
| | | | | OD (mg L ⁻¹) | DBO (mg L ⁻¹) | PT (mg L ⁻¹) | NT (mg L ⁻¹) | ST (mg L ⁻¹) | CT (NMP/100 mL) | Tur (UNT) | pH | T água (°C) | T atm. (°C) |
| P1 | 22°26'31"S | 42°38'12"O | 59 | 9,12 | 0,00 | 0,05 | 9,56 | 34 | 4300 | 0,53 | 6 | 18,5 | 26,0 |
| P2 | 22°28'45,5"S | 42°39'26,5"O | 47 | 9,34 | 0,00 | 0,08 | 6,75 | 31 | 15000 | 1,24 | 6,5 | 20,0 | 25,0 |
| P3 | 22°31'38,4"S | 42°41'21"O | 53 | 10,06 | 1,04 | 0,06 | 12,87 | 96 | 7500 | 2,04 | 7 | 22,0 | 24,0 |
| P4 | 22°35'38,5"S | 42°44'47"O | 55 | 9,77 | 2,10 | 0,12 | 25,26 | 45 | 24000 | 4,63 | 7 | 24,0 | 27,0 |
| P5 | 22°40'34"S | 42°58'26"O | 28 | 5,25 | 1,54 | 0,10 | 16,67 | 252 | 24000 | 18,6 | 7 | 23,0 | 24,5 |

^aOD (oxigênio dissolvido); DBO (demanda bioquímica de oxigênio), PT (fósforo total), NT (nitrogênio total), ST (sólidos totais), CT (coliformes termotolerantes), Tur (turbidez) T (temperature).

^b  Ótima  Boa  Razoável  Ruim  Péssima

Conclusão

O Rio Macacu apresenta trechos de qualidade da água entre razoável, ruim e péssima, mostrando a necessidade de investimentos em saneamento básico para a melhoria da qualidade da água e seu uso para abastecimento público.

Referências

¹LIBÂNIO, M. **Fundamentos de qualidade e tratamento de água**. 3ª edição. Campinas, SP: Editora Átomo, 2010. 496 p.

Design of a crumpled graphene/copper composites for electrochemical sensing of hydrogen peroxide

¹Ana W.B.N. Silva (IC), ¹Victor H.R. Souza (PQ)

walkilaine12@gmail.com; victorsouza@ufgd.edu.br

¹Laboratório de Materiais Cerâmicos Avançados (LMCA), Faculdade de Ciências Exatas e Tecnologia (FACET), Universidade Federal da Grande Dourados (UFGD)

Keywords: crumpled graphene, copper, electrochemical sensor, hydrogen peroxide.

Highlights

- Synthesis of crumpled graphene/copper composites in one single step from graphene oxide/Cu²⁺ dispersions.
- Electrochemical sensors of hydrogen peroxide evaluated from three different composites.

Abstract

Designing new materials for specific applications such as the development of electrochemical sensor of hydrogen peroxide (H₂O₂) is challenging since H₂O₂ is widely applied in industries as an oxidizing agent and bleaching agent.^[1] Despite that enzyme-based electrochemical sensors present high sensitivity for H₂O₂ detection, its reproducibility and stability are quite low, which stimulate the searching for new nonenzymatic sensors with desirable electrochemical properties. Copper oxide is a less expensive material compared to the noble ones, like platinum or gold, which is being exploited to the electrochemical detection of H₂O₂ due to its good electrochemical activity. [2] The poor electrochemical stability of copper oxide is a drawback for the application of such material. The synthesis of graphene/copper oxide composites is one way to overcome the limitations related to the metal oxide since is well-known that graphene improves the electrochemical activity and stability of the transition metal oxides. We designed new composites of crumpled graphene(CG)/copper in a one single step using a horizontal tubular furnace. Three different ratios (CG/Cu 1:1; 1:5 and 1:10) between graphene oxide and Cu²⁺ (w/w) were synthesized from dispersions in deionized water. Figure 1(a) exhibits scanning electron microscopy (SEM) image of crumpled graphene/copper 1:1 composite. A typical paper ball-like morphology of the crumpled graphene is observed. The energy dispersive spectroscopy mapping presented in Figure 1(b) shows a homogeneous distribution of copper over the sample. Cyclic voltammetric measurements exhibited typical copper redox peaks, corresponding to Cu(0)/Cu(I) and Cu(I)/Cu(II). Chronoamperometric measurements will be further carried out to explore the properties of such composites for H₂O₂ sensing.

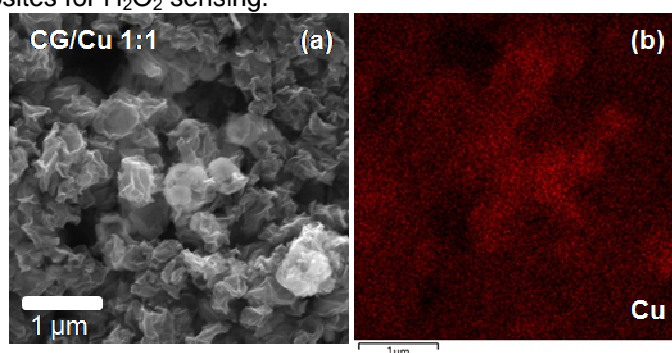


Figure 1 - SEM image of CG/Cu 1:1 composite (a) and energy dispersive spectroscopy mapping of copper.

[1] Xu, F.; Deng, M.; Li, G.; Chen, S.; Wang, L., Electrochemical behavior of cuprous oxide–reduced graphene oxide nanocomposites and their application in nonenzymatic hydrogen peroxide sensing. *Electrochimica Acta* **2013**, *88*, 59-65.

[2] Arévalo, F. J.; Osuna-Sánchez, Y.; Sandoval-Cortés, J.; Di Tocco, A.; Granero, A. M.; Robledo, S. N.; Zon, M. A.; Vettorazzi, N. R.; Martínez, J. L.; Segura, E. P.; Iliná, A.; Fernández, H., Development of an electrochemical sensor for the determination of glycerol based on glassy carbon electrodes modified with a copper oxide nanoparticles/multiwalled carbon nanotubes/pectin composite. *Sensors and Actuators B: Chemical* **2017**, *244*, 949-957.

Acknowledgments

Ana W.B.N. Silva thanks *Universidade Federal da Grande Dourados (UFGD)* for the scholarship.

Comparison of the performance of multi-class classifiers in a forensic case

Aderval S. Luna* (PQ), **Jefferson S. de Gois** (PQ), **Barbara M. de Andrade** (PG), **Jarbas V. Robert** (PQ), and **Mayara C. L. do Nascimento** (PQ)

adsluna@gmail.com; asluna@uerj.br

Programa de Pós-graduação em Engenharia Química, Instituto de Química, UERJ

Palavras Chave: *Multi-class classifiers, Forensic, Chemometrics, Pattern recognition.*

Highlights

Multi-class classifiers applied to a forensic case.

The accuracy and Kappa coefficient were used to compare the performance of the classifiers.

RF showed the performance to classify the glass samples.

Abstract

Glass fragments are frequently found when forensic scientists examine the clothing of a person who is suspected of a crime such as house-breaking, and it is possible to determine the chemical composition and refractive index of very small fragments. It is useful if the scientist can use these data to determine whether an unknown fragment is of a particular type of origin. The object of this work aimed to compare the performance of different multi-class classifiers using the accuracy and Kappa coefficient as the figures of merit. The dataset used for our numerical experiments was obtained from the UCI machine learning repository [1] glass identification. The number of training data was 214. The glass classes were Float-Window, Non-float Window, Container, Tableware, and Headlamp. The attributes of patterns were Refractive Index (RI), Na, Mg, Al, Si, K, Ca, Ba and Fe expressed in weight percent of the respective oxide. The R version 3.4.2, and the packages caret, mdatools, rrcov, e1071, randomForest [2] were used. The data were autoscaled before to apply the Robust Principal Component Analysis to detect the outliers. After this, seven samples were removed from the original dataset. Following were applied the multi-class classifiers Multinomial Logistic Regression, Support Vector of Machine, k-Nearest Neighbors, and Random Forest (RF). The RF showed the best performance because the figures of merit were higher when it was compared with the others classifiers as can see in Figure 1.

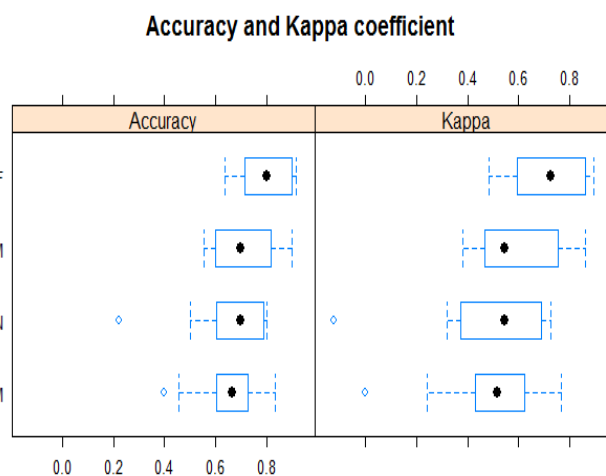


Figure 1 – Comparison of the performance of the multi-class classifiers using the accuracy and Kappa coefficient as the figures of merit.

References

¹ C.L. Blake and C.J. Merz (1998). UCI repository of machine learning databases. The University of California. [<http://www.ics.uci.edu/~mlern/MLRepository.html>].

² The R Foundation for Statistical Computing, 2017.

Acknowledgments

Luna, A. S. thanks to FAPERJ, CNPq, CAPES, Programa Pro-Ciência, UERJ.

A benzocrown ether aldehyde-based fluorogenic supramolecular device for sensing cysteine, bisulfite and potassium ion

Francielly T. Souto (PG),^{1*} Vanderlei G. Machado (PQ).

franciellytsouto@gmail.com; vanderlei.machado@ufsc.br.

Departamento de Química, Centro de Ciências Físicas e Matemáticas - UFSC.

Key Words: Fluorogenic chemosensors; Chemodosimeters; Naked eye detection; Crown ether; Supramolecular analytical chemistry.

Highlights

A novel benzocrown ether aldehyde compound was synthesized and characterized. The photophysical properties of the compound were studied. The compound acts as a fluorogenic supramolecular device for the selective detection of cysteine, bisulfite and potassium ion.

Abstract

The detection of chemical species has become possible through the study of optical chemical devices capable of selectively interacting with a target analyte.¹

In the present study, we designed and synthesized a novel compound (**2**) containing both benzo-18-crown-6 and aldehyde groups. This compound was prepared through a one-step reaction involving Na₂S₂O₄ reduction of 2-nitroaniline **1** in the presence of aldehyde (**Figure A**).² Compound **2** exhibits two sites for interaction of different types of analytes (**Figure B**): a 18-crown-6 ether, capable to interact with metal alkaline cations, such as potassium ion, and an aldehyde group, capable to interact with cysteine or bisulfite. Thus, a single organic molecule has potential for detection and quantification of three different chemical species, which may be useful in principle in the construction of sequential analyte detection systems.

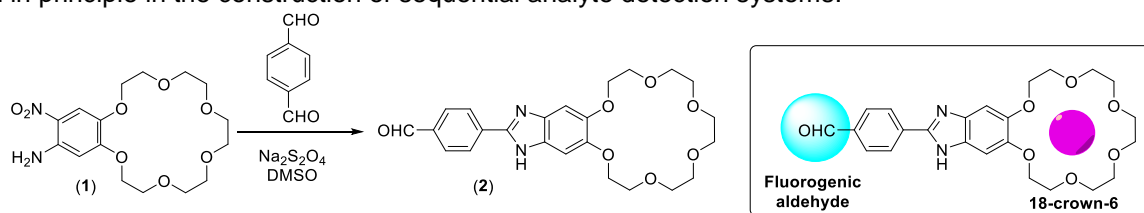


Figure. (A) Synthetic route for compound **2**. **(B)** Interaction/reaction sites for analytes.

The sensing ability of the compound in the presence of aminoacids and anions was studied in MeCN/HEPES buffer (pH = 7.4) by emission spectrophotometry. The method allows for the selective detection of cysteine by fluorescence growth. Upon the addition of bisulfite, the color of the solution changes from green-yellow to blue after ultraviolet excitation. The compound showed rapid response time, exhibiting selectivity and sensitivity for these analytes over other aminoacids and anions studied. The presence of the crown ether group indicates that the compound can be used also in the construction of a cation detection system in organic media.

This compound and related compounds have potential to be incorporated in polymers, fibers, nanoparticles or other solid supports, allowing different strategies to be applied for the design of supramolecular analyte systems for detection and recognition systems.

Acknowledgments

The financial support of the Brazilian Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq), Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior (CAPES – Finance code 001) and Fundação de Amparo à Pesquisa e Inovação do Estado de Santa Catarina (FAPESC) is acknowledged.

References

¹ ZIMMERMANN-DIMER, L. M.; MACHADO, V. G. *Química Nova*, v. 31, n. 8, p. 2134–2146, 2008.. ² BATISTA, R. M. F.; OLIVEIRA, E.; COSTA, S. P. G.; LODEIRO, C.; RAPOSO, M. M. M. *Tetrahedron*, v. 67, n. 37, p. 7106–7113, 2011.

Optimization of a microextraction methodology with *in situ* adsorbent formation for Cr(III) determination in aqueous samples by FAAS.

Alêssa G. Siqueira¹ (PG)*, Bruno E. S. Costa² (PG), Vanessa N. Alves¹ (PQ)

alessa93.ags@gmail.com

¹ Unidade Acadêmica Especial de Química, UFG-RC; ² Instituto de Química, UFU

Palavras Chave: *in situ*, extração, FAAS

Highlights

A simple SPE method, that was named *in situ* sorbent formation microextraction was optimized using multivariate strategies and will be used for selective separation and Cr(III) determination;

Resumo/Abstract

Considerando que íons metálicos podem estar presentes em diversos tipos de amostras em concentrações em nível traço, o desenvolvimento de metodologias que permitam sua determinação é de extrema importância, atestando a qualidade dos produtos consumidos pela população. As técnicas de extração em fase sólida têm sido cada vez mais utilizadas com esse fim, e nesse sentido tem-se a extração em fase sólida baseada em surfactante, denominada de extração em fase sólida *in situ* (SPE-ISS). A técnica baseia-se na formação da fase sólida *in situ*, a partir da reação entre um surfactante catiônico e um pareador iônico adequados. Assim, o complexo do íon metálico de interesse fica adsorvido na superfície desta fase sólida, promovendo sua extração. Neste trabalho, a extração dos íons Cr(III) foi realizada por meio da formação do complexo Cr-PAN e após formação da fase sólida com subsequente extração do complexo, a mesma foi separada por centrifugação e diluída com etanol para posterior análise no espectrofotômetro de absorção atômica com atomização por chama. Os parâmetros que podem influenciar na extração do íon Cr(III) foram avaliados por meio de otimização multivariada. A formação do complexo Cr-PAN foi avaliada por meio de um planejamento Doehlert, onde foram otimizadas a concentração do complexante e o pH de formação do complexo. A matriz levou à construção de uma superfície de resposta, caracterizada por um ponto de máximo, sendo que os melhores resultados foram obtidos mantendo a concentração do complexante PAN em 0,18 mmol L⁻¹ e o pH em 9,5. Posteriormente a fim de escolher o surfactante e as melhores condições para a formação do adsorvente e extração do complexo, foram utilizados planejamentos fatoriais 2³ onde foram avaliados o tipo de surfactante (brometo de tetra-*n*-butilamônio - TBAB e brometo de cetiltrimetilamônio – CTAB), concentração do pareador iônico (NaClO₄) e tempo de agitação. Os gráficos de pareto obtidos mostraram que o CTAB atua mais efetivamente na formação da fase sólida, e que para este surfactante a concentração do pareador iônico, bem como sua interação com a variável tempo de agitação, foram significativas e posteriormente otimizadas por meio de um planejamento Doehlert. A superfície de resposta obtida neste planejamento, foi caracterizada por um ponto de máximo, onde os melhores sinais analíticos foram obtidos mantendo-se a concentração de NaClO₄ em 0,26 mol L⁻¹ e o tempo de agitação no vórtex em 7,51 minutos. Apesar de a concentração do surfactante (CTAB) não apresentar efeito significativo, teve-se o interesse de investigar o efeito de sua concentração de forma univariada (0,05; 0,1; 0,3; 0,5 e 0,8 mol/L). Esse refinamento foi realizado, a fim de fixar a concentração de CTAB e obter as melhores condições para formação da fase sólida. Neste estudo observou-se que não houve diferença significativa no sinal analítico obtido dentro da faixa de concentração estudada, e a mesma foi mantida em 0,3 mol L⁻¹. Desta forma, as estratégias multivariada foram eficientes na otimização do método proposto garantindo que melhores resultados fossem obtidos, fazendo-se uso de um menor número de experimentos e conseqüente menor consumo de reagentes. O método apresentou-se promissor, com perspectivas de elevados fatores de pré-concentração, além de seu potencial para extração do analito. Considerando-se que apesar de a técnica de análise apresentar elevada a robustez, alguns tipos de matrizes não podem ser analisados diretamente e necessitam de uma etapa de preparo, assim, a técnica desenvolvida neste trabalho garante a extração do analito, permitindo uma análise mais rápida e com menores fontes de erro.

Agradecimentos/Acknowledgments

UAEQ – UFG/RC, IQ-UFU, FAPEG, CAPES e CNPq

Área: FISNº de Inscrição: 00461

Negro de fumo obtido a partir da pirólise de pneus e seu estudo na adsorção de azul de metileno: efeito da massa de adsorvente

Gabriel Serpa Jacinto (IC)^{1*}, Raphael Gilioli Heineck (IC)¹, Gizelle Inácio Almerindo (PQ)¹.

g-serpa@hotmail.com

¹Curso de Engenharia Química – Escola do Mar, Ciência e Tecnologia, UNIVALI

Palavras Chave: *Cinética de adsorção, Corante, Resíduos industriais.*

Highlights

Carbon black obtained from tires pyrolysis and its study on adsorption in methylene blue: adsorbent mass effect. Strategies of industrial waste for dye removal are overviewed. This process shows high removal of dye. 100 % removal of methylene blue (12 mg/L) in 25 minutes.

Resumo/Abstract

O negro de fumo, resíduo proveniente da pirólise de pneus da Empresa RODE Removedora, foi utilizado recentemente pelo nosso grupo de pesquisa como adsorvente alternativo para a remoção de azul de metileno de soluções aquosas (12 mg/L). Utilizou-se 0,050 g de negro de fumo com área superficial de $96,0 \text{ m}^2 \cdot \text{g}^{-1}$, observando-se uma remoção de 83 % em 75 minutos¹. Devido o potencial de adsorção, a proposta do presente trabalho, foi ampliar os estudos avaliando-se o efeito da variação da massa de adsorvente (0,025 g; 0,075 g e 0,100 g), visto que, é um dos fatores que influenciam e controlam a adsorção. O estudo cinético foi avaliado com 50 mL da solução de azul de metileno (12 mg/L) em tempos de contato de até 75 minutos. Conforme o Gráfico 1, percebe-se que para as massas de 0,075 e 0,100 g há pouca diferença na remoção do corante, sendo diferenciadas apenas por uma remoção mais rápida pela maior massa aplicada. Pode-se observar que em 25 minutos obteve-se uma remoção total do corante para a massa de 0,100 g. A massa utilizada de 0,025 g apresentou uma remoção significativamente inferior ao final da cinética (ca. 65 %). O Gráfico 2 apresenta o efeito expressivo do aumento da massa de adsorvente, sendo a de 0,050 g referente aos estudos de Heineck *et al.* (2018). Para interpretar os parâmetros cinéticos foram adotados três modelos (pseudo-primeira ordem, pseudo-segunda ordem e difusão intrapartícula), sendo o que mais se adequou ao processo de adsorção foi o de pseudo-segunda ordem que prediz uma eficiência da adsorção correspondente a quantidade de sítios ativos dispostos no adsorvente².

Gráfico 1. Efeito do tempo de contato.

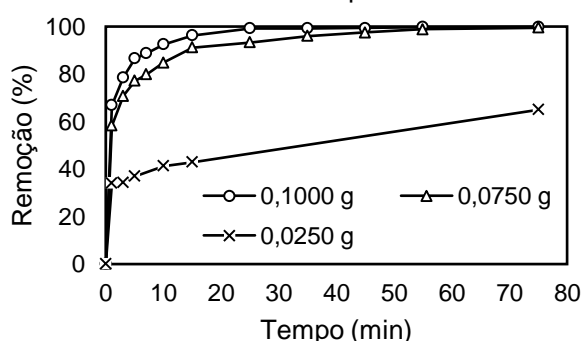
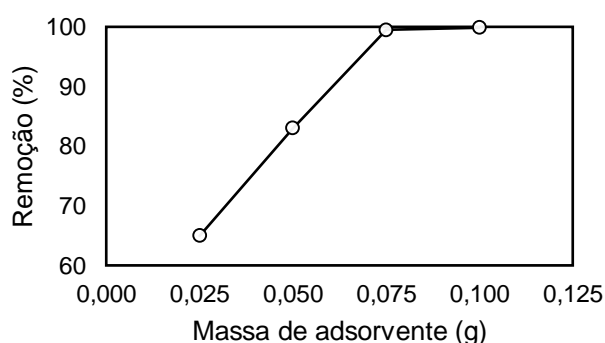


Gráfico 2. Efeito da massa de adsorvente.



¹HEINECK, R. G. *et al.* Caracterização de negro de fumo obtido a partir da pirólise de pneus e aplicação na adsorção de azul de metileno. In: ENCONTRO SUL BRASILEIRO DE ENGENHARIA AMBIENTAL E SANITÁRIA, 2., 2018, Foz do Iguaçu. **Anais...** Foz do Iguaçu: CREA, 2019. v. 1, p. 54 - 55.

²HO, Y. S.; MCKAY, G. Pseudo-second model for sorption processes. *Process Biochem.*, v. 34, n. 5, p. 451 – 465, 1999.

Agradecimentos/Acknowledgments

À Universidade do Vale do Itajaí pelo apoio técnico e financeiro e à Empresa RODE Removedora pelo fornecimento do negro de fumo.

Complexes of Ln³⁺ (La³⁺, Sm³⁺) containing a Bis(hydrazone): synthesis, characterization and photophysical study

Iara A.T. Gaia (IC),¹ Alice P. Borges (PG),¹ Fernando S. Prado (PG),² Antônio O.T. Patrocínio (PQ),² Antônio E.H. Machado (PQ),² Pedro I.S. Maia (PQ).^{1*}

iara_gaia@hotmail.com; pedro.maia@uftm.edu.br

¹Departamento de Química, UFTM, 38025-440, Uberaba-MG, Brasil; ²Instituto de Química, UFU, Uberlândia-MG, Brasil

Key Words: Lanthanides, Hydrazones, Photophysical Studies, Luminescent Probes

Highlights

The photophysical properties of rare earths are used in several areas, including technological materials and biological applications.¹ Due to their low absorptivity, the coordination of organic ligands is used as a method to facilitate the absorption (antenna effect) and increase their luminescent effects².

Resumo/Abstract

This work reports the synthesis, characterization and experimental/theoretical study of the photophysical properties of two new lanthanide complexes containing a bis(hydrazone) ligand derived from isoniazid (H₂L¹, **Fig. 1a**) aiming to acquire luminescent probes. The complexes [M(HL¹)₂]NO₃ (M = La³⁺ (**1**) or Sm³⁺ (**2**)) were obtained as orange solids by reacting the M(NO₃)₃·6H₂O precursors with 2 equivalents of H₂L¹ (**Fig. 1b**).

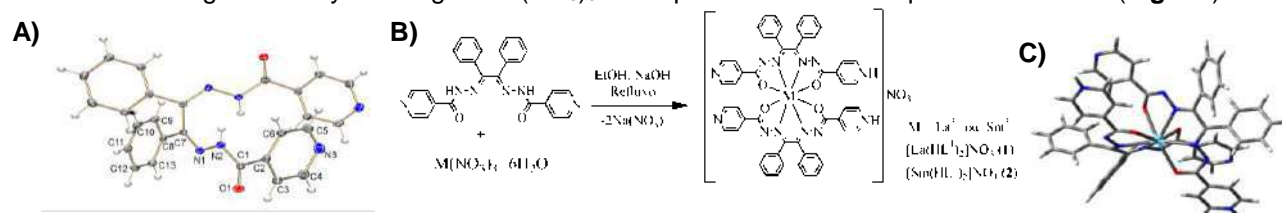


Figure 1. (a) Molecular and crystalline structure of H₂L¹ (b) Synthesis of complexes and (c) Optimized structure of the complex **1**.

The values of molar conductivity in MeOH for **1** and **2** were in accord with 1:1 electrolytes. The FTIR showed the presence of bands $\nu(\text{NH})$ as well as the shift of the $\nu(\text{C}=\text{O})$ band for both complexes. The high resolution mass spectra presented molecular ion peaks related to [M]⁺ at m/z 1033.2192 and 1046.5394 for **1** (m/z calcd: 1033.2202) and **2** (m/z calcd: 1046.2336), respectively. Furthermore, the optimized structure of the complex **1** (**Fig. 1c**) suggests that two units of the ligand coordinate to the metal center in a monoanionic tetradentate mode, forming an octacoordinated complex. The experimental electronic spectra (**Fig. 2a**) of the complexes are similar, presenting a band in the visible region ($\lambda = 440$ nm) corresponding to charge transfer transitions (LMCT). On the other hand, the emission spectra of the two complexes (**Fig. 2a**) showed bands with maxima around 550 nm with a significant difference between them, where only for **2** characteristic bands of lanthanide ions were observed. Also, the emission spectra at low temperature (**Fig. 2b**) presented hypochromic shifts of the emission maximum for both complexes. New studies will be carried out in order to better understand the luminescent properties and determine the potential activity as luminescent probes.

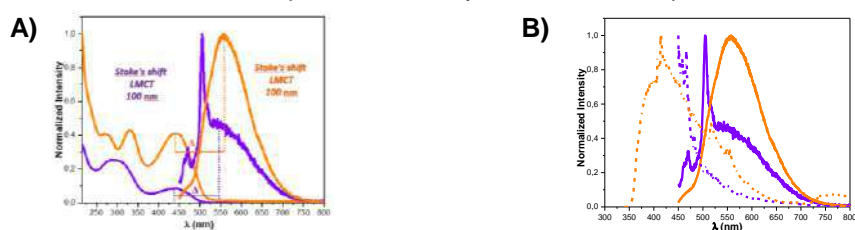


Figure 2. (a) Electronic (to the left) and emission (to the right) spectra of the complexes **1** (—) and **2** (—); (b) Emission spectra at 77 K (dashed line) and 298 K (solid line) of the complexes **1** (—) e **2** (—).

1. Bünzli, J.G. *Coordination Chemistry Reviews*, 293-294,19-47 (2015).
2. Alpha, B. et al. *Photochemistry and Photobiology*, 52(2), 299-306 (1990).

Antioxidant capacity of teas measured using the consumption of the free radical derived from N-(4-methoxyphenyl)-1,4-phenylenediamine.

Lucas B. Oliveira (IC)¹, Cícera P. Marcelino (PG)¹, Horacio D. Moya (PQ)^{1*}

lucasbelini@outlook.com; horacio.moya@fmabc.br

¹Faculdade de Medicina da Fundação do ABC – CEPES (Centro de Estudos, Pesquisa, Prevenção e Tratamento em Saúde) – CEP – 09060-650 – Santo André – SP – Brazil.

Key words: Antioxidant activity, N-(4-methoxyphenyl)-1,4-phenylenediamine, teas, spectrophotometry.

Highlights

The consumption of the free radical originated from the oxidation of N-(4-methoxyphenyl)-1,4-phenylenediamine was used in a spectrophotometric assay to quantify the antioxidant capacity of teas.

Abstract

N-(4-methoxyphenyl)-1,4-phenylenediamine (MPPD, Fig.1) has been used as visual indicator in a complexometric titration of Fe(III) with EDTA (pH 2, HCl)¹. It was already mentioned that the oxidation of MPPD ($6,0 \times 10^{-4}$ M) by Fe^{3+} ($1,2 \times 10^{-4}$ M) in acetate buffer (pH 4.0) (Eq. 1) after 5 minutes originates

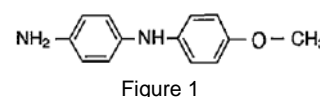
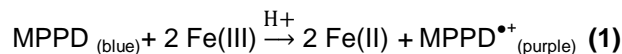


Figure 1

the free radical cation derived MPPD^{•+} (purple, λ_{max} 569 nm) which reacts with phenolics compounds². In the present study an spectrophotometric assay to quantify the total antioxidant capacity (TAC) based on the consumption of the free radical cation derivative MPPD^{•+} by antioxidant compounds (AOs) present in teas (Eq. 2) was reported. Ascorbic acid, AA, which also consumes MPPD^{•+}, was chosen to express the TAC values.



The TAC values obtained with the proposed assay (MPPD^{•+}) for six teas samples strongly correlates ($r^2 = 0.832$) with the values obtained using the ABTS^{•+} method³ suggesting that both methods can be used for this same purpose. The good positive correlation ($r^2 = 0.812$) obtained with the polyphenolic content (obtained with the Folin Ciocalteu reagent, FCR)⁴ indicates that the polyphenols present in the analyzed teas are responsible for the antioxidant activity in the sample analyzed.

Table 1 – Total antioxidant activity values (MPPD^{•+} and ABTS^{•+} methods) and polyphenol content of tea samples.

| Teas | <i>Camelia sinensis</i> L. | <i>Camelia sinensis</i> L. | <i>Camelia sinensis</i> L. | <i>Matricaria recutita</i> | <i>Baccharis genistelloides</i> | <i>Mentha piperita</i> L. |
|--------------------|----------------------------|----------------------------|----------------------------|----------------------------|---------------------------------|---------------------------|
| | White | Green | Black | Chamomile | Carqueja | Mentha |
| MPPD $\times 10^2$ | 1.6 \pm 0.1 | 1.2 \pm 0.1 | 7.7 \pm 0.6 | 69.6 \pm 2.9 | 59.7 \pm 3.8 | 43.3 \pm 0.6 |
| ABTS/ 10^4 | 25.9 \pm 1.5 | 25.8 \pm 0.3 | 12.3 \pm 0.3 | 1.9 \pm 0.2 | 2.0 \pm 0.1 | 10.7 \pm 1.1 |
| FCR | 133 \pm 6 | 139 \pm 6 | 69.5 \pm 1.4 | 14.5 \pm 0.4 | 18.0 \pm 0.8 | 74.3 \pm 1.4 |

DM is dry material; MPPD is in g AA/g DM; ABTS is in μM trolox/ g DM; FCR is in mg gallic acid/ g DM. The results are average and standard deviation of triplicates.

The assay proposed is simple, easy to perform and reproducible. Differently from the ABTS assay the free radical cation MPPD^{•+} uses water as solvent. The good results obtained suggest that the proposed assay can be used to quantify the TAC of other samples of plant origin (e.g. beers).

Financial support: FAPESP (2018/05913-8)

1) Vogel, A. I. *Análise Inorgânica Quantitativa*, 4th, Guanabara Dois, Rio de Janeiro, p. 210-211, 1981.

2) Oliveira, L. B.; Moya, H. D. 41th Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química, 2018, Foz do Iguaçu, ANA 059.

3) Nenadis, N.; Wang, L. F.; Tsinidou, M.; Zhang, H. Y. *J. Agric. Food Chem.*, p. 4669–4674, 52, 2004.

4) Anvisa. *Farmacopéia Brasileira*, p. 204-206, Vol. 1, 5th Ed. Brasília, 2010.

Área: INO N° de Inscrição: 00464

Cadeia mista de cobre(II) contendo os ligantes oxalato e 1,3-bis(4-piridil)propano: síntese e caracterização

Milena M. Sachi (IC)^{1*}, Natália V. Reis (PG)², Siddhartha O. K. Giese (PQ)¹, Humberto O. Stumpf (PQ)³, Felipe T. Martins (PQ)⁴, Maria V. Marinho (PQ)⁵, Tatiana R. G. Simões (PQ)¹.

milenasachi@ufpr.br, tatianarenat@gmail.com

¹ Departamento de Química, Universidade Federal do Paraná, PR, Brasil;

² Chemistry Research Laboratory, University of Oxford, Inglaterra;

³ Departamento de Química, Instituto de Ciências Exatas, Universidade Federal de Minas Gerais, MG, Brasil;

⁴ Instituto de Química, Universidade Federal de Goiás, GO, Brasil;

⁵ Instituto de Química, Universidade Federal de Alfenas, MG, Brasil.

Palavras Chave: Química Supramolecular, Polímero de Coordenação, Cobre (II), Ligantes N,O-doadores.

Highlights

Synthesis and Characterization of a new copper(II) polymer containing the oxalate and 1,3-bis(4-pyridyl)propane ligands.

- Synthesis and characterization of a new coordinating polymer which extends through a flexible ligand.
- The metal centers are connected by the oxalate ligand.

Resumo

A busca por materiais funcionais, ou seja, materiais que apresentem mais de duas propriedades associadas, sejam essas ligadas ao magnetismo, à condutividade, à solubilidade, entre outras, encontra-se cada vez mais em foco¹. Em particular, a síntese destes compostos têm envolvido a estratégia metalossupramolecular.¹ Assim, neste trabalho, foi escolhido o ligante oxalato pela sua capacidade de atuar em ponte entre os centros metálicos, e o ligante flexível 1,3-bis(4-piridil)propano (bpp) devido à versatilidade de conformações estruturais (TG, TT, GG e GG') que este ligante pode adotar.² Monocristais adequados para o experimento de difração de raios X por monocristal do composto $[\text{Cu}_2(\text{bpp})_3(\text{ox})(\text{dmsO})](\text{ClO}_4)_2 \cdot \text{dmsO}$ (**1**) foram obtidos a partir da mistura de soluções de sais de cobre(II) e oxalato e o ligante bpp. O espectro de infravermelho de **1** apresentou bandas intensas em 1674, 1431 e 1081 cm^{-1} que foram atribuídas, respectivamente, a presença do $\nu\text{C}=\text{C}/\text{C}=\text{N}$ do ligante bpp, do $\nu\text{C}=\text{O}$ do ligante oxalato e do $\nu\text{Cl}-\text{O}$ do ânion perclorato. A análise estrutural de **1** mostra a presença de dois íons de cobre(II) cristalograficamente independentes conectados simultaneamente através do ligante oxalato, o qual atua no modo de coordenação bis(bidentado), e do ligante bpp que atua em ponte (GG) (Figura 1a). A extensão da rede polimérica ocorre através de outro ligante bpp que conecta cada uma destas unidades entre si (TT) (Figura 1b). Um dos íons de cobre(II) está pentacoordenado, exibindo uma geometria pirâmide de base quadrada, enquanto o outro está hexacoordenado, exibindo uma geometria octaédrica em que uma molécula de dmsO completa a esfera de coordenação (Figura 1a). A neutralidade do sistema é obtida através de íons perclorato. As demais análises de caracterização estão em andamento e medidas magnéticas serão realizadas a fim de estudar a interação dos centros metálicos no polímero obtido.

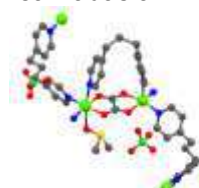


Figura 1a – Estrutura cristalina do composto 1

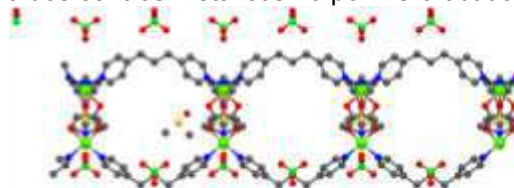


Figura 1b – Visão da extensão do polímero de 1

Agradecimentos



¹Marinho.M.V.; *Inorg. Chem.* **2013**, *15*, 8812-8819; ²Z. *Anorg. Allg. Chem.* **2014**, *640*, (12-13), 2550-2555.

42ª Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química: Eixos Mobilizadores da Química

Área: MAT

(Inserir a sigla da seção científica para qual o resumo será submetido. Ex: ORG, BEA, CAT)

Nº de Inscrição: 00465

(Inserir o número de inscrição do autor que fez a submissão)

Study of functionalization of carbon nanotubes with Digoxin and its application as drug delivery system.

Pedro G. Carneiro (PG)¹, Duane G. Pereira (PG)², Lurian Aparecida Domingos da Cruz (IC)³, Leandro A. Barbosa (PQ)², José A. F. P. Villar (PQ)¹, Mariane C. Schnitzler (PQ)¹.

pedro.gontijo@live.com

¹Laboratório de Síntese Orgânica e Nanoestruturas, UFSJ Campus - Centro Oeste; ²Laboratório de Bioquímica Celular, UFSJ – Campus Centro Oeste; ³Laboratório de Estudos em Matrizes Ambientais - Sedimentos, Solo e água – LEMASSA, Universidade Federal Tecnológica do Paraná – UTFPR.

Palavras Chave: Nanotubos de Carbono, Digoxina, Ácido Fólico, Câncer.

Highlights

Functionalization study of carbon nanotubes with Digoxin and its application as drug delivery. In this study, a drug delivery system for antitumor therapy was synthesized and tested by non-covalent functionalization of multi walled carbon nanotubes with Digoxin and Folic Acid.

Resumo/Abstract

Carbon nanotubes have been shown to be able to mediate the targeted and controlled delivery of drugs because of their unique properties, which overcomes the difficulties created by tumors during cancer treatment. Cardiotonic steroids, used in the treatment of congestive heart failure, such as Digoxin (DGX), have aroused interest in its antitumor effect. The folate receptor, and its substrate folic acid (FA), is exploited in targeting diagnostic or therapeutic agents. This work aimed at the biological synthesis, characterization and evaluation of multi wall carbon nanotubes (MWNTs) functionalized with FA and DGX. Non-covalent functionalization was performed to create the hybrid of carbon nanotubes with digoxin and folic acid. All reagents and the hybrid were chemically characterized. The X-ray diffraction, Raman spectroscopy and Thermogravimetric Analysis presented results characteristic of each precursor and indicated the functionalization. The pH of the zero charge potential was around 6-7. ICP-OES indicated the presence of Cobalt and Nickel in the structure of MWNTs. DGX and FA were quantified by HPLC, for functionalization study, which occurred significantly. The cell viability of varying concentrations of pristine MWNTs, Digoxin and MWNTs functionalized against the cell cultures HeLa (cervix adenocarcinoma of the uterus) and Wi (lung fibroblast) were evaluated. Non-existent acute toxicity caused by pure MWNTs was observed, the MWNT-FA-DGX hybrid was less toxic than MWNT-DGX, which showed significant toxicity at minimum concentrations. The Digoxin showed significant toxicity in cell cultures, with IC₅₀ of 90 nM. However, the MWNT-DGX hybrid presented similar toxicity, however, at lower concentration on the picomolar scale. At same time, in Wi cells, Digoxin was less toxic, comparing the same concentrations tested in HeLa cells. The idea of synergism between MWNT and DGX is emphasized, and once functionalized, MWNTs can direct the specific toxicity of DGX, making it a promising drug delivery system. Finally, It is noteworthy that the goal was to synthesize a DDS that is more harmful to tumor cells than normal cells, and this observation could be checked by comparing the cell cultures used in the biological tests.

Agradecimentos/Acknowledgments

This work was supported by FAPEMIG (Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de Minas Gerais); CNPq (Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico Tecnológico); UFSJ (Universidade Federal de São João Del Rei; Laboratório de Síntese Orgânica e Nanoestruturas and Laboratório de Bioquímica Celular); Danielle Caroline Schnitzler, Ph.D. for the ICP-OES data – LEMASSA, Universidade Federal Tecnológica do Paraná; Prof. Edson Nossol – Grupo de Química de Materiais Inorgânicos Nanoestruturados; Prof. Roberto Bertholdo – Central Analítica II, ICT – Unifal.

Chemical characterization and antimicrobial activity of the endophytic fungus *Glomerella cingulata* biomass associated to *Virola Surinamensis*

Nayara de F. Gomes (PG),^{1*} Antônio J.C. Filho (PQ),¹ Fernando J.C. Carneiro (PQ)¹, Luis C. N. da Silva (PQ)², Alexsander R. C. Junior (IC)².

nayfreitas361@yahoo.com.br; prof.antoniofilho@ifma.edu.br;

¹Departamento Acadêmico de Química, IFMA.

²Laboratório de Imunologia das Doenças Infecciosas e Parasitárias, UNICEUMA.

Key words: *Endophytic fungi. Hexane extract. Biological activity.*

Highlights

The analysis of the chromatogram obtained by GC/MS, after esterification of the hexanic extract of the *Glomerella cingulate* fungus biomass, showed the presence of three fatty acids. Antimicrobial test showed a good inhibition for *Staphylococcus aureus*.

Resumo/Abstract

The research of endophytic fungi gains space in the scientific community because the antimicrobial activity is an important characteristic of the substances produced, besides being a natural source that can be cultivated in laboratory without damaging the ecosystem. In this work, the endophytic fungus *Glomerella cingulata* was cultivated in rice, which generated the biomass used in the preparation of hexane extract. This extract was characterized by Gas Chromatography coupled to Mass Spectrometry (GC/MS). Moreover, an antimicrobial test was performed to verify the minimum inhibitory concentration (MIC) of the extract against the bacteria *Pseudomonas aeruginosa*, *Listeria monocytogenes*, *Salmonella enterica*, *Staphylococcus aureus* and *Escherichia coli* (figure 1). From the analysis of the chromatogram with the peaks of the molecular ions obtained, we identified 12 substances, which were compared with those of the hexane extract in the blank test, and three different fat acids produced by the fungus were observed (figure 2). In relation to the antimicrobial test, fungal hexanic extract was able to inhibit the growth of the mentioned bacteria, with *Staphylococcus aureus* being the bacterium with the highest inhibition, presenting a minimum extract concentration of 0.78 mg/mL.

Figure 1: 96 well plate.

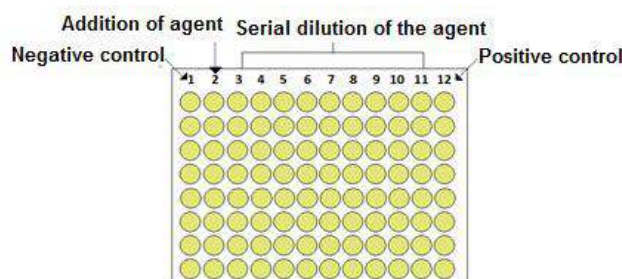
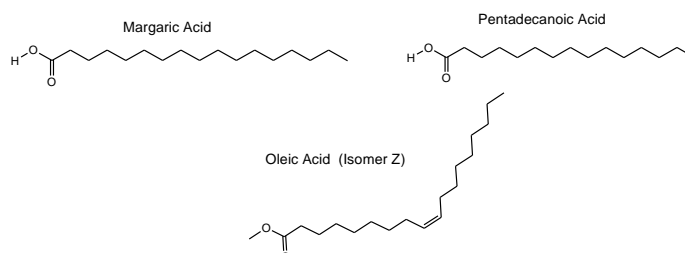


Figure 2: Structures of fatty acids identified in the fungal sample



Área: AMB

(Inserir a sigla da seção científica para qual o resumo será submetido. Ex: ORG, BEA, CAT)

Nº de Inscrição: 00469

(Inserir o número de inscrição do autor que fez a submissão)

µGAS-MONITOR: A portable and low-cost 3D printed platform for *in situ* air quality monitoring using µPAD's coupled to smartphones

Caroline Silva de Freitas(IC), Gabriel M. Fernandes(IC), Alex D. Batista(PQ) e João Flávio S. Petrucci(PQ)
jfpetrucci@ufu.br

¹Instituto de Química, Universidade Federal de Uberlândia (UFU), Campus Santa Mônica, Uberlândia-MG

Palavras Chave: *Air pollution monitoring; Low-cost sensors; µPAD; 3D Printing; Optical sensors*

Highlights

Gas sampling using microfluidic passive sampler coupled to smartphone as detector; Quantification performed by a digital image treatment; low-cost 3D printed platform

Resumo/Abstract

Air quality is a major global concern with a wide and pronounced impact and directly related to the welfare of mankind. Nowadays, people are more concerned about quality of the air they are exposed. The World Health Organization states that about 8 million of premature death is caused every year by means of combined ambient (outdoor 4.2M) and household (indoor 3.8M) air pollution effects, which is closely related to stroke, lung cancer, chronic pulmonary disease and acute respiratory infections. Besides, 91% of the world's population live in places exceeding air quality guidelines. Thus, investing in air quality means to improve the life's quality of people. In Brazil, the 'National Air Quality Control Program' (PRONAR) established the creation of a 'National Air Quality Monitoring Network', however, even after almost 30 years only 1.6% of Brazilian cities measure the concentration of atmospheric pollutants daily or weekly, meaning that most Brazilian cities remain without any solid information about the air composition that the population breathe. Operational complexity, lack of qualified professionals, political apathy and high costs related to the acquisition and maintenance of air quality stations are the main reasons for poor air quality database in Brazil. In this context, the development of portable and low-cost yet selective compact gas sensors that provide mobile air pollution estimates in Brazilian cities are a major challenge and an essential demand to (i) monitoring of atmosphere composition in punctual or large areas (e.g. Atmosphere of urban cities), (ii) creation of an inventory of sources of the emission of air pollutants, (iii) enable fast political actions related to modification of local atmosphere composition, (iv) correlate the concentration of air pollutants to other meteorological variables for better understanding of the chemistry of atmosphere. In this work, the indirect chemical method based on the discoloration reaction of the indigo dye was used to determine the atmospheric ozone concentration for a sampling period of 8 hours. The analysis protocol is based on the impregnation of 3µL of indigo solution on the surface of a circular microfluidic paper (µPAD) device with a diameter of 10 mm and exposition to Ozone afterwards. A device was designed to act as a passive sampler holder and was coupled to a smartphone to obtain the analytical signal *in situ* and manufactured using 3D printing technology, a procedure that considerably reduces the costs of an atmospheric pollutant sensor. The analytical signal is obtained using the camera and a smartphone app for acquisition of digital images and subsequent analysis of the color intensity of the dye, at RGB and gray scales. The determination of atmospheric ozone will be done using passive sampling with sampling time of 8 hours. The designed sampler holder has a diameter of 10 mm and a diffusion path (z) of 15 mm. Firstly, the relation of the analytical signal, µPAD diameter and concentration and volume of indigo was evaluated, and the optimized conditions were 10 mm of diameter and volume of 3 µL. For calibration purposes, the variation of the analytical signal at different dye concentrations between 0.5 and 10 mmol L⁻¹ was evaluated and a linear relation with $r^2 > 0.99$ was obtained, which indicates that the quantification method can be applied to relate the residual indigo concentration after reaction with atmospheric ozone. The sensors will be applied to estimate the average concentration of ozone in the city of Uberlândia for a period of 8 hours and later will also be applied for indoor ozone monitoring. The validation of the sensors will be performed comparing the results obtained with the standard instrument for the analysis of atmospheric ozone. The construction of portable, compact and low-cost sensors for *in situ* monitoring of different types of air pollutants as an alternative to estimate the air quality of Brazilian cities is anticipated.

Agradecimentos/Acknowledgments

Ao CNPq e FAPEMIG

42ª Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química: Eixos Mobilizadores em Química

Design and evaluation of leishmanicidal activity of benzophenone derivatives.

Bárbara F. Farias (PG)^{1*}, João L. Baldim (PQ)², Tayná R. Nunes (IC)¹, Nathália F. Pereira (IC)¹, Diogo T. Carvalho (PQ)³, Thiago B. Souza (PQ)⁴, Daniela A. Chagas-Paula (PQ)¹, Danielle F. Dias (PQ)¹

barbara_farias31@hotmail.com

¹Instituto de Química, UNIFAL-MG; ² Centro de Ciências Naturais e Humanas, UFABC-SP ; ³Faculdade de Ciências farmacêuticas, UNIFAL-MG; ⁴ Departamento de Farmácia, UFOP.

Palavras Chave: Leishmaniasis, structure–activity relationship, neglected diseases, Computer Aided Drug Design

Highlights

Benzophenones exhibit promising leishmanicidal activity
Design of new and efficient candidates
Computer Aided Drug Design methods drive the design of drug candidates

Resumo/Abstract

High mortality rates are associated with Leishmaniasis.¹ The use of expensive drugs that cause several side effects have increased the scientific interest in the design of more efficient drugs.² This study aims to create a computational method based on molecular features to predict the activity of benzophenone derivatives in order to propose new drugs against *Leishmania* spp.^{3,4,5} The method uses the range of leishmanicidal activities of benzophenone derivatives against promastigote and amastigote forms of the parasite to the prediction of the designed candidates. The methods evaluate the substituents in the benzophenone derivatives providing a starting point to chemical modifications (promising substituents in blue, Figure 1). The results obtained using a machine learning technique, Random Forest, demonstrated which substituents could be efficient against *L. spp.* The validation results reached values of $R^2 = 0.999/0.999$, $Q^2 = 0.942/0.983$, and $P^2 = 0.955/0.944$, respectively for amastigote and promastigote forms (values are >0.6 and scrambling <0.5). The benzophenones derivatives proposed followed a rational design based on the structures, robustness and predictive power of the method. In this sense, novel derivatives could be proposed.

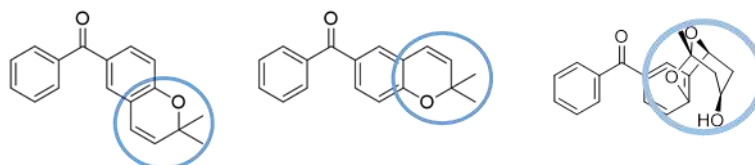


Figure 1: Promising structural moieties selected by the method

References:

- ¹ Clin Microbiol Infect. 2011, 17, 1478.
- ² Rev. Bras. Epidemiol., 2004, 7, 338.
- ³ Bioorg. Med. Chem., 2013, 21, 3114.
- ⁴ Med. Chem Res 2017, 26, 1149.
- ⁵ Molecules 2007, 12, 1548.

Acknowledgment:



Área: ELE

(Inserir a sigla da seção científica para qual o resumo será submetido. Ex: ORG, BEA, CAT)

Nº de Inscrição: 00471

(Inserir o número de inscrição do autor que fez a submissão)

Electrochemical study of PPy / CG conductive composite on different electroactive surfaces**Maria R.F. Oliveira (PG),^{1*} Roselyne F. Furtado (PQ),² Katiany do V. Abreu (PG),¹ Airis M. A. de Melo (PG),¹ Pilar H. González (PQ),³ Carlucio R. Alves (PQ).¹****ronielefelimrfo@hotmail.com**¹Departamento de Química, UECE; ²Embrapa Agroindústria Tropical, EMBRAPA; Departamento de Físico Química Aplicada, UAM

Palavras Chave: Eletrodeposição, Polipirrol, Goma de cajueiro, Diferentes substratos, Filme condutor.

Highlights

The PPy and polysaccharide conducting films. Voltammetric growth. Active films in redox process. Successive increase in the faradaic current. Different electrodeposited surfaces.

Resumo/Abstract

The ability to produce electricity is one of the most important properties of conducting polymers. Electrochemically in situ, allowing a control of the polymerization reaction. Nanocomposites formed from polypyrrole and polyelectrolyte have been extremely interesting because the films are synthesized homogeneous nanofibers and nanoparticles morphologies. Polysaccharides from cashew gum, a renewable natural polyelectrolyte is an exudate of *Anacardium occidentale* L., from Brazil. PPy and polysaccharide conducting films were electrodeposited on gold, platinum and vitreous carbon surfaces by cyclic voltammetry. The electrochemical measurements were obtained in a potentiostat/galvanostatic Autolab PGSTAT 12 using software Nova (Metrohm®). Electrochemical cell (10 mL) was used in the experiments being three kind of working electrodes: (a) gold disk electrodes ($\Phi = 0.08 \text{ cm}^2$), (b) platinum ($\Phi = 0.08 \text{ cm}^2$) and (c) vitreous carbon ($\Phi = 0.12 \text{ cm}^2$). Platinum wire electrode as auxiliary and Ag/AgCl KCl 3 M as the reference electrode. The electrodepositions of PPy/CG on the different surfaces were performed until 50 cycles. The process was optimized by varying concentrations of Py and CG and scanning speed. The voltammetric growth of the PPy/CG composite showed active films in redox process with a successive increase in the faradaic current in the different electrodeposited surfaces. This it was verified by the transport of charges. The electrochemical study of the new material confirmed the feasibility of producing the conductive composite in different surfaces, from the use of renewable raw material, with potential application in biosensors and electronic devices.

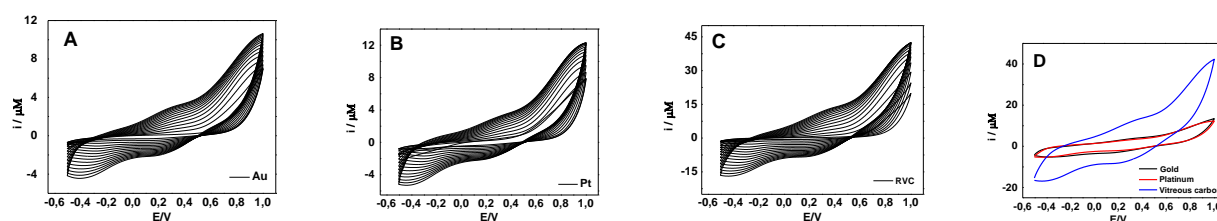


Figure 1. Voltammetric growth of the PPy/CG composite on different electrodeposited surfaces ($[\text{Py}] = 0.3 \text{ M} + [\text{CG}] = 10\%$, 15 cycles): gold (A), platinum (B), vitreous carbon (C), and cyclic voltammograms at the 15th cycle of the composite deposition on different electrodeposited surfaces (D), $v = 50 \text{ mV s}^{-1}$.

Methane production from a mixture of vinasse and pentose liquor using a new hybrid anaerobic reactor

Murillo Cardoso Torres (IC),¹ Oscar Fernando Herrera Adarme (PG),^{1,2*} Bruno Eduardo Lobo Baêta (PQ),¹ Leandro Vinicius Alves Gurgel (PQ),¹ Sérgio F. de Aquino (PQ).¹

murilocardoso9@gmail.com; oscarherrera10@gmail.com

¹Laboratório de Química Tecnológica e Ambiental, Departamento de Química, UFOP; ²Programa de Pós-Graduação em Engenharia ambiental, UFOP

Keywords: Vinasse, Pentose Liquor, Anaerobic Digestion, Sugarcane Biorefinery, Biogas.

Highlights

Anaerobic co-digestion of pentoses liquor, vinasse, yeast extract and ashes were assessed in a new hybrid reactor and methane yield was estimated at 169.78 L CH₄/kg COD during the best process condition.

Resumo/Abstract

The production of biogas using anaerobic co-digestion process from the pentoses liquor, obtained by thermal pretreatment of sugarcane bagasse, and other residual streams of the sugarcane biorefinery, such as vinasse, yeast extract and ashes from bagasse burning was evaluated in this work. The energy generated by this process (CH₄ combustion) can contribute to the integration of 1G and 2G ethanol process production maintaining its economic viability.

In this context, the aim of this project consisted in evaluate the continuous operation of a new hybrid anaerobic reactor, fed with a mixture of vinasse and pentoses liquor (75-25%) aiming the optimization of methane production. The reactor (1,5 L of useful volume) was inoculate with UASB sludge cow manure, yeast extract and ashes, and operated at a hydraulic retention time of 13.3 h in a continuous mode with an organic loading rate of 1.1 kg COD/(m³·d). Parameters from the reactor influent and effluent were analyzed in duplicate by means of pH, chemical oxygen demand (COD), monosaccharaides, furans and volatile fatty acids and the amount of methane (biogas) was analyzed by gas chromatography (Shimadzu GC, model 2014/TCD). The results of the COD concentration in the reactor influent and effluent and of VFA accumulation are shown in Figure 1a. As can be seen, reactor reached stability (around day 50), with 66% of COD removal and 445.05 mg/L of total VFA accumulation. The daily methane production reached 401.05 NmL CH₄/day (Figure 1.b), thereby suggesting that the new reactor responded positively to the mixture fed, with a higher conversion of organic matter to methane (Ribeiro et al., 2017). These findings are promising and indicate the potential of bioenergy production from sugarcane biorefinery wastes.

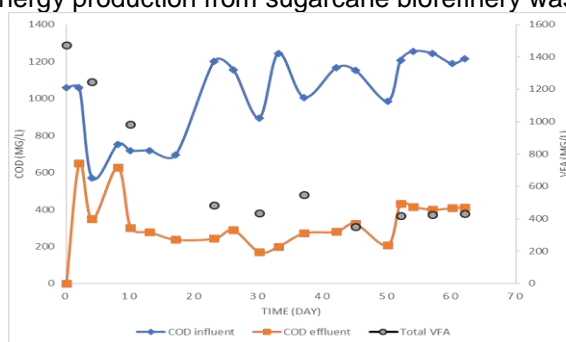


Fig. 1a

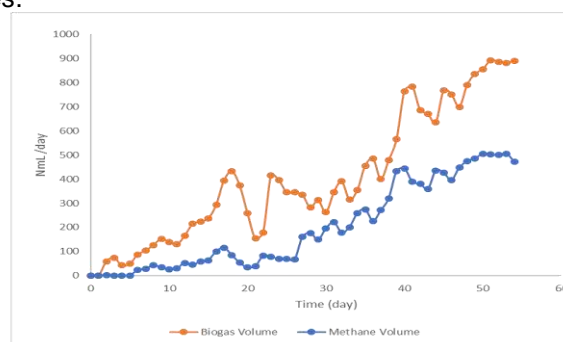


Fig. 1b

Ribeiro, F.R., Passos, F., Gurgel, L.V.A., Baêta, B.E.L., de Aquino, S.F., 2017. Anaerobic digestion of hemicellulose hydrolysate produced after hydrothermal pretreatment of sugarcane bagasse in UASB reactor. *Sci. Total Environ.* 584–585, 1108–1113.

Agradecimentos/Acknowledgments

The authors would like to thank the Research Support Foundation of the State of Minas Gerais (FAPEMIG), Universidade Federal de Ouro Preto-UFOP, CAPES, and National Council for Scientific and Technological Development (CNPq) for their financial support.

Use of two *Tillandsia* species as air quality biomonitors at an important Brazilian highway

Karmel Beringui (PG),¹ Fernanda Monteiro (PG),¹ Lucia Helena Soares S. Pereira (IC),¹ Rachel Hauser-Davis (PQ),² Luiz Francisco P.G Maia (PQ),³ Adriana Gioda (PQ)¹

karmelberingui@gmail.com

¹Chemistry Department, PUC-Rio; ² CESTE, ENSP, Fiocruz; ³Meteorology Department, UFRJ

Keywords: Biomonitoring, Atmospheric pollution, Metals, Particulate matter

Highlights

Metal content in *Tillandsias* specimens exposed near a highway were determined. Biomarkers related to plant detoxification mechanisms were assessed. Pollutant sources were predicted.

Abstract

Environmental pollution has been increasingly studied due to the intensification of pollutant emissions by anthropogenic activities¹. Air quality monitoring is vital, as pollutants are dispersed non-uniformly², but the traditional monitoring procedure is expensive. One suitable approach is biomonitoring, which uses living organisms to evaluate the presence of pollutants³. A stretch of the BR-040 highway, located in Rio de Janeiro, Brazil, shelters an important environmental Atlantic Forest preservation area. In this context, this study aims to assess the air quality of this region using *Tillandsia stricta* ($n=3$ by collection) and *Tillandsia usneoides* ($n=4$ by collection) as biomonitors. *T. usneoides* was installed in six sites and *T. stricta* in three sites over the highway. Plant sampling was performed every 45 days from March to October 2018. The elemental composition of plant tissues was determined by Inductively Coupled Plasma Mass Spectrometry (ICP-MS) and the enrichment factor was calculated in relation to the concentrations found in the plants prior to transplantation. An exploratory study of oxidative stress biomarkers (OSB) was carried out by quantifying metallothionein (MT), reduced glutathione (GSH), and hydrogen peroxide (H_2O_2) and using size exclusion chromatography coupled to ICP-MS to verify the association of metals with MT and GSH. Most sites presented Mn, Zn, and Cd enrichment. The OSB analysis revealed significant correlations with Fe, Mn, Co, Cu, Ni, and Zn, which may indicate concentrations above physiological levels. Figure 1 displays metals that may be associated with MT and GSH, suggesting that the assessed plants are performing detoxification mechanisms.

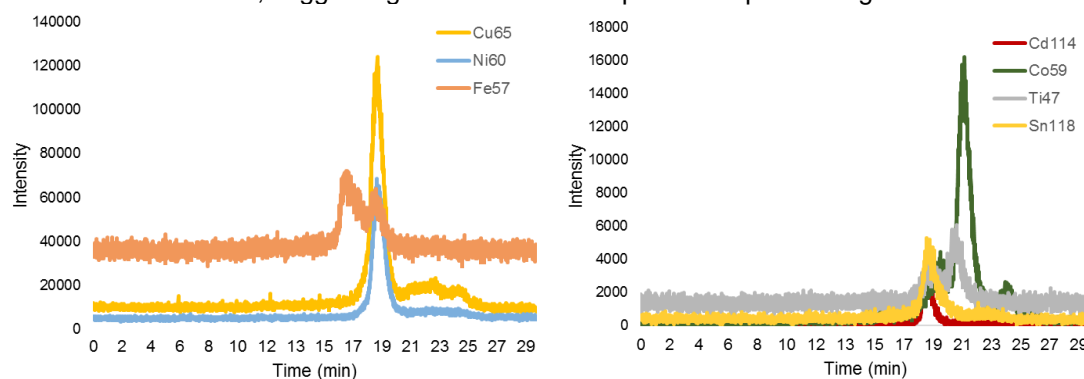


Figure 1 - Chromatograms obtained by size exclusion chromatography coupled to ICP-MS in *T. stricta* from one of the sampling site sites, showing metal element signals eluting at the same time as metallothionein and reduced glutathione.

- Mateus, V. L., Monteiro, I. L. G., Rocha, R. C. C., Saint'Pierre, T. D. & Gioda, A. Study of the chemical composition of particulate matter from the Rio de Janeiro metropolitan region, Brazil, by inductively coupled plasma-mass spectrometry and optical emission spectrometry. *Spectrochim. Acta - Part B At. Spectrosc.* **86**, 131–136 (2013).
- Gulia, S., Shiva Nagendra, S. M., Khare, M. & Khanna, I. Urban air quality management - A review. *Atmos. Pollut. Res.* **6**, 286–304 (2015).
- Maki, E. S., Shitsuka, R., Barroqueiro, C. H. & Shitsuka, D. M. Utilização de Bioindicadores em Monitoramento de Poluição. *Biota Amaz.* **3**, 169–178 (2013).

Synthesis of 1,2,3-Triazole Derivatives of 4,4'-Dihydroxybenzophenone and Evaluation of Their Elastase Inhibitory

Maria Cecília F. Dias (TM),^{1*} Bianca Lana de Sousa (PG),² Thiago Q. Gularte (IC),² Robson R. Teixeira (PQ),² Jorge A. N. Santos (PG),³ Tiago A. O. Mendes (PQ),⁴ Eduardo J. Pilau (PQ),⁵ Antônio J. Demuner (PQ),² Marcelo H. dos Santos (PQ).²

mceciliafdias@yahoo.com.br; biancalanasousa@yahoo.com.br

¹Instituto de Ciências Agrárias, UFMG; ²Departamento de Química, UFV; ³Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia do Sul de Minas Gerais; ⁴Departamento de Bioquímica, UFV; ⁵Departamento de Química, UEM.

Palavras Chave: Benzophenone, Elastase, Serine protease, 1,2,3-triazole, "click" reaction.

Highlights

Sixteen derivatives of 4,4'-dihydroxybenzophenone triazole were synthesized. Elastase inhibitory activity of the derivatives was assessed. Compound **8** showed the highest inhibited the proteolytic action of elastase ($IC_{50} = 16.6 \pm 1.9 \mu\text{mol L}^{-1}$). Docking study shows that **5-8** and **18** bind to the catalytic center of this enzyme.

Resumo/Abstract

Molecular hybridization has been shown to be a promising strategy for obtaining new compounds¹. "Click" chemistry is a strategy to obtain new drugs through molecular hybridization. So we describe the synthesis of novel triazole derivatives from 4,4'-dihydroxybenzophenone and we evaluated of their elastase inhibitory activity². The 1,2,3-triazoles were obtained via the copper(I)-catalyzed azide-alkyne cycloaddition reaction (CuAAC), or click reaction, between bis(4-(prop-2-yn-1-yloxy))benzophenone and benzyl azides (Figure 1). Four derivatives exhibited significant inhibitory effects (Table 1).

Table 1. IC_{50} values of the inhibitory effect of triazole compounds on elastase.

| Compound | 5 | 7 | 8 | 18 | EGCG |
|-----------------------------|-------------------|-------------------|-------------------|-------------------|--------------------|
| IC_{50} (μM) | 72.1 ± 3.1 | 45.7 ± 4.7 | 16.6 ± 1.9 | 32.7 \pm 0.8 | 220.4 ± 5.7 |

IC_{50} : half maximal inhibitory concentration; EGCG: epigallocatechin-3-gallate.

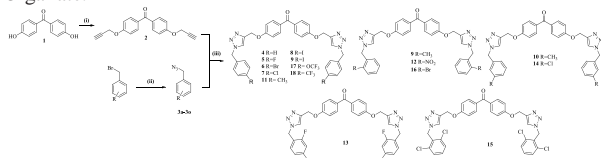


Figure 1. Reagents and conditions: (i) propargyl bromide (2.4 eq.), K_2CO_3 (4.0 eq.), acetone, reflux, 24 h; (ii) sodium azide (4.00 eq.), DMSO, r.t., 2 h; (iii) $CuSO_4 \cdot 5H_2O$ (0.40 eq.), sodium ascorbate (0.80 eq.), DCM/ H_2O (1:1 v/v), r.t., 6 h,³ 42–70%.

The most active compound *in vitro* (**8**) was found to bind to elastase with the inhibition constant (K_i) of 11.12 μM , thereby illustrating competitive inhibitory behavior (Figure 2).

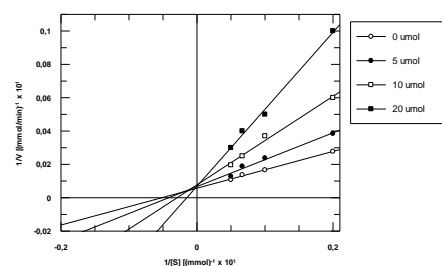


Figure 2: Lineweaver–Burk plot for hydrolysis of suc-A-A-A-pNA by elastase in the presence and absence of compound **8**.

Docking study shows that **5-8** and **18** bind to the catalytic center of elastase (Figure 3).

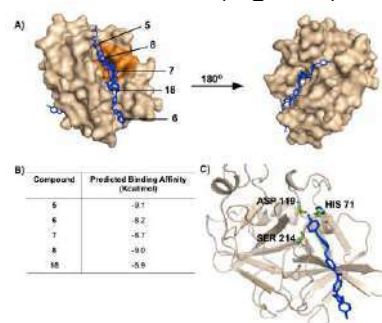


Figure 3. Predicted molecular interactions of the synthetic compounds with elastase.

- Kashmiri, L.; Pinki, Y.; Ashwani, K.; Anil, K.; Avijit, K. P.; *Bioorg. Chem.* **2018**, *77*, 236.
- Kant, R.; Singh, V.; Nath, G.; Awasthi, S. K.; Agarwal, A.; *Eur. J. Med. Chem.* **2016**, *124*, 218.
- Dias, M. C. F.; Gularte, T. Q.; Teixeira, R. R. Santos, J. A. N.; Pilau, E. J.; Mendes, T. A. O.; Demuner, A. J.; Dos Santos, M. H. *J. Braz. Chem. Soc.*, 2018, 1-11.

Agradecimentos/Acknowledgments

This work was supported by FAPEMIG, CAPES, FINEP and CNPq.

42ª Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química: Eixos Mobilizadores em Química

Área: COL

Nº de Inscrição: 00479

Synthesis and characterization of capsules based on conductive polymers

Joana C. Biazzi (IC),¹ Gabriela A. Tonet (PG),¹ Marcio Vidotti (PQ),¹ Izabel C. R. Vidotti (PQ).^{1*}

joanacarolina.bps@gmail.com; iriegel@gmail.com

¹Department of Chemistry, Federal University of Paraná - UFPR.

Palavras Chave: Capsules, Linseed oil, Stimuli-responsive materials, Polypyrrole, Corrosion, Prevention.

Highlights

Stable linseed oil-water emulsions. Droplets of an emulsion acting as templates for chemical polymerization of pyrrole. Stimuli-responsive capsules as an alternative for corrosion prevention.

Resumo/Abstract

Stimuli-responsive capsules have been an interesting alternative in the obtention of intelligent coatings for corrosion prevention, since they are able to provide a system with self-responsive features^{1,2,3}. This work presents the synthesis and characterization of capsules using polypyrrole, a conductive polymer, as shell material, and linseed oil, a drying oil, as core material. In addition, benzotriazole, a widely known corrosion inhibitor, was also added as core material. The use of a conductive polymer as shell material confers to the capsule's shell an electrochemical responsive behavior. The drying oil imparts a self-regenerating property to the system, since it can reconstitute the surface upon damage. The benzotriazole acts on inhibiting the corrosion process on the metal surface. Therefore, the proposed capsules are expected to have multifunctional features being very interesting to produce intelligent coatings.

The synthesis of the capsules was performed through the soft template route associated with interfacial polymerization, in which the droplets of a stable oil/water emulsion act as templates for chemical polymerization of pyrrole. The study of the emulsion stability showed that the ideal oil-to-water volume ratio was 3%. An ultrasonic probe was used to provide the necessary energy for the emulsion formation. The surfactants analyzed were Span 60, Tween80 and sodium dodecylbenzene sulfonate (SDBS). The Tween80 and SDBS presented the best results and, therefore, were used for the capsules synthesis. For the synthesis of the capsules' shell, the monomer pyrrole was added to the oil phase before the emulsion formation. Then, an oxidizing agent (ammonium persulfate) was added to the emulsion in 200 μ L aliquots. The close contact between the oxidizing agent and the monomer happens at the oil-water interface, forming the polymer and the capsule shell.

The presence of polypyrrole, linseed oil and benzotriazole was evidenced by FTIR spectroscopy. The formation of spherical capsules was evidenced by optical microscopy, transmission electron microscopy (TEM) and scanning electron microscopy (SEM). The capsules' diameter varied between 200 nm and 700 nm. All the results from this study, obtained through the techniques mentioned before, demonstrated that the chosen synthetic route successfully formed the capsules.

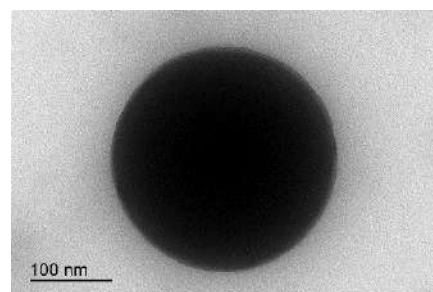


Figure 1: TEM image of a nanocapsule

¹ Vimalanandan, A. et al. *Advanced Materials* **2013**, 25, 6980–6984.

² Zhang, F. et al. *Corrosion Science* **2018**, 144, 74-88.

³ Leal, D. A., Riegel-Vidotti, I.C., Ferreira, M.G.S, Marino, C.E.B. *Corrosion Science* **2018**, 130, 56-63.

Agradecimentos/Acknowledgments

We would like to thank UFPR, CME-UFPR, CAPES (PROEX and Code 001) and CNPq-PIBIC.

A novel orthometalated triruthenium complex containing a phenazine-derived ligand (dppz): synthesis and spectroscopic characterization

Pedro B. H. Chrispim* (PG),¹ Sofia Nikolaou (PQ)²

pedro.chrispim@usp.br

^{1,2} Department of Chemistry, FFCLRP-USP

Keywords: Coordination Chemistry, Ruthenium, Synthesis, Spectroscopy, Orthometalated

Highlights

A new orthometalated triruthenium complex was synthesized and characterized. Spectroscopic results show coordination of dppz, a DNA intercalator. The complex is designed to be an anticancer metalodrug.

Abstract

Poliruthenium compounds have been broadly investigated due to their electronic, magnetic and redox features¹. Some of them also show biological properties, such as trypanocidal and anticancer activity². However, there are only a few works regarding orthometalated complexes³. The synthesis consists on refluxing RuCl₃ salt with sodium acetate and acetic acid in ethanol, in order to obtain the μ₃-oxo-μ₆-acetate trinuclear core. The compound is reduced and a CO ligand is added, acting as a protecting group, in order to place two picoline ligands in an asymmetrical way. The next steps involve its oxidation to remove CO, followed by addition of a 1,5 excess of dppz ligand, making a room-temperature mixing in CH₂Cl₂. The product was purified in Al₂O₃ column chromatography with a 3:7 ACN:DCM mixture. This yields the five-acetate, orthometalated complex,

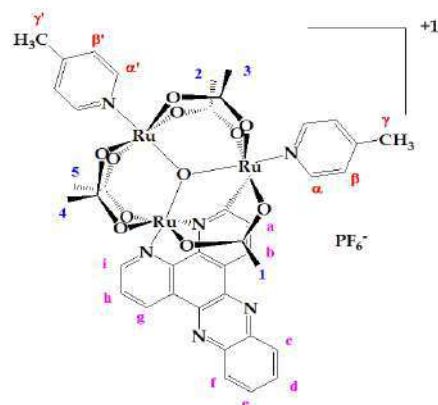


Figure 1. Structure of compound [Ru₃O(CH₃COO)₅(4-pic)₂(dppz)]PF₆

with formula [Ru₃O(CH₃COO)₅(4-pic)₂(dppz)]PF₆ [1], where 4-pic = 4-picoline and dppz = dipyrldophenazine. IR absorption spectrum shows typical wavenumbers (ν) for vibration modes observed for these compounds: ν_{as} [Ru₃O] core at 558 cm⁻¹; ν_{as} (PF₆⁻) at 843 cm⁻¹; ν_{as} (CH₃COO⁻) at 1503 cm⁻¹ and ν_{sym} (CH₃COO⁻) at 1417 cm⁻¹. The electronic absorption spectrum in acetonitrile solution shows three typical bands: at 695 nm (ϵ = 6855 L mol⁻¹ cm⁻¹), assigned to a transition within the metallic unit; at 349 nm (28875 L mol⁻¹ cm⁻¹) assigned to a metal-to-ligand charge transfer, and at 272 nm (69820 L mol⁻¹ cm⁻¹), intra-ligand transitions. High resolution ESI-MS² spectra show a peak at *m/z* 1081,9751, ascribed to the molecular ion [1 - PF₆]⁺. The fragmentation pattern showed: peaks at *m/z* 1007,9295 due to the loss of one picoline ligand and the coordination of one water molecule [1 - PF₆⁻ - 1pic + H₂O]⁺; at *m/z* 989,9182 assigned to [1 - PF₆⁻ - 1Pic]⁺; at *m/z* 932,8821 ascribed to [1 - PF₆⁻ - 2Pic - OAc]⁺ and at *m/z* 896,8601 assigned to [1 - PF₆⁻ - 2Pic]⁺. ¹H 500 MHz NMR spectrum reveals the paramagnetic anisotropic effect on hydrogens near to the [Ru₃O] unit,

which bears one unpaired electron. This causes hydrogen in carbon **i** to be shifted to 0,50 ppm, an unusual value for an aromatic hydrogen. The hydrogen in **a** is also affected and appears as a doublet in -13,84 ppm. A singlet in 13,02 ppm was assigned as the H atoms on the lone acetate lying above the dppz ligand, due to aromatic ring current.

1. TOMA, H. E. et al. Monomeric and extended oxo-centered triruthenium clusters. *Coordination Chemistry Reviews*, v. 219–221, p. 187–234, 2001.
2. POSSATO, B. et al. New uses for old complexes: The very first report on the trypanocidal activity of symmetric trinuclear ruthenium complexes. *Journal of Inorganic Biochemistry*, v. 176, n. February, p. 156–158, 2017.
3. DAI, F. R. et al. Spectroscopic, electrochemical, and DFT studies of oxo-centered triruthenium cluster complexes with a bis(tridentate) triazine ligand. *European Journal of Inorganic Chemistry*, v. 1, n. 14, p. 2306–2316, 2011.

Acknowledgments

The authors would like to thank Brazilian agencies Conselho Nacional de Pesquisa e Desenvolvimento Tecnológico (CNPq), Fundação de Amparo à Pesquisa (Fapesp) and Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior (CAPES) for the financial support for this work.

Synthesis and cytotoxicity evaluation of trifluoromethyl aryl diamides

Michelle Peixoto Rodrigues (PG),¹ Róbson Ricardo Teixeira (PQ),¹ Raoni Pais Siqueira (PQ),² Gustavo Costa Bressan (PQ)²

robsonr.teixeira@ufv.br

¹Departamento de Química, UFV; ²Departamento de Bioquímica e Biologia Molecular, UFV

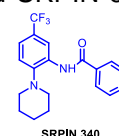
Palavras Chave: SRPIN 340, diamides, cytotoxicity, azlactone

Highlights

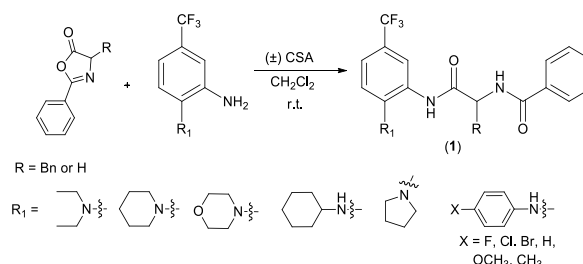
It is herein described the preparation of a series of trifluoromethyl aryl diamides and the evaluation of their cytotoxicity against HeLa, HepG2 (tumor cells), and HEK 293 (non-tumor cells).

Resumo/Abstract

The compound *N*-(2-piperidin-1-yl)-5-(trifluoromethyl)phenyl) isocotinamide, also named SRPIN 340, is an ATP-competitive inhibitor that is highly selective for the kinases SRPK1 and SRPK2.^{1,2} Investigations conducted by our research group have demonstrated the antileukemia³ and antimetastatic⁴ effects of SRPIN 340 and its analogues. Inspired by SRPIN 340 structure and its pharmacological activities, we describe herein the preparation and cytotoxicity evaluation of diamides of general structure **1**.

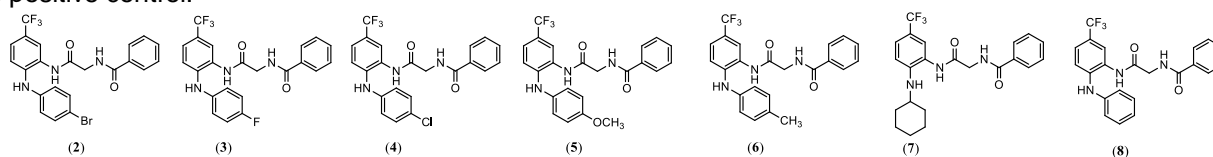


A series of twenty two diamides **1** were prepared via the Brønsted acid catalyzed reaction of amines with azlactones⁵ (Scheme 1).



Scheme 1

The cytotoxicity of the diamides were evaluated against HeLa (adenocarcinoma) and HepG2 (liver hepatocellular cells) tumor cell lines as well as on HEK 293 (human embryonic kidney 293 cells, no-tumor cells). At 100 $\mu\text{mol L}^{-1}$ and after 48 h of treatment, the compounds **2-8** shown below were the most active derivatives reducing cell viability by more than 80%. In addition, they were more active than SRPIN 340 used as positive control.



The exposure of HEK 293 cells to the diamides revealed that among the most active substances **2-8**, compounds **7** and **8** were significantly less toxic than the others. In summary, a series of diamides were successfully prepared. The evaluation of the cytotoxicity revealed that seven derivatives reduced cell viability by more than 80% at 100 $\mu\text{mol L}^{-1}$ and that they are more active than SRPIN 340.

References

- ¹ Fukuhara, T.; Hosoya, T.; Shimizu, S.; et al. *Proc. Natl. Acad. Sci. U S A*, **103**, **2006**, 11329–11333.
- ² Hagiwara, M.; Fukuhara, T.; Suzuki, M.; Hosoya T. United States Patent, **2009**, US7569536 B2.
- ³ Siqueira, R. P.; Barbosa, E. A. A.; Polêto, M. D.; et al. *Plos One*, **2015**, pone.0134882
- ⁴ Moreira, G. A.; Lima, G. D. A.; Siqueira, R. P.; et al. *Toxicol. Appl. Pharmacol.*, **2018**, 214-223.
- ⁵ Pereira, A. A.; De Castro, P. P.; De Melo, A. C.; et al. *Tetrahedron*, **70**, **2014**, 3271-3275.

Agradecimentos/Acknowledgments

We are grateful to FAPEMIG, CNPq, CAPES

Área: QPN

Nº de Inscrição: 00482

Evaluation of the cytotoxic activity and investigation of the chemical profile of fungi derived from the ascidian *Aplidium accarensense*

Thaís F. Alves (IC),¹ Larissa M. O. Carvalho (IC),¹ Luis C. Kellner Filho (PG),¹ Letícia P. Pimenta (PG),¹ Rita Cássia N. Pedroso (PG),¹ Kátia A. Siqueira (PG),² Marcos A. Soares (PQ),² Gustavo M. Dias (PQ),³ Denise C. Tavares (PQ),¹ Ana H. Januário (PQ).^{1,*}
ana.januario@unifran.edu.br

¹Natural Products Research Group, University of Franca, Franca, SP, 14404-600, Brazil; ²Department of Botany and Ecology, Federal University of Mato Grosso, Cuiabá, MT, 78060-900, Brazil; ³Federal University of ABC, Santo André, SP, 09210-170, Brazil.

Keywords: *Aplidium accarensense*; *Lasiodiplodia pseudotheobromae*; *Trichoderma sp*; Cytotoxicity; Marine-derived fungi

Highlights

Methanolic extracts of two fungal lines 1A14 and 1A15 associated with *Aplidium accarensense* ascidian were performed and their fractions were tested for cytotoxic activity.

Abstract

Ascidians are a group of exclusively marine invertebrates, typically bioproducers of nitrogen compounds, highlighting a wide variety of peptides, alkaloids and nitrogen derivatives ¹. The chemiodiversity observed in the ascidians is related to mechanisms of protection against predators and to the stress caused by the extreme conditions in which these animals are exposed, such as high salinity, high pressure, variation of temperature and luminosity, and in addition these animals are also frequently hosts of symbiotic microorganisms ^{2,3}. In some cases, there is evidence that symbiotic or associated marine microorganisms may be the true source of the bioactive metabolites originally isolated from their hosts ⁴. The objective of this work was to investigate the chemical profile and cytotoxic potential of the fungi *Lasiodiplodia pseudotheobromae* - 1A14 and *Trichoderma sp* - 1A15 associated with the ascidian *Aplidium accarensense*. The identification of the fungal lineages was performed by morphological characteristics, observation of micromorphological characteristics in microculture and partial sequencing of the ITS region of the rDNA. Fungi *L. pseudotheobromae*-1A14 and *Trichoderma sp* -1A15, were grown in rice medium, extracted by cold maceration directly with MeOH, obtaining the respective crude extracts (1A14 and 1A15). The fractions were obtained from the crude extracts of the mentioned fungal species after a C-18 column and were analyzed by HPLC-DAD and ¹H-NMR. The cytotoxicity potential of the fractions from 1A14 and 1A15 was also evaluated. The 1A14_17E fraction showed a major peak at Rt 21.5 min with λ_{max} at 260, 350 and 386 nm under the HPLC analysis (C-18 column, linear gradient CH₃OH/H₂O/CH₃COOH (5:94.8:0.2 v/v/v) at 100% CH₃OH in 40 min, flow 1.0 mL/min, sample volume 20 μ L, λ 254 nm, 250 mm). Fraction 1A15_14D presented major peak with Rt 23.3 min and λ_{max} at 249 and 292 nm. The fraction 1A15_14E presented major peak with Rt 27.6 min and λ_{max} at 244 and 291 nm. The NMR spectra of fractions 1A14_17E and 1A15_14E showed several signs in the most protected region of the spectrum (methyls and methylenes region (0-2 ppm) and a lack of significant signals in the aromatic region (7-8 ppm). Concerning the cytotoxic assay against normal human lung fibroblast cell line (GM0792A), the 1A14_17E fraction from the 1A14 fungi, showed a high toxicity with IC₅₀ of 169.0 μ g/mL. On the other hand, the fraction 1A15_14D from the 1A15 lineage presented lower cytotoxicity, with IC₅₀ of 1017.7 μ g/mL, whereas the 1A15_14E fraction revealed high cytotoxicity, with an IC₅₀ of 46.7 μ g/mL. These results will lead to the sequence of the chemical and biological research of the fungi 1A14 and 1A15 associated with the *A. accarensense* invertebrate targeting the active compounds.

¹ Blunt, J. W., Copp, B. R., Keyzers, R. A., Munro, M. H. G., Prinsep, M. R. *Nat. Prod. Rep.*, 31, 2014.

² Lopanik, N. B. *Funct. Ecol.*, 28, 2014.

³ Velusamy, A., Manigandan V., Saravanan, R., Umamaheswari, S. *Int J Pept Res Ther.*, 24, 2018.

⁴ Wang, C. Y., Wang, B. G., Brauers, G., Guan, H. S., Proksch, P., Ebel, R. *J. Nat. Prod.* 65, 2002.

Acknowledgements

CAPES, CNPq, FAPESP

Área: BEA

Nº de Inscrição: 00486

Quantitative analysis using a flatbed scanner and Automated Digital Image Analysis: Total reducing capacity of beers using the Folin-Ciocalteu assay.

Larissa Mascarenhas Krepsky (IC),¹ Cláudia Martins Ledesma (PG),¹ Endler Marcel Borges (PQ),^{1*}
marcelborgesb@gmail.com

¹Departamento de Química, FURB.

Palavras Chave: Automated Digital Image Analysis; Beer; Folin-Ciocalteu assay; ImageJ; ReadPlate

Highlights

The Digital images were processed using The RGB color system
The Folin-Ciocalteu assay was carried out using digital images.
48 samples may be analyzed simultaneously in a single 96-micro-well plate image.
Images obtained with a flat bed scanner were almost free of external light interference
Automated digital images analysis was carried out using ImageJ's plugin ReadPlate.

Resumo/Abstract

Folin-Ciocalteu assay is one of the most widespread methods in food science, nutrition research, and industry to measure food reducing capacity. The Folin-Ciocalteu reagent is a mixture of phosphomolybdate and phosphotungstate that was reduced by phenolic compounds in beer. The blue color developed during this redox reaction is proportional to the concentration of phenolic compounds and it can be determined by measuring the absorbance of the solution at 765 nm. Normally, gallic acid is used as standard, because it is a phenolic compound abundant in several plants and foods ¹.

Folin-Ciocalteu assay was carried for the determination of total polyphenols in Brazilian beers. The experiment was carried out using absorbance measured at 765 nm (standard method) and digital images of a 96 micro-well plate acquired with a flatbed scanner (proposed method). Scanned images were opened with public domain image analysis software, ImageJ, that splits all pixels within an image into their red (R), green (G), and blue (B) components. To automate the image analysis process, we used the plugin ReadPlate. The plugin exports the median values of R, G, and B color channels from a circle at the center of each well into an ImageJ's spreadsheet.

Thus, we propose a new method, the Folin-Ciocalteu assay for the quantification of the total reducing capacity of beers based on digital images. The experiment was carried out using absorbance measured at 765 nm and digital images acquired with a flatbed scanner. Scanned images were opened with ImageJ's plugin ReadPlate (ImageJ is a freeware) that splits all pixels within an image into their red (R), green (G), and blue (B) components. The plugin exports the median values of red, green, and blue color channels from a circle at the center of each well into an ImageJ's spreadsheet. Then, these values were transferred to a standard electronic spreadsheet. The proposed method has a 2 to 10 mg of gallic acid/ L range, Limit of quantification, LOD, 0.13 and limit of quantification, LOQ, 0.39, which were four times higher than the standard method (absorbance measured at 765 nm), but it was enough to quantify the total reducing capacity of beers. Both methods had R² higher than 0.99 and equivalent precision and accuracy at a 95% confidence interval. Brazilian Pilsen beers had a 100-200 mg equivalents of gallic acid/L, where Brazilian craft beers had shown a 300-400 mg equivalents of gallic acid/L

Agradecimentos/Acknowledgments

The authors acknowledge financial support and fellowships from the Brazilian agencies FAPESC (Fundação de Amparo a Pesquisa do Estado de Santa Catarina), CNPq (Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico) Project number 402226/2016-0, and CAPES (Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior).

1. Soares, C.; Correia, M.; Delerue-Matos, C.; Barroso, M. F. *J. Chem. Educ.*, **2017**, *94*, 1291-1295.
2. Soldat, D.J.; Barak, P.; Lepore, B.J. *J. Chem. Ed.* **2009**, *86*, 617-621.

Derivatives of the cashew nut shell liquid as lead compounds for anti-virulence drug development.

Marina S. Mendes (IC),¹ Thamires Q. Froes (PG),² Gabriela S. R. H. Cardoso (PG),³ Thais A. M. Ferreira (PG),³ Giselle A. Ramos (PG),³ Luiz A. S. Romeiro (PQ),³ Marcelo S. Castilho (PQ)^{1,2}

mariinasena@gmail.com; castilho@ufba.br

¹Fac. de Farmácia da UFBA; ²Programa de Pós-graduação em biotecnologia da UEFS; ³ Programa de Pós-graduação em Ciências Farmacêuticas da UnB

Palavras Chave: *phzD*, *pyocyanin*, *thermo shift assays*, *Anacardic acid*, *P.aeruginosa*

Highlights

Derivatives of the cashew nut shell liquid as lead compounds for anti-virulence drug development: Anacardic acid derivatives are micromolar inhibitors of PhzD, a key enzyme from *P. aeruginosa* PYO biosynthesis pathway.

Abstract

Over the years, bacterial resistance has become a worldwide concern. However, the number of novel antimicrobials in the Big Pharma pipeline has been decreasing. A promising strategy to overcome this situation is to look for therapeutic alternatives that modulate bacterial virulence, without affecting its viability. *Pseudomonas aeruginosa*'s virulence is highly correlating to pyocyanin (PYO) production. PhzD (E.C. 3.3.2.15) catalyzes one of the early steps of pyocyanin biosynthesis pathway. However, no inhibitors of this promising target have been reported in the literature. The fact that anacardic acid-like compounds (AALC) decrease PYO production (Figure 1) and bear some chemical similarity to the aromatic ring of PhzD substrate, lead us to screen 60 AALC as putative PhzD inhibitors, by thermal shift assays (TSA).

Generally, compounds that increase the protein melting temperature (T_m) are selected as hits, however Matullis and coworkers (2016) have shown that compounds which decrease T_m also bind to the protein. 12 AALC decrease the T_m from PhzD by at least -1° C, at 50 μM concentration (Figure 2-left). Half of those compounds do not show a concentration-response behavior and, for that reason, were discarded. As TSA do not provide K_d values, we employed fluorescein isothiocyanate (FITC) labeled protein to measure the AALC affinity to PhzD.

Figure 1: Effect of AAD over PYO production (left) and *P. aeruginosa* viability (right)

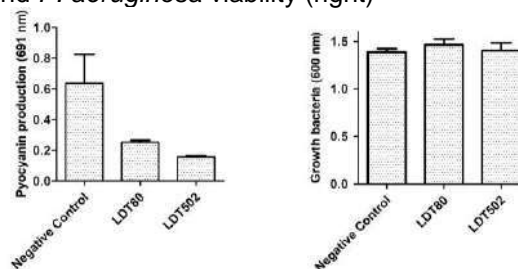
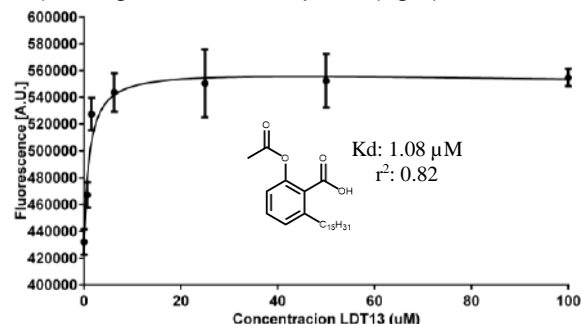
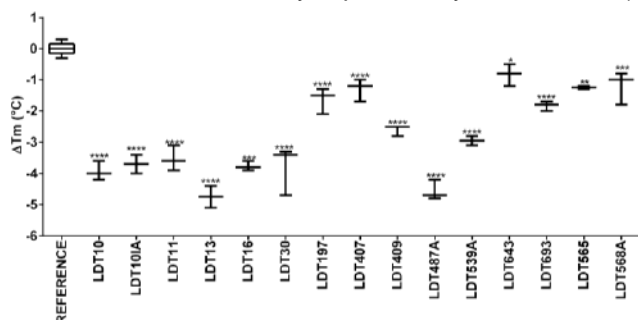


Figure 2: *In vitro* assays carried out to identify PhzD ligands. Screening of AALC by TSA (left); K_d determination of 2-acetoxy-6-pentadecybenzoic acid (LDT 13), using FITC labelled phzD (right).



This *in vitro* assay suggests that LDT 13 has low micromolar affinity to PhzD (Figure 2-right). Those results support that AALC with 15 carbons in the side chain decrease *P. aeruginosa* PYO production through its interaction to PhzD. However, cellular assays suggest that similar compounds with shorter sidechains (*i.e.* LDT502 - 8 carbons) decrease PYO production by another mechanism, once they do not alter PhzD T_m (LDT 502 ΔT_m= 0.1), but reduce PYO production, without reducing *P. aeruginosa* viability (Figure 1). In conclusion, the sidechain length influences the anti-virulence mechanism of action of the anacardic acid-like compounds.

Acknowledgments

UFBA, FAPESB

Área: **AMB**Nº de Inscrição: **00488**

Spectrophotometric and spectrofluorimetric determination of atmospheric formaldehyde with 7-amino-4-hydroxynaphthalene-2-sulfonic acid

José Lozano Araujo Neto (PG),^{1*} João Flávio da Silveira Petrucci (PQ),² Arnaldo Alves Cardoso (PQ),¹ j_lozano_net@hotmail.com

¹Departamento de Química Analítica, Instituto de Química, UNESP, Araraquara-SP, Brasil; ²Instituto de Química, Universidade Federal de Uberlândia, UFU, Uberlândia-MG, Brasil

Palavras Chave: *Formaldeído atmosférico, espectrofluorimetria, espectrofotometria, ácido 7-amino-4-hidroxinaftaleno-2-sulfônico.*

Highlights

Atmospheric formaldehyde (FA) is classified as carcinogenic. The determination of FA is possible by reaction with 7-amino-4-hydroxynaphthalene-2-sulfonic acid in sulfuric acid by spectrophotometry and spectrofluorimetry.

Resumo/Abstract

O formaldeído está presente em diversos processos recorrentes na atmosfera: oxidação fotoquímica de hidrocarbonetos e produção de ozônio, nitrato de peroxiacetila e radicais livres. Além disso, suas aplicações industriais variam de têxteis, cosméticos e até resinas para fabricação de compensados de madeira¹. A exposição a 380 µg.m⁻³ de formaldeído durante 4 horas é suficiente para provocar efeitos adversos em humanos e é classificado como carcinogênico estando associado principalmente ao câncer na nasofaringe e no pulmão^{2,3}. Neste trabalho, foi feito um estudo sobre a reação do formaldeído com o reagente ácido 7-amino-4-hidroxinaftaleno-2-sulfônico (ácido J) em meio de ácido sulfúrico. O produto da reação é um corante que também apresenta propriedades fluorescentes, absorvendo em λ_{EM}=470 nm e apresenta um pico de emissão em λ_{EM}=522 nm. As equações das curvas de calibração, assim como os limites de detecção correspondentes aos métodos de absorvância e fluorescência são mostrados na Tabela 1. Buscando a utilização do reagente em análises de ar contendo formaldeído, foi montado um sistema de produção do analito dissolvido em ar atmosférico com concentração conhecida. Foi empregado um tubo de permeação, o qual emite o formaldeído a uma taxa de 60 ng.min⁻¹ à 30 °C. A vazão do ar diluente foi de 0,5 L.min⁻¹, que resultou em concentração de 120 µg.m⁻³ de formaldeído em ar. A amostragem foi feita utilizando-se um microimpinger feito a partir de um eppendorf de 2 mL de volume contendo 1,5 mL de água, sob vazão de 25,0 mL.min⁻¹ de formaldeído em ar. A reação foi promovida com uma alíquota de 1,0 mL da solução coletora e 2,5 mL da solução 0,01% de ácido J em ácido sulfúrico obtendo uma concentração de 5,33E-07 mol.m⁻³ por espectrofotometria. Os resultados mostraram que as medidas usando absorvância como sinal analítico possuem menor grau de incerteza. E que o método de amostragem pode ser adaptado para utilização de microamostradores portáteis com fontes de energia de 12 volts.

Tabela 1: Coeficientes de regressão linear das curvas de calibração e limites de detecção (LD) com 95% de confiança para análises por espectrofotometria e espectrofluorimetria das soluções de formaldeído.

| | Coef. Angular | Coef. Linear | r ² | Faixa linear (mol.L ⁻¹) | LD (mol.L ⁻¹) |
|-----------------------------|---------------|--------------|----------------|-------------------------------------|---------------------------|
| Espectrofotometria | 3330,331 | 0,025 | 0,998 | 10 ⁻⁶ - 10 ⁻⁴ | 4,589E-06 |
| Espectrofluorimetria | 2,970E+06 | 71,910 | 0,990 | 10 ⁻⁶ - 10 ⁻⁴ | 8,693E-06 |

¹ T. Salthammer, S. Mentese, R. Marutzky. Chem. Rev. 2010, 110, 2536–2572.

² Organização Mundial de Saúde (OMS). WHO Guidelines. 2010, 9, 103-142.

³ International Agency for Research on Cancer (IARC). IARC Monographs: Review of Humans Carcinogens, 2012, 401-436.

Agradecimentos/Acknowledgments

Os autores agradecem as agências de pesquisa FAPESP e CAPES

Área: QPN

Nº de Inscrição: 00489

Schistosomicidal investigation and chemical profile by HPLC-MS of a marine-derived fungus *Penicillium citrinum*

Rhenner N. A. Assis (IC)^{1*}, Letícia P. Pimenta (PG),¹ Kátia A. Siqueira (PG),² Marcos A. Soares (PQ),² Gustavo M. Dias (PQ),³ Lizandra G. Magalhães (PQ),¹ Héctor H. F. Koolen (PQ),⁴ Márcio L. A. Silva (PQ),¹ Wilson R. Cunha (PQ),¹ Patricia M. Pauletti (PQ),¹ Ana H. Januário (PQ).¹

rhenneravila@gmail.com

¹Natural Products Research Group, University of Franca, Franca, SP, 14404-600, Brazil; ²Department of Botany and Ecology, Federal University of Mato Grosso, Cuiabá, MT, 78060-900, Brazil; ³Center of Natural and Human Sciences, Federal University of ABC, Santo André, SP, 09210-170, Brazil; ⁴Metabolomics and Mass Spectrometry Research Group, Amazonas State University, Manaus, AM, 69050-000, Brazil.

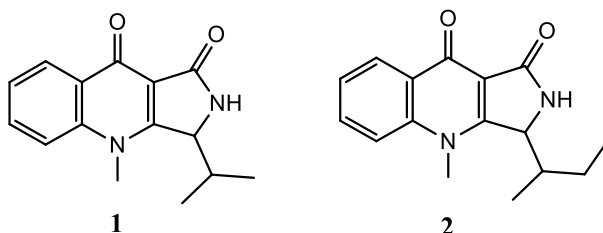
Keywords: marine-derived fungi, *Penicillium citrinum*, schistosomicidal activity.

Highlights

The EtOAc extract of *Penicillium citrinum* associated with the ascidian *Didemnum perlucidum* cultivated in rice medium was evaluated for the chemical profile and the schistosomicidal potential.

Abstract

Fungi represent a rich source of bioactive metabolites. *Penicillium citrinum* is broadly distributed and consistently draws the attention of researchers due the presence of active compounds of various classes isolated from this species earlier including alkaloids, polyketides and triterpenoids. This study aimed to assess the chemical profile and the schistosomicidal potential of the EtOAc extract from *P. citrinum*-4A14 associated with the ascidian *Didemnum perlucidum* grown in rice medium. The crude extract 4A14 was subjected to C-18 filtration using a MeOH/H₂O gradient (10% to 100% methanol), giving the fractions 4A14_A to 4A14_E. HPLC-QToF-HRMS/MS-based molecular networking and in silico MS/MS databases was employed for comparative analysis of the fractions 4A14_D and 4A14_E. The extract 4A14 was *in vitro* evaluated for schistosomicidal activity against adult worms of *Schistosoma mansoni*, over a period of 5 days at different concentrations 12.5 to 200.0 µg/mL. 4A14 extract reduced 100% motor activity of adult worms at the concentration of 12.5 µg/mL in 24 hours. Clusters for quinolactacins, glycerophosphocholines and scalusamides were annotated for the fractions 4A14_D and 4A14_E. The protonated molecular ion [M+H]⁺ at *m/z* 257.1275 and [M+H]⁺ at *m/z* 271.1439 suggest the presence of quinolactacin A (C₁₅H₁₆N₂O₂) and quinolactacin B (C₁₆H₁₈N₂O₂), respectively. To our knowledge, this is the first study employing schistosomicidal approach for *P. citrinum* associated with the ascidian *Didemnum perlucidum*.



Acknowledgments

CAPES, CNPq, FAPESP

Área: QPN

Nº de Inscrição: 00490

Dereplication of antileishmanial alkaloids from *Duguetia lanceolata* (Annonaceae) by LC-MS-MS

Jackson M. Conceição (PG)¹, Erick P. Dantas (PG)¹, Livia Soman de Medeiros (PQ)¹, Maiara M. Romanelli (PG)², Maiara Amaral (PG)², Andre G. Tempone (PQ)², João Henrique G. Lago (PQ)³, Marisi Gomes Soares (PQ)⁴ and Patricia Sartorelli(PQ)^{1,*}

jackson.monteiro@live.com; patty.sart@gmail.com

¹ Institute of Environmental, Chemical and Pharmaceutical Sciences, Federal University of São Paulo, Diadema, SP, Brazil; ² Centre for Parasitology and Mycology, Instituto Adolfo Lutz, São Paulo, SP, Brazil; ³ Center of Natural Sciences and Humanities, Federal University of ABC, Santo Andre, São Paulo, Brazil; ⁴ Chemistry Institute, Federal University of Alfenas, Alfenas, MG Brazil.

Key-words: *Duguetia lanceolata*, Annonaceae, Aporphine Alkaloids, LC-MS-MS; antileishmanial activity.

Highlights

The chromatographic fractionation of the alkaloid extract from leaves of *D. lanceolata*. The identification was made by ¹H-NMR spectroscopic analysis of as well as LC/MS/MS through fragmentation pattern of these alkaloids.

Resumo/Abstract

The importance of the research development of the natural products area is due mainly to the prospective of bioactive substances in plants, fungus and other biological material, that may be capable of acting as leishmanicidal. Among them, Annonaceae, which is widely distributed in South America, is composed by 135 genus, being twenty nine of them specially in Brazil, including *Duguetia* genus¹. Leaves of *D. lanceolata* were powdered, air-dried and extracted with ethanol. The ethanol extract (60.0 g) was concentrated to dryness in vacuum and dissolved with 3% chloridric acid and then washed with n-hexane. The EtOH extract from leaves of *D. lanceolata*, when subjected to an acid-base extraction yielded alkaloidic extract and submitted to column chromatography, preparative-TLC and HPLC. ¹H-NMR spectroscopic analysis of these fractions as well as the dereplication of these alkaloids by LC/MS/MS through fragmentation pattern and comparison with literature² data allowed to identify eight alkaloids. including three aporphine sensu stricto: glaucine, norglaucine, isocorydine; three oxoaporphines: oxoglaucine, liriodenine, lanuginosine and two aporphine derivatives: dehydroglaucine and 7-hidroxyglaucine. These compounds were described for the first time in this species and the alkaloids liriodenine oxoglaucine, 7-hidroxyglaucine and dehydroglaucine were described for the first time in the genus. Additionally fractions containing alkaloids were incubated with promastigotes of *Leishmania (L.) infantum* and cell viability detected by colorimetric assays³. The most promising activity was observed for fraction VIII, constituted by glaucine, demonstrate activity of *L. infantum* intracellular amastigotes, with an IC₅₀ value of 7.5 µg/mL. The fraction XII, constituted by isocorydine, oxoglaucine and norglaucine, showed an IC₅₀ value of 50.0 µg/mL against promastigotes of *L. infantum*. Our work investigated for the first time in literature the in vitro antileishmanial efficacy of the aporphine alkaloid glaucine against clinical relevant intracellular forms of the parasites and also demonstrate the potential of *D. lanceolata* for the search of bioactive compounds against neglected diseases.

References: ¹Leboeuf, *et al.*, *Phytochemistry*, 21, 2783-2813, 1982. ²Stevigny *et al.*, *Rapid Commun. Mass Spectrom.*; 18, 523–528, 2004. ³Ferreira *et al.*, *The journal of venomous animals and toxins including tropical diseases*, 24, 30. 2018.

Agradecimentos/Acknowledgments

FAPESP, CAPES and CNPq.

Optimization of the transesterification reaction of soy oil catalyzed by potassium glyceroyde.

Mateus Jancke (IC),* Luan Weber dos Santos (IC), Samuel José Santos (PG), Luiz Antonio Mazzini Fontoura (PQ), luanweber20@gmail.com.

Universidade Luterana do Brasil, ULBRA – Centro de Pesquisa em Produto e Desenvolvimento, CEPPEP.

Key words: Biodiesel, potassium glyceroyde, transesterification

Highlights

Potassium glyceroyde is a low cost catalyst to the biodiesel obtainment.
Biodiesel production with high transesterification conversions under mild conditions.

Resumo/Abstract

Biodiesel is a mixture of fatty esters obtained by transesterification of oils and fats under catalysis, and has been employed as a biofuel in compression-ignition engines. Industrially, methanol is the most used alcoholysis agent. Sodium methoxide is normally employed as alkaline homogeneous catalyst. Although this technology is well established, its high cost is still a disadvantage. Other alkoxydes can be used in the place of methoxide, and glyceroxide is an interesting alternative, since its conjugated acid is the transesterification byproduct. In this work, potassium glyceroxide was evaluated as catalyst in the methanolysis of soy oil. A Doehlert experimental design¹ with methanol/triglyceride (MeOH/TG) molar ratio and catalyst amount (% based to TG mass) as variables was employed. All the experiments were carried out at 65 °C by 60 min. Molar ratios were set from 3.0 to 9.0, and catalyst amount from 0.5 to 1.5 %. The transesterification conversion as the function of the two studied variables is showed in the Figure 1. The optimized conditions were established as 6.0 molar ratio and 1.25 % of catalyst amount.

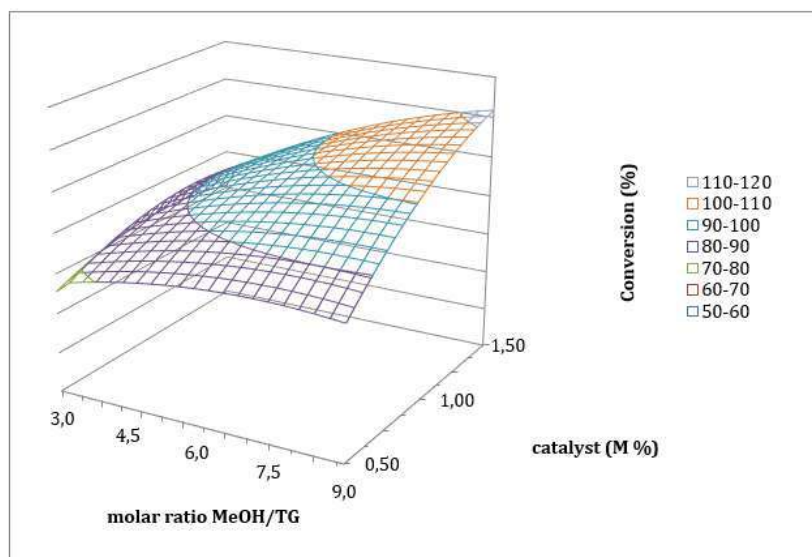


Figure 1 - Effect of the molar ratio (MeOH/TG) and the catalyst amount over transesterification conversion.

¹ Teófilo, R. F.; Ferreira, M. M.; *Quim. Nova*, **2006**, 29, 338.

Área: QPN

Nº de Inscrição: 00493

Coproduction of surfactin and arginase by *Bacillus velezensis* 0G in Landy's medium: applications for environmental and health sciences

Luiz H. D. Cunha (IC),* Thais C. Silveira (PG), Wyllerson E. Gomes (PQ), Bruno P. Lataro (IC), Thainá Beato (IC), Giovana C. Tonon (IC), Renata K. Mendes (PQ), Augusto Etchegaray (PQ).

augusto.etchegaray@puc-campinas.edu.br; [*dallancunha@gmail.com](mailto:dallancunha@gmail.com)

Faculdade de Química, PUC-Campinas, Campinas -SP.

Keywords: Biosurfactants, Surfactin, Environmental decontamination, Arginase, Cancer treatment.

Highlights

The production costs of biosurfactants can be reduced by a coproduction strategy of surfactin, segregated in growth medium, and arginase, an intracellular enzyme with applications for cancer treatment.

Abstract

Lipopeptides are important secondary metabolites produced by microbes, specially *Bacillus* spp. However, their production is expensive. In the present work we proposed the coproduction of surfactin and arginase in a single growth. In addition, after arginase extraction, microbial biomass was used for the remediation of contaminated water. Surfactin production was quantified by a colorimetric method.¹ The enzyme arginase, a drug candidate for cancer treatment and an important catalyst to produce ornithine,^{2,3} was successfully recovered from microbial biomass. Decontamination of phenol and metals (Cu^{2+} , Ni^{2+} , Co^{2+}) from artificially contaminated samples was attained by treatment with residues from lipopeptide production. At the end of growth, cells were collected by centrifugation and washed with phosphate buffer. This step produced surfactin-containing wash-waters. Specific monitoring methods were used to evaluate the remediation of phenol and metal solutions. Respectively a biosensor based on tyrosinase and, either atomic absorption spectroscopy or conductivity measurements. For a 24 h growth of *B. velezensis*, the yields of surfactin and arginase were respectively 685mg/L and 84 units of arginase/g of wet cells. Surfactin was also recovered from biomass (47mg/L). We report the successful removal of copper and hydroquinone, respectively from each fabricated sample, using both wash-waters and microbial biomass. Wash-waters removed 50% of both contaminants, while biomass retained approximately 95% of copper. Figure 1 shows the bioprocess and the proposed stepwise utilization of surfactin and biomass. This is the first report on the coproduction and separation of surfactin and arginase.

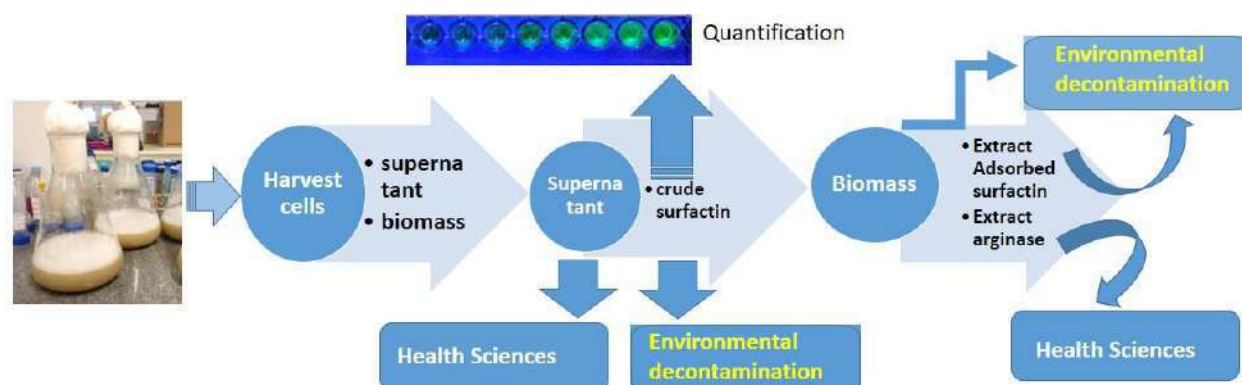


Figure 1. Scheme showing the bioprocess and its utilization for enzyme extraction and environmental cleanup.

References: ¹Heuson, E., Etchegaray, A. *et al.* (2018) *Biotechnol. J.* e1800314. ²Xiong, L., Teng, J.L.L. *et al.* (2016) *Int. J. Mol. Sci.* 2016, 17, 363. ³ Kai, H., Xiao, G. *et al.* (2018). *Process Biochem.* 73, 94–101.

Acknowledgements: The following authors received scholarships from CNPq (Brazil): L.H.D. Cunha (PIBITI); G.C. Tonon (PIBITI) and T. Beato (PIBIC). B.P. Lataro received a scholarship from PUC-Campinas. W.E. Gomes is the recipient of a post-doc scholarship (PNPD) from CAPES (Brazil). We acknowledge FAPESP (Brazil) for previous funding (13/20570-6).

CHALCONES SYNTHESIS AND EVALUATION OF ANTIPROTOZOAL ACTIVITY IN *PHYTOMONAS SERPENS*

Gabriella Barroso Souza (PG)^{1*}, Péricles B. Alves (PQ)¹, André L. B. S. Barreiros (PQ)¹, Marizeth L. Barreiros (PQ)¹, Roberta P. M. Fernandes (PQ)², Kleiton P. Silva (PG)², Morgana S. Araújo (PG)³, Emmanoel Vilaça Costa (PQ)³

gabriella_souza25@hotmail.com

¹Departamento de Química-UFS; ²Departamento de Fisiologia-UFS; ³Departamento de Química-UFAM

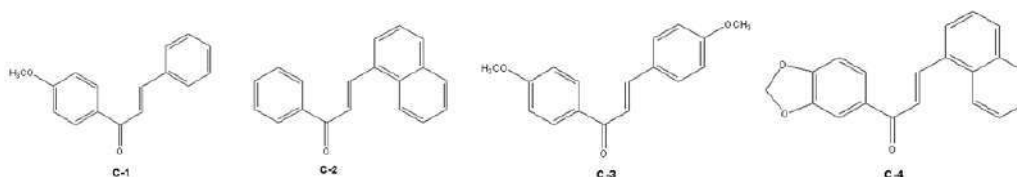
Keywords: Synthesis, Chalcones, *Phytomonas serpens*, antiprotozoal activity.

Highlights

Use of chemical agents with low toxicity is efficient in the control of agricultural pests. This study synthesized and characterized four chalcones for antiprotozoal activity evaluation.

Abstract

The genus *Phytomonas* are pathogens transmitters various diseases in agricultural crops, such as coconut, coffee, manioc and palm, causing necrosis and atrophies of the roots. This contamination affects the agricultural and economic sectors by reducing the production and obtaining products with low commercial value. The chalcones were subjected to evaluation of protozoan activity *Phytomonas serpens* in order to contribute to the diversity of synthetic organic molecules in the study of structure versus activity of bioactive substances aiding in the control of agricultural pests. The methodology used to obtain chalcones was the aldol condensation of Claisen-Schmidt, which consists of the coupling between acetophenone and its derivatives with different aromatic aldehydes. The reaction is performed with magnetic stirring for 3 hours in basic medium using ethanol as the solvent at room temperature. After this time, the reaction mixture is stored in a refrigerator for 24 hours and in the next day is vacuum filtered. The reaction yield varied from 78% to 95%. The compounds obtained were characterized using FTIR, HRMS, ¹H-NMR and ¹³C-NMR (DEPT 135°): (*E*)-1-(4-methoxyphenyl)-3-phenyl-prop-2-en-1-one (C-1), (*E*)-1-phenyl-3- α -naphthylprop-2-en-1-one (C-2), (*E*)-1-(4-methoxyphenyl)-3-(4-methoxyphenyl)-prop-2-en-1-one (C-3) and (*E*)-1-(benzo[d][1,3]dioxol-6-yl)-3- α -naphthyl-prop-2-en-1-one (C-4). The results of *Phytomonas serpens* antiprotozoal tests were: Chalcone C-2 exhibited the best result with IC₅₀ 1,6 μ M, followed by C-1 with IC₅₀ of 3.5 μ M, C-4 with IC₅₀ 3.7 μ M and C-3 with IC₅₀ 4.8 μ M.



Acknowledgments



Área: BEA

Nº de Inscrição: 00495

Behavior of Macro and Micronutrients in *Erva Mate* Infusion after Cd Bioaccumulation in Clonal Mini-Garden

Camila M. A. C. Alves (PG)¹, Renan B. Pardino (PG)¹, Paula Dalla Vecchia (PG)¹, Nathalia Pimentel (PG)², Dilson A. Bisognin (PQ)², Fábio A. Duarte (PQ)¹, Rodrigo C. Bolzan (PQ)¹, Érico M. M. Flores (PQ).^{1*}

camilamacalves@gmail.com; ericommf@gmail.com

¹Universidade Federal de Santa Maria, Departamento de Química, Santa Maria, RS, Brazil, 97105-900;

²Universidade Federal de Santa Maria, Departamento de Fitotecnia, Santa Maria, RS, Brazil, 97105-900

Palavras Chave: *Erva mate*, Cadmium, Nutrients, Infusion, Clonal mini-garden.

Highlights

Bioaccumulation of Cd in *erva mate* using clonal mini-garden. Determination of Cd, macro and micronutrients in infusion after Cd exposition. Comparison of nutrients concentration in digests and infusion solutions.

Abstract

Erva mate (*Ilex paraguariensis* A. St. Hil.) is a native tree from South America countries and is consumed as hot or cold infusion. *Erva mate* infusion shows diuretic and antioxidant properties and contains some elements, such as macro (Ca, Mg and Na) and micronutrients (Cu, Fe and Mn), which are considered beneficial to human health. On the other hand, some toxic elements such as Cd can be accumulated in *erva mate* and might be harmful to the plant and human health.¹ According to MERCOSUL legislation, Cd concentration in *erva mate* cannot exceed $0.4 \mu\text{g g}^{-1}$.² In view of the legislation and due to the possibility of Cd accumulation in *erva mate*, the aim of this work is to evaluate macro and micronutrients concentrations in infusion solutions after Cd absorption by *erva mate*. For this experiment a clonal mini-garden in the closed soilless cultivation system with sand as substrate was used. Twelve plantlets of the clone 14SMC03 were planted in the mini-garden for each treatment. Before applying the treatments (Cd addition), plantlets were pruned and fertirrigated with a complete nutrient solution (pH 5.5) for six months. For the evaluation of Cd absorption, two concentrations of Cd (20 and 40 mg L⁻¹, groups named as Cd-A and Cd-B, respectively) were added to the nutrient solution. The exposure to Cd was carried out between June and July of 2018, during 14 days. The Cd control group received only the nutrient solution (no Cd addition). During the exposition time, no visual effects of toxicity were observed on the exposed specimens. After the treatments, the plantlets were collected, dried (105 °C for 3 days) and fractioned in three parts (root, leaf, and stalk), but only the leaves were used for further analysis. For the determination of total Ca, Cd, Cu, Fe, Mg, Mn and Na concentration, leaf samples were digested in a microwave-assisted system with 6 mL of concentrated HNO₃ and determination was carried out by inductively coupled plasma optical emission spectrometry (ICP-OES). In addition, infusion assays were performed with *erva mate* leaves at 80 °C for 15 min and all the analytes were quantified. Regarding the digests and infusion solutions, it was observed that for Cd-B group, the macronutrients (Ca, Mg and Na) showed lower concentration when compared to Cd-A group. This effect could be due to the higher Cd concentration administered in the treatment of Cd-B group, which may interfere in the absorption and fixation of these elements in the plant. In case of micronutrients, Mn showed a different behavior from Cu and Fe in the infusion solutions, with a higher concentration in Cd-A group ($78.3 \pm 11.0 \mu\text{g g}^{-1}$) than in Cd-B group ($57.4 \pm 1.9 \mu\text{g g}^{-1}$). Among the studied micronutrients, Cu and Fe showed the lowest concentration between the infusion solutions and the digests in Cd-A group. All studied elements in the control group showed similar values compared to the Cd-A group considering digests and infusion solutions. It was possible to conclude that the high Cd concentration in Cd-B group interfered on the absorption of micronutrients and macronutrients in *erva mate*. However, more studies are necessary to understand the influence of other toxic elements on the absorption and fixation of nutrients in plants.

¹ Pardino, R. B. *et al.* Food Chemistry, 263, 2018, 37-41.

² MERCOSUL, Regulamento técnico Mercosul sobre limites máximos de contaminantes inorgânicos em alimentos MERCOSUL Nº 12/11, 2013, pp. 1-18.

Acknowledgments

The authors are grateful to UFSM, CNPq, CAPES and FAPERGS for supporting this study.

42ª Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química: Eixos Mobilizadores em Química

Área: BEA

Nº de Inscrição: 00497

Green analytical method for halogens and sulfur determination in pet foods by ion chromatography with conductivity and mass spectrometry detection

Filipe S. Rondan (PG),¹ Priscila T. Scaglioni (PQ),¹ Fernanda P. Balbinot (PG),¹ Fernanda S. Vinci (IC),¹ Larissa B. Cruz (IC),¹ Márcia F. Mesko (PQ).^{1*}

fsrondan@gmail.com; *marciamesko@yahoo.com.br

¹ Centro de Ciências Químicas, Farmacêuticas e de Alimentos, Universidade Federal de Pelotas, Capão do Leão – RS.

Palavras Chave: Pet Food, Halogens, Sulfur, MIC, IC-MS.

Highlights

Halogens and sulfur were determined in pet foods by IC-MS in a single analysis with suitable precision and accuracy. Microwave-induced combustion allows to obtain suitable solutions for IC analysis.

Abstract

In this study, a suitable and green analytical method for multielemental determination in pet food by ion chromatography (IC) in a single analysis was proposed. Fluorine (F), chlorine (Cl) and sulfur (S) determination by IC was performed using a suppressed conductivity detection (IC-CD), while bromine (Br) and iodine (I) was determined using a mass spectrometry detection coupled to IC (IC-MS). For sample preparation of pet food, microwave-induced combustion (MIC) method was used. Samples (up to 500 mg) were efficiently digested in closed system under oxygen pressure (20 bar) in less than 30 minutes. Ultrapure water, 50 mmol L⁻¹ and 100 mmol L⁻¹ (NH₄)₂CO₃ were evaluated as absorbing solution. The accuracy was evaluated by the addition of standard solutions into the samples previously the digestion step. Recoveries from 91% to 98% for all analytes were obtained using 50 mmol L⁻¹ (NH₄)₂CO₃ as absorbing solution. Additionally, AOAC International recommended official methods for Cl and F determination in animal feed were also performed. The results obtained by the proposed method for Cl and F were in agreement with those obtained by AOAC method. Limits of detection (LOD) for Br, Cl, F, I and S were of 0.03, 18, 2.1, 0.09 and 75 mg kg⁻¹, respectively. These low LODs were obtained in view of the suitability of the digests with the IC technique. Moreover, the use of the proposed method allows the determination of halogens and sulfur by IC in a single analysis. It is important to highlight that this method also allows the ultra-trace determination of Br and I in the analyzed samples. The proposed method was applied for halogens and sulfur determination in a variety of pet food samples (for cats and for dogs) demonstrating its suitability for this type of sample. Furthermore, the proposed method presents several important advantages when compared to AOAC International recommended official methods, such as multielemental determination capability, low waste generation, low limits of detection and high throughput, which indicates that it is an excellent method for routine analysis of pet food.

Acknowledgments

This study was financed in part by the Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior - Brasil (CAPES - Finance Code 001). The authors are also grateful to Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq - grant numbers 409357/2016- 2 and 496 309424/2016-0), Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado do Rio Grande do Sul (FAPERGS - grant 497 number 16/2551-0000561-8) and Universidade Federal de Pelotas (UFPEl).

Fast and Green synthesis of maleinized vegetable oil by microwave irradiation

Rafael T. Alarcon (PG),^{1*} Caroline Gaglieri (PG),¹ Otávio A. de Souza (PG),¹ Daniel Rinaldo (PQ),¹ Gilbert Bannach (PQ)¹.

gilbert.bannach@unesp.br; rafael.alarcon@unesp.br

¹Chemistry Department, School of Sciences, UNESP - São Paulo State University;

Keywords: Green chemistry, Microwave irradiation, Vegetable oil, Maleinization reaction.

Highlights

- Clean, solventless and fast synthesis.
- Microwave irradiation is efficient in maleinization reaction.
- New bands in MIR spectrum indicates that the maleinization reaction successfully occurred.

Abstract

Vegetable oils are the most versatile renewable raw material in the chemistry area; these have been used principally in biofuel and polymers syntheses. Furthermore, to form new monomers are necessary modified their structure, an easy way is by maleinization reaction. However, the conventional synthesis is about 3 hours at 220 °C. In this work was propose a new synthesis by microwave irradiation, which occurs in 15 minutes at 235 °C. After the synthesis, Mid-infrared Spectroscopy was used to analyze the final product (MSO, Figure 1). The principal band for soybean oil (SO) is shown at 1743 cm⁻¹ that are associated to stretched of C=O (highlighted in blue) in the ester presents in triglyceride structure. When the SO react with maleic anhydride by microwave irradiation some changes occurs in the MIR spectrum, such as two new bands at 1784 and 1708 cm⁻¹ (highlighted in red); these bands are associated to asymmetric and symmetric stretch of C=O in the succinic anhydride structure. The MIR spectrum indicates that the maleinization reaction successfully occurred. Using the titration method was possible determined the mol concentration (n) of anhydride presents in 1g of final product ($1.45 \times 10^{-3} \pm 1.48 \times 10^{-5}$ n g⁻¹). Moreover, the MSO is more viscous than SO and presents a dark yellow color.

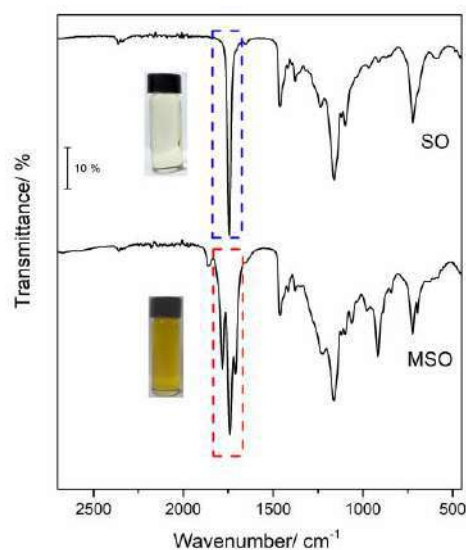


Figure 1. MIR spectra of SO and MSO.

Acknowledgments: The authors wish to thank FAPESP (proc. 2017/08820-8) and CNPq (Proc. 301857/2018-0) for financial support.

Área: QPN

Nº de Inscrição: 00499

Antileishmanial activity and ultrastructural changes of related tetrahydrofuran dineolignans isolated from *Saururus cernuus* L. (Saururaceae)

Juliana R. Brito (PG),^{1*} Luiz Felipe D. Passero (PQ),² Adriana Bezerra-Souza (PG),³ Márcia D. Laurenti (PQ),³ Paulete Romoff (PQ),⁴ Edgard A. Ferreira (PQ),⁴ João Henrique G. Lago (PQ),⁵ E-mail: julianarb04@gmail.com

¹Institute of Environmental, Chemical and Pharmaceutical Sciences, Federal University of São Paulo, UNIFESP; ²Institute of Biosciences, Institute of Advanced Studies of the Sea, University of São Paulo, USP; ³Faculty of Medicine, University of São Paulo, USP; ⁴Engineering School, UPM; ⁵Center of Natural and Human Sciences, Federal University of ABC, UFABC

Keywords: Saururaceae, *Saururus cernuus*. *Leishmania* (*L.*) *amazonensis*, dineolignans, ultrastructural changes, mitochondrial membrane potential.

Highlights

In the present work, the bioactivity-guided fractionation of MeOH extract from leaves of *Saururus cernuus* was performed in order to isolated metabolites with antiparasitic activity, more specifically against *Leishmania amazonensis*. Additionally, the evaluation of ultrastructural changes of isolated compounds on *L. amazonensis* was also conducted.

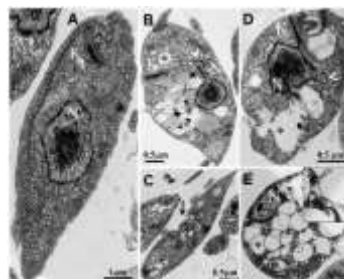
Abstract

Saururus cernuus L. (Saururaceae) is an aquatic macrophyte found in North America and introduced in Brazil as an exotic species¹. In the present work, the MeOH extract from the leaves of *S. cernuus* displayed activity against promastigote forms of *Leishmania* (*L.*) *amazonensis* and was subjected to a bioactivity-guided fractionation. This procedure afforded two related tetrahydrofuran dineolignans: *threo,threo*-manassantin A (**1**) and *threo,erythro*-manassantin A (**2**)^{2,3} (Figure 1), which structures were established on the basis of NMR and HRESIMS data analysis. Compounds **1** and **2** displayed activity against promastigote forms of *L. (L.) amazonensis* with EC₅₀ of 35.4 ± 7.7 and 17.6 ± 4.2 µM, respectively. Against amastigote forms, compounds **1** and **2** showed potent activity, with EC₅₀ of 20.4 ± 1.9 and 16.0 ± 1.1 µM, respectively, superior than that determined to positive control miltefosine (28.7 ± 3.5 µM). Reduced cytotoxicity for host cells was observed to both tested compounds, with CC₅₀ values of 96.3 ± 15.3 and 99.5 ± 6.5 µM, respectively, similar to miltefosine (86.8 ± 3.7µM). Additionally, compounds **1** and **2** caused ultrastructural changes in promastigotes leading to an alteration of structural morphology, as evidenced by electron microscopy (Figure 2). Furthermore, compounds **1** and **2** altered the morphology and physiology of the plasmatic membrane of *L. (L.) amazonensis*.

Figure 1. Chemical structures of compounds **1** e **2**.



Figure 2. Transmission electron microscopy.



The obtained results indicated that related dineolignans **1** and **2**, isolated from *S. cernuus*, could be considered as a scaffold for the design of novel and selective drug candidates for the treatment of leishmaniasis.

References: ¹Kubaneck, J. et al. *Phytochemistry*, **2000**, 54, 281-287. ²Hahm, J.-C. et al. *Planta Med.*, **2005**, 71, 464-569. ³Hanessian, S. et al. *Org. Lett.*, **2006**, 24, 5477-5480.

Acknowledgments: CAPES, FAPESP e CNPq.

Área: ANA

Nº de Inscrição: 00503

Disposable pipette monolithic extraction phase for dexamethasone determination in synovial fluid samples

Ricardo A. Bernardo (PG),¹ Lucas S. Machado (PG),^{1*} Francielle Q. Soares (PQ),² Andréa R. Chaves (PQ),¹

ricardo.alber@outlook.com; lucas.s.m@live.com

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

² Instituto Federal de Goiás, Campus Inhumas, Inhumas -GO.

Palavras Chave: DPX, monolithic phase, dexamethasone, synovial fluid.

Highlights

Synthesis of disposable pipette monolithic extraction phase
The DPX propose method was optimized using a factorial design 2⁴
The developed DPX-LC/UV method present linearity, accuracy an precision

Resumo/Abstract

The determination of dexamethasone levels in synovial fluid has been an analytical challenge, once it presents low concentration and matrix has a high concentration of endogenous compounds. The disposable pipette extraction (DPX) is a recent pre-treatment sample technique, which uses a sorbent phase into a micropipette tip (1 or 5 mL) ¹. The commercially available extraction phases are based in silica. However, different materials have been evaluated as sorbent, including monolithic polymers that consists in a continuous separation media, integrating high permeability to the analyte. Therefore, this study proposes the development of monolithic sorption phase applied to DPX technique for dexamethasone determination in synovial fluid using liquid chromatography (LC) and UV detector. The monolythic monomer synthesis condition were optimized and the higher extraction efficiency was achieved with styrene and divinylbenzene monomers, at 16/84 (% w/w) ratio, and azo-bis-isobutyl nitrile as initiator, in a solution containing 4 mL of n-decanol as solvent. Moreover, using micropipette tips of 1 mL as support, 120 µL of polymer solution was heated to 70 °C for 24 h. For the better selectivity of extractive phase, the surface modification was carried out with polypyrrole, from the oxidation of extractive phase with iron chloride (III) followed by the addition of pyrrole solution in THF. After the modification process, to enhance the extraction conditions, a factorial design 2⁴ was performed. According to this, the extraction was performed with 1 mL of sample in single extraction cycle, the analyte desorption was accomplishing with methanol, in 1 cicle, with extraction time of 60 seconds. The developed method showed linearity in range of 10 to 500 ng mL⁻¹ with accuracy and precision.

¹ Bordin DCM, Alves MNR, Campos EG, Martinis BS, Journal of Separation Science, 39, 2016, 1168

Agradecimentos/Acknowledgments

CNPq, Capes e Fapeg

Área: ELENº de Inscrição: 00504

Non-mercury electrode for the electroanalytical determination of oryzalin

Giles G. Gerent (PG)^{1*}, Almir Spinelli (PQ)¹

*giles3g@hotmail.com

¹Departamento de Química, Universidade Federal de Santa Catarina – Florianópolis, SC – Brasil.

Palavras Chave: Endocrine disruptor, Oryzalin, Non-mercury electrode, Bimetallic nanoparticles.

Highlights

Oryzalin is a potential endocrine disruptor. A chemically modified electrode with Ag and Au bimetallic nanoparticles was developed to determinate oryzalin.

Resumo/Abstract

Pesticides are synthetic molecules aimed at being toxic towards fungi, plants or animals that are detrimental to cultures [1]. Oryzalin (ORZ) is a dinitroaniline pesticide classified as group C carcinogen and is associated with compounds with endocrine disruption [2]. Voltammetric methods can be used to determinate ORZ. However, there is only one report on the electroanalytical determination of ORZ making use the hanging mercury drop electrode [3]. Due to the problems associated with mercury (employed as a working electrode) other alternatives are currently being sought. In this context, Ag-Au bimetallic nanoparticles (Ag-Au BMNPs) stabilized with chitosan (CTS) were successfully synthesized and applied to the construction of a non-mercury electrode for the electroanalytical determination of ORZ. Ag-Au BMNPs were deposited at the surface of a glassy carbon electrode (GCE) by the simple drop-coating method to build the new electrode (Ag-Au BMNPs-CTS/GCE). The nanoparticles dispersions were characterized by transmission electron microscopy (TEM), UV-vis and energy-dispersive X-ray spectroscopy (EDS). The new electrode was characterized by scanning electron microscopy with field emission gun (SEM-FEG) and electrochemical impedance spectroscopy (EIS). The effects of solution pH and potential scan rate on the peak potential and the peak current on the reduction of the nitro groups of ORZ were studied. A single reduction peak was observed in strong acidic medium. The most defined peak and the highest current response for ORZ reduction were achieved in 1.0 mol L⁻¹ phosphate buffer (pH 2.0). The electrochemical reaction is mainly diffusion-controlled with some contribution from adsorption. Under optimized conditions, the reduction peak current, obtained by square wave voltammetry (SWV), increased linearly with increasing ORZ concentration in the range of 0.1 to 7.0 µmol L⁻¹. The limit of detection and the limit of quantification were found to be 29.89 and 99.64 nmol L⁻¹, respectively. The repeatability of the current provided by the new electrode was tested applying two methods: intra-day, using eight different solutions prepared on the same day at a concentration of 3.0 µmol L⁻¹, and inter-day, over eight days using a different solution of ORZ prepared each day at a concentration of 3.0 µmol L⁻¹. The relative standard deviations for the measurements were 3.85% and 4.19%, respectively. A grape juice sample was analysed by the novel method. The *t*-test and *F*-test carried out confirmed the reliability of the data of the new electroanalytical method in terms of precision and accuracy compared to the chromatographic method used as reference. The method based on SWV at the Ag-Au BMNPs-CTS/GCE offered excellent performance towards the detection of ORZ and exhibited advantages such as high sensitivity, simplicity and cost effectiveness. In addition, it makes use of a non-mercury electrode, an environmentally friendly detector for ORZ.

Acknowledgments

CNPq, CAPES, FAPESC and UFSC.

References

- [1] S. Smarzewska, R. Metelka, D. Guziejewski, M. Skowron, S. Skrzypek, M. Brycht, W. Ciesielskia, *Anal. Methods*. 6 (2014) 1884-1889.
- [2] L.C. Hall, J.M. Rogers, M.S. Denison, M.L. Johnson, *Arch. Environ. Contam. Toxicol.* 48 (2005) 201-208.
- [3] T. Thriveni, J.R. Kumar, D. Sujatha, N.Y. Sreedhar, *Food Chem.* 104 (2007) 1304-1309.

Electrochemical platform with MWCNTs and gold nanoparticles for the determination of melatonin

Caio R. Vanoni (PG),* João P. Winiarski (PG), Jean C. Bassani (IC), Daniela Z. Mezalira (PQ), Cristiane L. Jost (PQ).

caiorvf7@gmail.com

Departamento de Química, Universidade Federal de Santa Catarina (UFSC).

Keywords: Gold nanoparticles, Silsesquioxane, Carbon nanotubes, Modified platform, Melatonin.

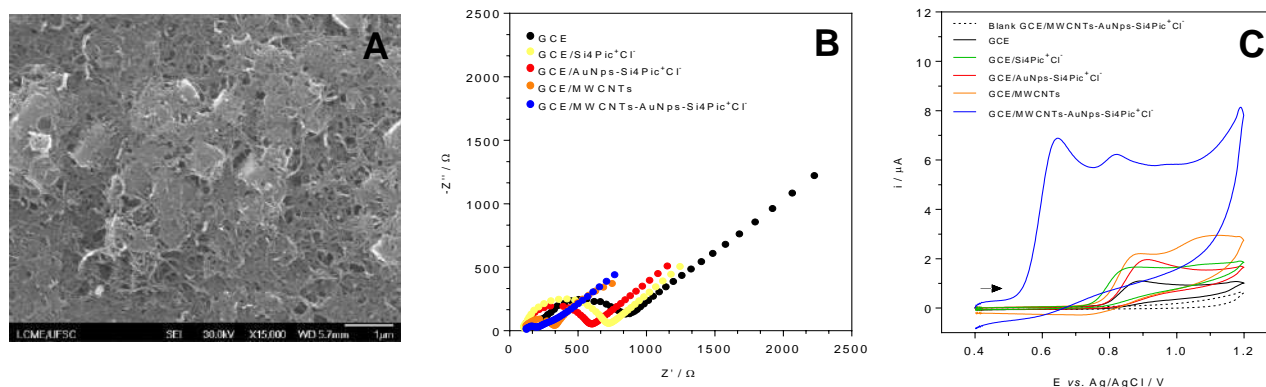
Highlights

Gold nanoparticles established in silsesquioxane. Functionalized multi-walled carbon nanotubes. Electrochemical platform. Determination of melatonin.

Resumo/Abstract

Melatonin (MEL) is a neurohormone secreted by the pineal gland in darkness¹. This compound is related to sleep-regulating activity, reduction of blood pressure², antioxidant and anti-inflammatory effect and inhibition of tumor growth³. However, MEL has been widely used and its indiscriminate consumption may lead to several biological problems. Thus, the monitoring of MEL concentration is of extreme importance. Considering the severe short-fall of funds which developed and developing countries are facing, the evaluation of hormones through low cost techniques such as voltammetry is of great interest. In order to design a novel electrochemical sensor for MEL detection, gold nanoparticles established in 3-*n*-propyl-(4-methylpyridinium)silsesquioxane chloride (Si4Pic⁺Cl⁻) and functionalized multi-walled carbon nanotubes (MWCNTs) were mixed and used as a modifier on the surface of a glassy carbon electrode (GCE), originating the electrochemical platform GCE/MWCNTs-AuNps-Si4Pic⁺Cl⁻. Microscopy techniques showed the formation of an integrated structure and the platform exhibits an irregular and rugged surface which may facilitate the electron transfer process (Figure 1A). Through electrochemical impedance spectroscopy (EIS) results – Figure 1B – and cyclic voltammetry (CV) data – Figure 1C – one can observe higher conductivity and an electrocatalytic profile for the GCE/MWCNTs-AuNps-Si4Pic⁺Cl⁻ with a current increase of ca. 7.5 times in comparison to the unmodified GCE. This demonstrates the promise of a new approach for analytical application in clinical and drug samples containing MEL.

Figure 1. (A) SEM-FEG image of GCE/MWCNTs-AuNps-Si4Pic⁺Cl⁻. (B) EIS Nyquist diagrams in KCl 0.1 mol L⁻¹ with K₃Fe(CN)₆/K₄Fe(CN)₆ 0.005 mol L⁻¹. (C) Cyclic voltammograms of different electrochemical platforms; C_{MEL} = 5.10⁻⁵ mol L⁻¹; Britton-Robinson buffer solution 0.1 mol L⁻¹ (pH 2); ν = 50 mV s⁻¹.



¹ M. Terauchi, A. Tamura, S. Yamaguchi, N. Yui, *Int. J. Pharm.*, vol. 547, p. 53-60, 2018.

² S. Mańka, E. Majewska, *Postepy Hig. Med. Dosw.*, vol. 27, p. S17-S20, 2009.

³ N. Kumar, R. N. Rosy, R. N. Goyal, *Electrochim. Acta*, vol. 211, p. 18-26, 2016.

Degradação do Bisfenol A catalisada por porfirinas de manganês(III)

Nathany I. D. Vieira (PG),^{1*} Mirra A. N. da Silva (TC),¹ Gilson F. Silva (PQ),¹ Dayse C. S. Martins (PQ)^{1}.**

***nathanyidv@gmail.com; **daysecsm@yahoo.com.br**

¹Departamento de Química, ICEx, UFMG.

Palavras Chave: Contaminante ambiental, Disruptor endócrino, Oxidação, Metaloporfirinas, HPLC-UV/Vis.

Highlights

Degradation of Bisphenol A catalyzed by manganese(III) porphyrins. Bisphenol A (BPA) has estrogenic activity; Manganese porphyrins can be used as catalysts by increasing degradation of BPA; Iodobenzene diacetate provided better results when compared to Oxone[®].

Resumo

Nas últimas décadas, uma nova classe de poluentes ambientais provenientes do uso de medicamentos, produtos de higiene pessoal, hormônios, surfactantes e aditivos industriais passou a atrair grande interesse científico. Denominados como poluentes emergentes, estas substâncias têm sido frequentemente identificadas principalmente no meio aquático¹, como exemplo, o Bisfenol A (BPA - **Fig.1a**), classificado por Krishnan *et al.* como um disruptor endócrino². O objetivo deste trabalho foi realizar a degradação do BPA empregando-se os oxidantes iodobenzeno diacetato (IBD) ou Oxone[®] e duas porfirinas de manganês(III), MnP1 e MnP2 (**Fig.1b**), como catalisadores biomiméticos dos citocromos P450. As reações controle (na ausência de catalisadores) apresentaram menor degradação do BPA em comparação com os sistemas catalisados, indicando a atividade catalítica das porfirinas de manganês. Nota-se que, nas mesmas condições, o IBD foi mais eficiente que o Oxone[®], apresentando 100% de degradação contra 24% (**Fig.2**), o que pode ser justificado pela formação da espécie ativa de alta valência [Mn^V(O)P] nos sistemas com IBD. Por meio das análises cromatográficas foi possível identificar a formação de, pelo menos, dois produtos de degradação do BPA, ambos menos polares (menor tempo de retenção). O tempo de reação não foi determinante nas reações com IBD, mas para o Oxone[®], um tempo maior pode vir a aumentar a degradação do BPA. O uso de oxidante em excesso foi mais eficiente do que em quantidade estequiométrica em relação ao BPA.

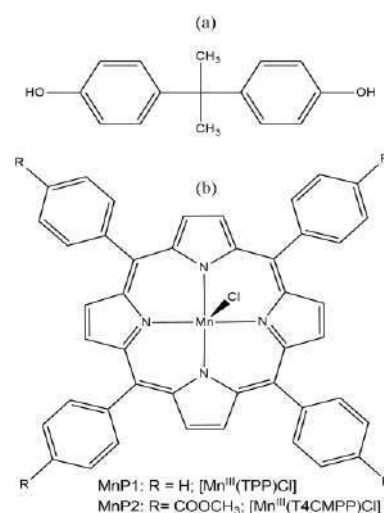


Fig.1 Estrutura química do Bisfenol A (a) e dos catalisadores Mn-porfíricos (b).

Apesar do tipo de catalisador Mn-porfírico não ser um fator determinante para a eficiência do processo, o emprego de qualquer um dos dois catalisadores aumenta a degradação de BPA quando comparado ao sistema não catalisado de forma muito similar, podendo-se empregar a MnP1, de preparação mais simples quando comparada à MnP2, sem comprometimento dos resultados.

¹ Moura, F.C.C.; Rios, R.D.F. & Galvão, B.R.L. *Environ. Sci. Pollut. Res.* (25) 26482-26492, 2018. ² A.V. Krishnan, *et al. Endocrinology*, (132) 2279-2286, 1993.

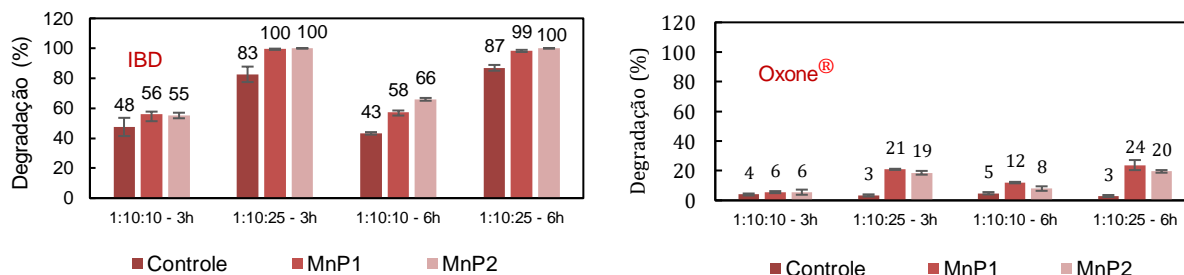


Fig.2 Degradação do BPA por PhI(OAc)₂ ou Oxone[®] em Água:ACN (85:15) catalisadas por Mn(III)-porfirinas. Análises por HPLC/UV-Vis ($\lambda = 276$ nm). Relações molares entre catalisador:substrato:oxidante 1:10:10 ou 1:10:25 com MnP = $1,0 \times 10^{-7}$ mol; T = 25 °C, agitação magnética por 3 ou 6 horas.

Agradecimentos

Aos órgãos de fomento: FAPEMIG, CAPES e CNPq.

Área: CAT

(Inserir a sigla da seção científica para qual o resumo será submetido. Ex: ORG, BEA, CAT)

Nº de Inscrição: 00510-1

(Inserir o número de inscrição do autor que fez a submissão)

Au-Pd selectivity-switchable oxidation catalyst: controlling the duality of the mechanism with a multivariate approach

Edmilson M. de Moura (PQ), Itaciara E. M. da S. Melo (PG), Samuel A. A. de Sousa (PQ), Laíse N. dos S. Pereira (PG), Jefferson M. Oliveira (IC), Karla P. R. Castro (PQ), Jean C. S. Costa (PQ), Carla V. R. de Moura (PQ), Marco A. S. Garcia (PQ)

mmoura@ufpi.edu.br; marcoasuller@gmail.com

Departamento de Química, Universidade Federal do Piauí, Teresina, 64049-550, PI, Brazil.

Keywords: SrCO₃, Au-Pd nanoparticles, multivariate optimization, benzyl alcohol.

Highlights

- For the first time, SrCO₃ was used as support for Au-Pd nanoparticles for alcohol oxidation;
- Utilization of a multivariate approach for catalyst performance optimization;
- Under optimized conditions, the selectivity was switchable by only changing the pressure of the system.

Resumo/Abstract

Supported gold-palladium NPs are highly selective catalysts for the oxidation of alcohols.¹ However, little is known about how integrated reaction conditions can affect the chemoselectivity of a specific catalytic system. Herein, a novel Au-Pd selectivity-switchable catalyst supported on SrCO₃ is reported and a multivariate optimization² was suggested as the key process to better understand the formation of the products. Among many different characterization techniques, STEM-EDS (Figure 1) was performed and showed that the catalyst keeps its morphological integrity even after the 5th run. It is possible to be seen by Figure 1 C and D, as Au and Pd are distributed all over the support. H₂-TPR analysis showed the strong metal-support interaction that exists in the system (Figure 2A). In addition, XPS analyses (Figure 2B,C,D, E, F) helped to proof that Au⁰ and Pd⁰ were obtained, what was expected since a 5-fold excess of NaBH₄ was used as a reduction agent. The XPS of O and Sr assisted to evaluate the phase composition of the material

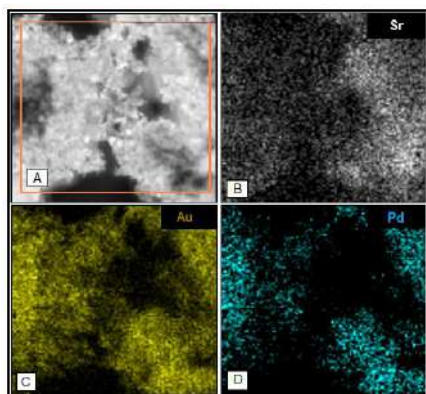


Figure 1. Morphology of the spent catalyst (5th run) in the spectrum image scanning (A) and the STEM-EDS elemental map images of Sr, Au, Pd, and (B, C, D, respectively) after the 5th run.

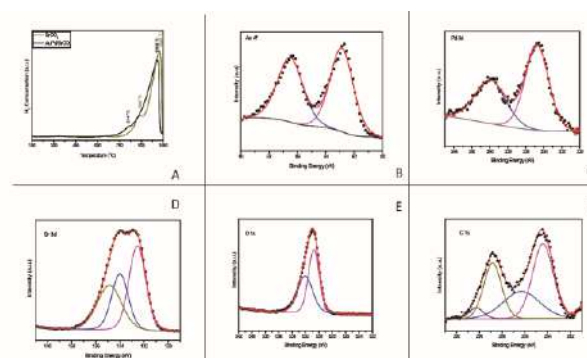


Figure 2. (A) H₂-TPR profiles of SrCO₃ and Au-Pd/SrCO₃ catalyst. XPS spectra of (B) Au 4f, (C) Pd 3d, (D) Sr 3d, (E) O 1s, (F) C 1s levels.

The optimization considered pressure, temperature, time of reaction, and Au:Pd molar ratio, and established that the temperature and Au:Pd molar ratio showed an important effect on the ester yield, while just the metal molar ratio significantly influenced the selectivity of the aldehyde. Thus, taking into consideration the experimental data and optimized conditions, we were able to efficiently switch the selectivity by just changing the pressure of the system in a benzyl alcohol oxidation reaction.

¹ *Sci. Rep.*, 2014, **4**, 5766-5760

² *Catal. Sci. Technol.*, 2015, **5**, 3340-3351

Agradecimentos/Acknowledgments

We acknowledge FAPEPI, CAPES and CNPq for the financial support.
42ª Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química: Eixos Mobilizadores em Química

Área: ANA

Nº de Inscrição: 00513

Simple and low-cost analytical procedure for determination of formaldehyde in milk using smartphone-based digital images

Anna Flavia de Souza Silva (PG),¹ Gabriel Martins (IC),² Isabela Camargo Gonçalves (IC)¹, Alex D. Batista (PQ),² Fábio Rodrigo Piovezani Rocha (PQ).^{1*}

anna.flavia.silva@usp.br; frprocha@cena.usp.br

¹Centro de Energia Nuclear na Agricultura, Universidade de São Paulo; ²Instituto de Química, Universidade Federal de Uberlândia

Palavras Chave: *Spot tests, Food fraud, Green chemistry.*

Highlights

Low consumption of sample and reagents.
Feasible procedure considering the needs of dairy industry.
Sample throughput of 36 assays *per* hour.

Resumo/Abstract

Dairy industry is one of the most susceptible to food fraud and adulteration, due to the high consumption of milk and the difficulty to detect these illegal practices by the usual methods of quality control and inspection of raw materials. On the other hand, the methods suitable for this purpose can be time-consuming and expensive, thus hindering the suitable quality control. Addition of formaldehyde in milk is prohibited by Brazilian sanitary legislation and it is considered a food fraud, which aims inhibition of microbiological development, thus increasing milk shelf life. Fraud typically involves addition from 1 to 10 mg L⁻¹ of formaldehyde. This work aims to develop a new, simple, fast, and cost-effective analytical procedure with detection by smartphone-based digital images for determination of formaldehyde in milk. It was exploited the reaction with Schiff reagent, which yields a purple product with formaldehyde. Sample preparation was carried out to avoid the matrix effect caused by the milk caseins, which were precipitated either by salting out effect (NaCl, EDTA, or an equimolar mixture of both, varying from 0.2 mol L⁻¹ to 0.5 mol L⁻¹) or acid precipitation, using HCl in concentrations varying from 0.032 mol L⁻¹ to 0.8 mol L⁻¹. The latter yielded better results and a translucent supernatant. After protein precipitation, 0.5 mL of the supernatant was transferred to an eppendorf microtube jointly with 125 µL of the Schiff reagent (an aqueous solution of p-rosaniline, sodium metabisulfite, and H₂SO₄). After 35 min of reaction, the color of the formed product was measured using the camera of a smartphone (LG K10 Pro, 13 megapixels, Android 7.0) under controlled illumination and a free app (ColorGrab®, Loomatix, version 3.6.1, 2017) was used to convert the reflected radiation in the spectral spaces of the RGB system (Red-Green-Blue). Measurements were based on the value of the G channel (corrected considering a reference solution), which corresponds to the complementary color of the product. The proposed procedure is capable of identifying frauds by adding as low as 120 µg L⁻¹ formaldehyde (LOQ = 360 µg L⁻¹), with coefficient of variation of 2%, and a linear response up to 1.25 mg L⁻¹ (r = 0.997). The method is applicable to both pasteurized and UHT whole milk with recoveries within 107 and 111 %. Other components of milk (e.g. whey protein and lactose) or even samples adulterated by acidification, alkalization, or dilution did not significantly affect the obtained results. The proposed procedure is then a suitable tool to assure food quality, safety and security.

Agradecimentos/Acknowledgments

CAPES - PROEX (financial code 001), CNPq, INCTAA.

Área: MED

(Inserir a sigla da seção científica para qual o resumo será submetido. Ex: ORG, BEA, CAT)

Nº de Inscrição: 00514

(Inserir o número de inscrição do autor que fez a submissão)

Halogenation as a strategy to improve antiplasmodial activity of new 3-alkylpyridine marine alkaloids

Camila S. Barbosa (PG),^{1*} Daniel S. M. Guimarães (PG),² Juliana C. A. e Chaves (PG),¹ Maria Cristina da S. Barbosa (PG),¹ Marília L. A. e Costa (PG),^{1,3} Clébio S. N. Júnior (PQ),^{1,3} Luciana Guimarães (PQ),^{1,3} Renato M. R. Viana (PQ),^{1,4} Fábio V. dos Santos (PQ),¹ Cristiana F. A. e Brito (PQ),² Fernando P. Varotti (PQ)¹, Gustavo H. R. Viana (PQ)¹.

camilasbarbosa@ufs.br

¹Núcleo de Pesquisa em Química Biológica, NQBio, UFSJ; ²Instituto René Rachou, Instituto Oswaldo Cruz, FIOCRUZ; ³Laboratório de Química Teórica e Computacional, Departamento de Ciências Naturais (DCNAT), UFSJ; ⁴Departamento Acadêmico de Química (DAQUI), UTFPR.

Palavras Chave: Halogenation, Antiplasmodial Activity, 3-alkylpyridine Marine Alkaloids Analogs

Highlights

- 3-APA analogs interfere in hemozoin formation due to its ability to interact with haematin;
- Halogenation strategy to improve antiplasmodial activity;
- Fluorination resulted in decrease in IC₅₀ and increase in SI;
- Compound **7b** was the most active and showed low genotoxicity.

Resumo/Abstract

In a recent work published in 2016¹, our research group reported that 3-alkylpyridine (3-APA) marine alkaloids analogs interact with haematin via Fe³⁺ atom. This interaction could inhibit hemozoin polymerization, which could lead to plasmodium death. In an attempt to improve antiplasmodial activity, selectivity and safety; herein, we report the synthesis of a series of new 3-APA analogs. These compounds have varied alkyl chain length and functional groups.

Initially, these analogs were prepared as depicted in Figure 1.

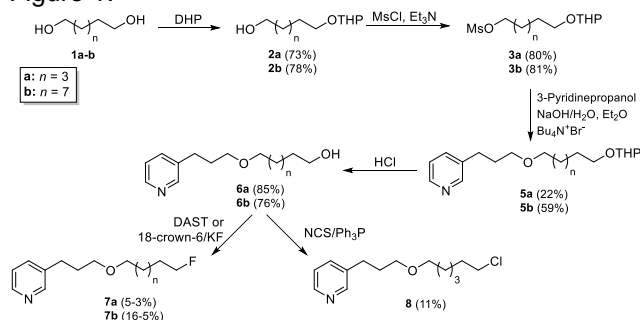


Figure 1. Synthesis of 3-APA analogs.

Biological activities were evaluated against *Plasmodium falciparum* (W2 strain) and WI-26-VA4 cell line, as shown in Table 1.

Table 1. *In vitro* biological activities of 3-APA analogs.

| Compound | Bioensaios | | |
|-----------------------|---|-----------|-----------------|
| | IC ₅₀ (μM) ± S.D. ^a | | SI ^b |
| | <i>P. falciparum</i> W2 | WI-26-VA4 | |
| 6a | 201,6±12,7 | >400 | 1,9 |
| 7a | 8,35±2,0 | 216,5±2,2 | 26 |
| 6b | 14,7±0,2 | 99,1±11,2 | 6,7 |
| 7b | 2,5±0,1 | 28,2±3,7 | 11,2 |
| 8 | 7,2±1,2 | 32,3±2,8 | 4,5 |
| CQ^c | 0,116±0,066 | >100 | >250 |

^aStandar Deviation; ^bSelectivity Index; ^cChloroquine

As shown in Table 1, halogenation improved antimalarial activity *in vitro*, resulting in reduction of the IC₅₀ values and increase in SI. Compound **7b** was the most active of this series. It was possible to confirm interaction and complex stoichiometry between haematin and compound **7b** through electronic absorption spectroscopy (EAS) and high resolution mass spectrometry (HRMS), respectively. Regarding compounds **7a** and **8**, it was confirmed they interact with haematin through EAS. Also, we confirmed that halogenation did not alter the mechanism of action of this class of compounds. Additionally, compound **7b** showed low genotoxicity, which is a good feature for drug lead compounds.

Agradecimentos/Acknowledgments

Fapemig, CNPq, CAPES e UFSJ.

1. Viana, R. M. R. *et al.* *J. Chem. Inf. Model.* *acs.jcim.5b00742* (2016).

42^a Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química: Eixos Mobilizadores em Química

Synthesis and photophysical characterization of benzoxaborole derivatives

Rodrigo, S. Fuscaldo (PG), Pedro H. V. Vontobel (PG), Eduam O. Boeira (IC), Lilian C. da Luz (IC), Angélica V. Moro (PQ), Fabiano S. Rodembusch (PQ), Jessie S. da Costa (PQ), Fabiano S. Santos (PQ)*

fuscaldo@ufrgs.br; fabiano@ufrgs.br

Instituto de Química, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Av. Bento Gonçalves 9500, Porto Alegre, Brasil
Palavras Chave: organoboron, UV-Vis absorption, fluorescence

Highlights

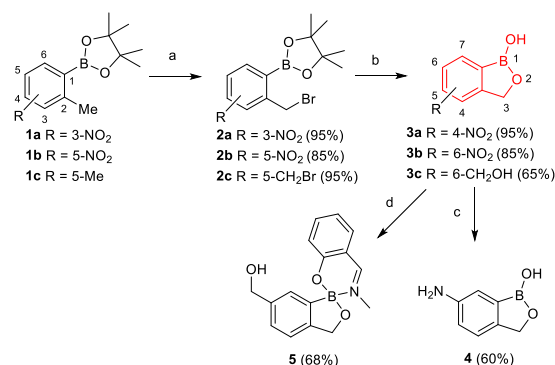
UV-Vis region-photoactive benzoxaborole derivatives obtained in good yields by employing simple synthetic methodology.

Abstract

The benzoxaborole moiety (**Scheme**, red) is a versatile boron-heterocyclic scaffold which has found a broad spectrum of applications, as anti-bacterial, anti-fungal, anti-protozoal, anti-viral, as well as anti-inflammatory agent.¹ Two compounds containing the benzoxaborole motif were approved by the FDA: crisaborole (used for dermatitis) and tavaborole (anti-fungic agent).² Despite the increasing interest in this family of compounds, few studies comprising the photophysics of benzoxaboroles have been published.³ In this sense, this work presents the synthesis and photophysical characterization of a series of benzoxaborole derivatives containing different substituents. As shown in the **Scheme**, the benzoxaborole derivatives were synthesized by the benzylic bromination of substituted *o*-methyl-boronates **1a-c** using NBS and benzoyl peroxide, followed by basic/acidic hydrolysis of **2a-c** to afford the respective compounds **3a-c**. Compound **4** was synthesized through Zn⁰ mediated reduction of **3b**.⁴ Compound **5** was obtained reacting **3c** and salicyl-methylimine by Lewis adduct formation.⁵ The relevant photophysical data is summarized in the **Table**. The absorption maxima are located in the UV region due to ¹ $\pi\pi^*$ ($\epsilon \sim 10^4$ L·M⁻¹). The emission maxima were located in the UV-blue regions due to locally excited species. Compounds **3a**, **3c** and **5** show evidences of intramolecular charge transfer (ICT) and small solvatochromic effect.

Table. Photophysical data of benzoxaborole derivatives where λ_{abs} and λ_{em} are the absorption and emission maxima (nm) and $\Delta\lambda_{\text{ST}}$ the Stokes shift (nm).

| Compound | Solvent | λ_{abs} | λ_{em} | $\Delta\lambda_{\text{ST}}$ |
|-----------|--------------|------------------------|-----------------------|-----------------------------|
| 3a | 1,4-dioxane | 264 | 368 | 104 |
| | Acetonitrile | 264 | 339/468 | 75/198 |
| 3c | 1,4-dioxane | 270 | 295/373 | 25/103 |
| | Acetonitrile | 270 | 293 | 23 |
| 4 | 1,4-dioxane | 310 | 366 | 56 |
| | Acetonitrile | 304 | 364 | 60 |
| 5 | 1,4-dioxane | 360 | 391/460 | 31/100 |
| | Acetonitrile | 354 | 464 | 110 |



Conditions: a) NBS, (PhCOO)₂, ACN, 100 °C, 24 h. b) NaOH, dioxane/H₂O, 60 °C, 1 h; then HCl, 60 °C. c) Zn, MeOH, 1 h, t.a.. d) salicyl-methylimine, toluene, reflux, 5 h

Scheme. Benzoxaborole derivatives synthesis

Acknowledgments

The authors would like to thank CNPq and CAPES/PROEX for the financial support.

¹Nocentini *et al.*, *J. Enzyme Inhib. Med. Chem.* 2018, **33**, 493.

²Leśnikowski, *Expert Opin. Drug Discov.* 2016, **11**, 569.

³(a)Tomsho *et al.*, *ACS Med. Chem. Lett.* 2012, **3**, 48. (b) Zarzeczańska *et al.*, *Eur. J. Inorg. Chem.* 2017, **2017**, 4493.

⁴Glinka *et al.*, 2015, WO 20159833018B2.

⁵Gamrat *et al.*, *J. Org. Chem.* 2018, **83**, 6193.

The challenge of individually quantifying macrocrystalline waxes in whole crude oil

Daniela França (PG) *, Vinícius B. Pereira (IC), Dayane M. Coutinho (PG), Luca M. Ainstein (IC), Débora A. Azevedo (PQ)

***danimelf@yahoo.com.br**

Universidade Federal do Rio de Janeiro, Instituto de Química, Ilha do Fundão, Rio de Janeiro, RJ 21941-909, Brazil

Palavras Chave: *High molecular weight paraffin, Pre-salt oil, Paraffin deposition, High temperature, Comprehensive two-dimensional GC, n-Paraffin quantification*

Highlights

Efficiency in separation of n-paraffins over C40
Quantification of high molecular weight paraffin in crude oils by GC×GC-FID
Powerful tools to analyze complex crude oil samples
Analysis without pre-fractionation steps
Satisfactory resolution using capillary columns at high temperatures

Resumo/Abstract

High molecular weight hydrocarbons present in petroleum are commonly referred as petroleum waxes. Waxes that are composed primarily of normal paraffin with a chain length of C20–C60+ and crystallize in large flat plates are called macrocrystalline waxes and represent major risks for wax deposition despite the low content of long-chain waxes in crude oils [1]. The paraffin deposition caused by this class of compounds in pipelines results in a gradual decrease of flow rate and therefore in equipment damage, which increases the costs of oil production. One of the most effective analytical methods for characterization of macrocrystalline waxes in petroleum is high-temperature gas chromatography (HT-GC) [2]. The present investigation is focused on the optimization and application of a high-temperature comprehensive two-dimensional gas chromatographic (HT-GC×GC) method, with flame ionization detection (FID) and time-of-flight mass spectrometry (TOFMS) for the quantitative and qualitative analysis of Brazilian whole crude oils, respectively. A set of fourteen crude oils, including three from the pre-salt layer, were studied. Linear paraffins in the range of C16–C60 were detected and identified. iso-Paraffin and naphthenic compounds in the range of C17–C60 were also identified and quantified in these crude oils. Besides that, the percentage of macrocrystalline waxes was calculated and varied from 2.7 to 23.3 % in the whole crude oil. With this, it is possible to give valuable information for the petrochemical industry contributing to our understanding of the physicochemical properties of crude oils and helps to predict the potential for wax deposition.

[1] Espada et al., *Energy Fuels* 24 (2010)1837–1843.

[2] Dutriez et al., *Journal of Chromatography A* 1216 (2009) 2905–2912.

Área: ELE

Nº de Inscrição: 00517

Electrochemical tools aiming the evaluation of the reactive dyes biodegradation

Franklin M. F. De Souza (IC)^{1*}, Carolline Schreiber (IC)¹, Patrícia Bulegon Brondani (PQ)¹, Eduardo Zapp (PQ).¹

ffrancadesouza@gmail.com

¹Departamento de Ciências Exatas e Educação, UFSC-Blumenau

Keywords: *Electrochemistry, Dyes, Biodegradation, Peroxidases, Genotoxicity.*

Highlights

- Electrochemical evaluation of textile dyes degradation by peroxidases
- Electrochemical behavior of the textile dyes
- REDOX potential and kinetic degradation
- Genotoxicity of the biodegradation products

Resumo/Abstract

Bioreactions of azo dyes are usually based on reduction–oxidation processes catalyzed by microorganisms or enzymes [1,2]. The REDOX potential is a preliminary tool to predict the decolorization capacity of oxidative biocatalysts and it is an important parameter to evaluate the efficiency of the enzyme [3]. This work evaluated the electrochemical behavior of reactive textile dyes in order to correlate the potential of the processes to the enzymatic biodegradation percentage obtained through a treatment with two types of peroxidases. The obtained kinetic data of the biodegradation for the selected dyes are in accordance with the electrochemical data obtained through cyclic voltammetry (CV). The observation of the data showed that as the REDOX potential of the substrate increases the efficiency of the biodegradation reaction decreases. In general, for oxidoreductases the oxidation processes are more relevant, based on that we evaluated the effect of the pH on the anodic process presented in the voltammetric curves of the dyes. In order to obtain a better spectrum, the molecules were analyzed through CV in different pH values (3.0 – 11.0), using Britton-Robinson as a buffer solution. The studies concluded that the potential peak of the dyes presents a tendency to decrease as the alkalinity of the solution increases, shown that the tested dyes exhibit a pH-independent behavior for anodic process. In addition of the electrochemical evaluation of the degradation processes, we also evaluated the degradation products, due to the possibility of being toxic and, in some cases, mutagenic. The genotoxicity tests of the products were carried out applying a voltammetric genosensor, based on a gold nanoparticles film and an electrochemical organic probe. None of the samples presented a signal change due to intercalation with the DNA on the sensor surface. These results indicate that the organic compounds originated by biodegradation are not genotoxic.

[1] Popli, S.; Patel, U.D. *Int. J. Environ. Sci. Technol.*, 12, 2015, 405–420.

[2] Jafari, N.; Soudi, M.R.; Kasra-Kermanshahi, R. *Microbiology*, 83(5), 2014, 484–497.

[3] Zille, A.; Ramalho, P.; Tzanov, T.; Millward, R.; Aires, V.; Cardoso, M.H.; Ramalho, M.T.; Guebitz, G.M.; Cavaco-Paulo, A. *Biotechnol. Prog.*, 20, 2004, 1588-1592.

Agradecimentos/Acknowledgments

PIBIC-CNPq-UFSC.

Comparative metabolomic profile of conventional and genetically modified soybean subjected to water stress conditions

Paula Carolina Pires Bueno (PQ)^{1*}, Liliane Marcia Mertz-Henning (PQ)², Alexandre Lima Nepomuceno (PQ)², Norberto Peporine Lopes (PQ)¹

paulabueno@yahoo.com

¹University of São Paulo, Faculty of Pharmaceutical Sciences of Ribeirão Preto, FCFRP; ²Embrapa Soja

Palavras Chave: *Glycine max*, Metabolomics, Water stress, Plant Science

Highlights

- The secondary metabolism profiles of conventional and genetically modified soybean were compared.
- Plants were subjected to different controlled water stress conditions.
- Leaves and roots were analysed by HPLC-DAD-ESI-MS/MS.
- A considerable number of secondary metabolites were identified by Molecular Networking (GNPS).
- Results were interpreted by multivariate data analysis.
- Quantitative alterations were observed between the genotypes and treatments.

Resumo/Abstract

Soybean (*Glycine max*, Leguminosae) is one of the most important food crops in the world, since the grains are primary and rich source of vegetable oil and protein for human and animal feed. The USA, followed by Brazil and Argentina are the largest producers, holding 82% of all production. However, Brazil is the largest soybean exporter, holding alone 48% of all exportations. Although the promising scenarium, the Brazilian productivity is highly impacted by events such as drought and flooding, which can reduce the yield by up to 40%. Considering this susceptibility, the Brazilian productivity could be considerably increased by the introduction of new varieties better adapted to water stresses. For that reason, many efforts have been made aiming the development and characterization of more tolerant plant genotypes, along with the establishment of suitable approaches for the identification and annotation of molecular traits that vary in response to stress events, which is a challenge. Therefore, the present study aims the identification and quantitation of water stress-responsive specialized metabolites from soybean genotypes cultivated under controlled and drought conditions. With this regard, genetically modified soybean events and its original genotype were cultivated under controlled and water stress conditions, according to the protocol defined by Honna et al. (2016)¹. Extraction conditions and the chromatographic method were defined by experimental planning. Leaves and roots were harvested, lyophilized, grounded with the aid of an analytical mill and extracted with a mixture of water/methanol 1:1, during 30 minutes with the aid of an ultrassound bath. Samples were centrifuged, filtered and subjected to HPLC-DAD-ESI-MS/MS analysis (microTOF-QII, Bruker Daltonics). Secondary metabolites were identified using Molecular Networking (GNPS)² and results were interpreted by multivariate data analysis. Results show differences between the genotypes secondary metabolism in the quantitative level. Similar results could be seen depending on the water stress conditions plants were subjected to.

¹ Honna, P. T. et al., 2016. Molecular Breeding, v. 36, p. 157.

² Wang, et al., 2016. Nature Biotechnology 34.8, 828-837.

Agradecimentos/Acknowledgments

Authors are grateful to FAPESP (# 2017/19702-6), Embrapa Soja and JIRCAS (Japan International Research Center for Agricultural Sciences).

Seriam as Terras Pretas de Índio marcadores ambientais da Idade *Meghalayan* ou da Época do Antropoceno?

Ricardo Soares (PQ),^{1*} John E. L. Maddock(PQ),² David V. B. Campos(PQ),³ Beata E. Madari(PQ),⁴ Pedro L. O. Machado(PQ),⁴ Ricardo E. Santelli(PQ)⁵
ricardosoaresuff@gmail.com

¹Instituto Estadual do Ambiente, INEA; ²Departamento de Geoquímica, UFF; ³EMBRAPA Solos; ⁴EMBRAPA Arroz e Feijão; ⁵Departamento de Química Analítica, UFRJ

Palavras-chave: Antropoceno, Idade *Meghalayan*, Terra Preta de Índio, Solos Antrópicos, *Golden Spike* do Antropoceno.

Highlights

- Were the Amazonian Dark Earths environmental markers of the Meghalayan Age or the Anthropocene Epoch?
- The soils of the Amazon Region are usually highly weathered.
- Amazonian Dark Earths of Central Amazon were evaluated in issues related to the Anthropocene Epoch or Meghalayan Age.

Resumo/Abstract

Geralmente, os solos amazônicos são pouco férteis e altamente intemperizados. Entretanto, nesta mesma região são encontrados solos arqueológicos denominados Terra Preta de Índio, que possuem elevadas concentrações de matéria orgânica estável e nutrientes minerais. Recentemente foi proposto que o Antropoceno teria começado há 2000 anos, tendo como base o uso de solos antrópicos como *Golden Spikes* do Antropoceno, com especial destaque para as Terras Pretas de Índio. Este estudo tem como objetivo comparar as características químicas de Terras Pretas de Índio e Argissolos típicos da Amazônia Central e avaliar o papel destes solos arqueológicos nas questões pertinentes aos estudos do Antropoceno. Todos os solos avaliados foram reconhecidos como distróficos, mas as Terras Pretas de Índio refletiram à sua pedogênese mais complexa, na qual processos naturais e antrópicos agem conjuntamente, ao contrário dos Argissolos. As Terras Pretas de Índio podem ser consideradas como excelentes marcadores ambientais da Idade *Meghalayan* indicando o início e a extensão de longa duração das atividades humanas pré-Colombianas na Região Amazônica, mas não possuem a características estratigráficas necessárias para serem consideradas como adequados *Golden Spikes* do Antropoceno.

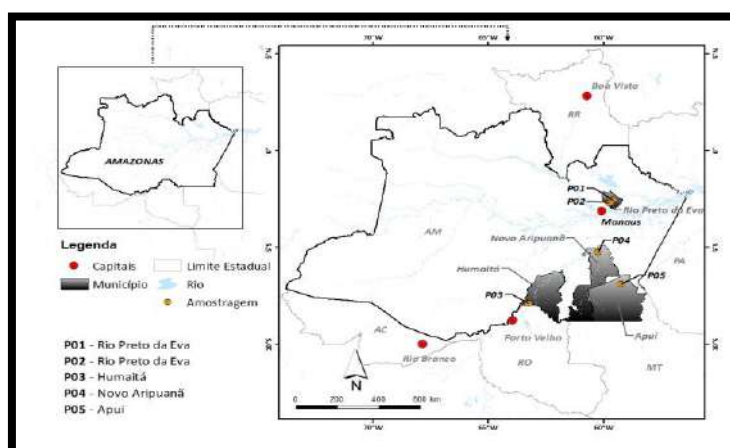


Figura 1. Localização georreferenciada das amostras de solos.

Referências:

Soares, R.; Maddock, J. E. L.; Campos, D. V. B.; Madari, B. E.; Machado, P. L. O. A.; Santelli, R. E. *Rev. Virtual Quím.*, 2018, 10, 1659-1692.

Silva, C. M.; Arbilla, G.;* Soares, R.; Machado, W. *Rev. Virtual Quím.*, 2018, 10, 1648-1658.

42ª Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química: Eixos Mobilizadores em Química

Desenvolvimento de um catalisador heterogêneo ácido para reação de esterificação a partir de um rejeito de minério de ferro

Caroline D. Prates (PG),^{1*} Rochel M. Lago (PQ),¹ Ana Paula C. Teixeira (PQ).¹

carolinedprates@gmail.com

¹Departamento de Química, UFMG

Palavras Chave: Biodiesel, Esterificação, Óxido de ferro sulfatado, Catálise heterogênea ácida.

Highlights

Development of a heterogeneous acid catalyst for the synthesis of biodiesel from an iron ore tailings. Heterogeneous acid catalyst based on sulfated iron oxide; esterification of oleic acid with metanol; mining waste used as a source of iron oxide.

Resumo/Abstract

O biodiesel é uma alternativa aos combustíveis derivados do petróleo em razão da natureza renovável, grande disponibilidade e biodegradabilidade. Uma das formas de produção desse biocombustível é a esterificação, que consiste em uma reação entre um ácido graxo livre e um álcool de cadeia curta na presença de um catalisador ácido¹. Os óxidos de metais sulfatados têm sido relatados como promissores catalisadores heterogêneos para reação de esterificação devido à acidez muito elevada dos mesmos². Portanto, neste trabalho foi sintetizado um catalisador heterogêneo ácido baseado em óxido de ferro sulfatado para produção de biodiesel, via reação de esterificação do ácido oleico com metanol, utilizando-se uma lama de rejeito de mineração como fonte de óxido de ferro.

O catalisador foi preparado por uma impregnação do rejeito com uma solução de ácido sulfúrico, o material foi calcinado a temperatura de 500°C, lavado com água para remoção de grupos sulfato livres e caracterizado por diversas técnicas.

As análises por espectroscopia Mössbauer, difração de raios X, espectroscopia na região do infravermelho e espectroscopia Raman indicam que o material é composto majoritariamente por hematita e quartzo. O mapeamento dos elementos da amostra obtido pela técnica de microscopia eletrônica de varredura acoplada a espectroscopia por energia dispersiva confirmou a presença de enxofre. A acidez superficial do catalisador foi medida por titulação potenciométrica e foi verificada a presença de sítios ácidos muito fortes.

As reações de esterificação foram realizadas em frascos de vidro fechados em um banho de areia, e as

melhores condições reacionais foram 5% de catalisador, fração molar ácido oleico:metanol de 1:15 e temperatura de 120°C. O gráfico da figura 1 mostra os resultados de conversão do ácido oleico em oleato de metila, observa-se que em 4 horas foi alcançada uma conversão de 99%. A reação também foi realizada na ausência de catalisador nas mesmas condições, e obteve-se um valor de conversão de 15%, indicando que a alta conversão alcançada está relacionada ao uso do catalisador.

Os resultados obtidos indicam que o catalisador heterogêneo ácido produzido é eficiente e promissor nas reações de esterificação do ácido oleico para produção de biodiesel.

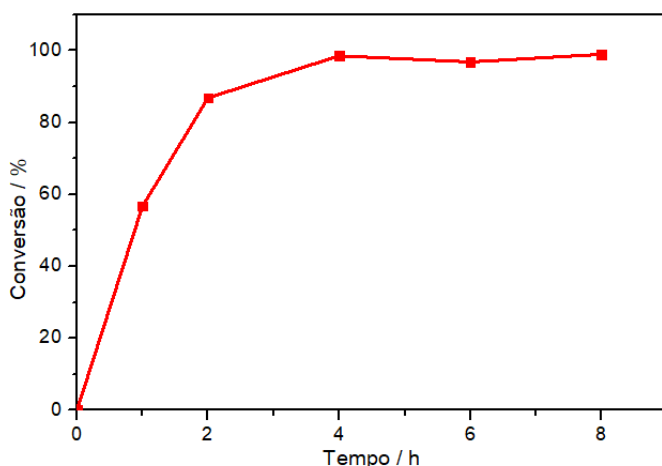


Figura 1: Valores de conversão do ácido oleico em oleato de metila na reação de esterificação com o catalisador produzido.

Referências: 1. Chai, M., *et al.*, *Fuel processing technology* (2014) 125, 106.

2. Kaur, k., *et al.*, *Green Processing and Synthesis* (2016) 5, 93-100.

Agradecimentos: Fapemig, CNPq, Capes, INCT Midas e Centro de Microscopia da UFMG.

Approaching Nanotechnology and Green Chemistry in Teaching Chemistry from the Green Synthesis of Silver Nanoparticles

Marcelo Schram (IC),¹ Eryza Guimarães de Castro (PQ),¹ Neide Hiroko Takata (PQ).¹

marceloschram2013@gmail.com

¹Universidade Estadual do Centro-Oeste, Alameda Élio Antonio Dalla Vecchia, 838 – Vila Carli, Guarapuava – PR

Palavras Chave: ensino de química, nanopartículas de prata, pectina, polpa da beterraba, síntese verde.

Highlights

Beet pulp as raw material for obtaining pectin allowed the environmentally friendly synthesis of silver nanoparticles that were subsequently used in an educational activity based on the principles of green chemistry.

Resumo/Abstract

A nanotecnologia acompanha o homem desde a antiguidade, mas o relato do uso de materiais com elevada eficiência devido à baixa dimensão em que suas partículas se encontram é atual e promove fascínio no que diz respeito a nanociências. No contexto da sala de aula o cenário ainda é bastante diferente. No ensino médio ou superior, o tema tem sido pouco explorado, mostrando que estas duas realidades ainda estão distantes. Quando existente, os experimentos voltados ao ensino de nanociências exigem cuidados e condições especiais para sua realização, inviabilizando sua execução em atividades escolares. Desta forma, este trabalho introduz uma abordagem de conceitos sobre nanociências como uma prática de ensino a partir da preparação de nanopartículas de prata (AgNP's), que dialoga com os princípios da química verde ao utilizar extrato aquoso da polpa da beterraba como responsável por reduzir os íons Ag⁺ na formação de AgNP's e estabilizar os núcleos de formação através de seu recobrimento. Alternativamente pode-se utilizar outras cascas e polpas de frutas mais acessíveis, a casca da banana é um exemplo.¹ A caracterização das AgNP's por Espectroscopia UV-Vis, realizada no Espectrofotômetro UV-Vis UV-1800 da Shimadzu, apresentou uma banda de absorvância bem definida na região próxima de 400 nm ao ajustar o pH para 6 e utilizar solução 2,0 mM do sal precursor AgNO₃, sugerindo a formação homogênea das AgNP's quanto a seu tamanho nestas condições.^{1,2} A determinação dos parâmetros ideais para a síntese de AgNP's possibilitou a elaboração de um procedimento que pode ser desenvolvida numa atividade experimental para investigar tanto os aspectos relacionados à preparação das AgNP's quanto as propriedades associadas ao produto final, como a diversidade de cores das AgNP's em função do tamanho e a própria origem dessas devido ao efeito de ressonância plasmônica de superfície e as propriedades antibacterianas das AgNP's sintetizadas, que lhes conferem ampla aplicabilidade. Além disso, a atividade pode envolver a construção da métrica holística estrela verde, mostrando que a verdura química da síntese proposta neste trabalho é 5% mais verde que a metodologia que utiliza NaBH₄ como agente redutor e estabilizante, descrita na literatura como segura para ser realizada em atividades de ensino.³ A metodologia supracitada possibilita a partir da experimentação um primeiro contato entre os alunos e os conceitos de nanociências, que são bastante discutidos em textos científicos e divulgados na mídia, mas que pouco são explorados em atividades de ensino. Sobretudo, a síntese verde de AgNP's se mostra como uma alternativa altamente viável ao não requerer condições sofisticadas para sua realização, podendo ser facilmente executada em ambientes escolares, o que a torna uma opção aos professores que se propõem a ensinar nanociências aos seus alunos.

¹Bankar, A.; Joshi, B.; Kumar, A. R.; Zinjarde, S. *Colloids Surf, A*, vol. 368, n. 1-3, pp. 58–63, 2010.

²Solomon, S. D.; Bahadory, M.; Jeyarajasingam, A. V.; Rutkowsky, S.A.; Boritz, C. J. *Chem. Educ.* 2007, 84 (2).

³Melo JR., M.A., Santos, L.S.S., Gonçalves, M.C., Nogueira, A.F. *Quim. Nova*, Vol. 35, No. 9, 1872-1878, 2012.

Facile colorimetric detection of glyphosate: kinetic and mechanistic study

Renata Hellinger (IC), Valmir Baptista da Silva (PG), Elisa S. Orth (PQ).

hellinger.renata@gmail.com

Department of Chemistry, Universidade Federal do Paraná (UFPR), CP 19032, CEP 81531-980, Curitiba, PR

Palavras Chave: Organophosphate, Herbicide, Green Chemistry, Colorimetric Detection.

Highlights

- Simple and fast method of detection of the herbicide glyphosate using a colorimetric reaction.
- Determination of reaction kinetics under varying reaction conditions (pH, concentration).

Abstract

Glyphosate (GFT) is an organophosphate used as a herbicide to kill weeds and annual grasses. However, GFT presents toxicity and is considered a carcinogenic potential in humans.¹ Therefore, its monitoring and control in the plantations is necessary. Existing methods for the detection of glyphosate are laborious, which hampers its systematic analysis. These techniques consist mainly of chromatographic methods and derivatization reactions. Herein, we propose a facile colorimetric detection of GFT, benefiting from its reaction with 1-fluoro-2,4-dinitrobenzene (DNFB), which leads to the colored product (GFTD, Figure 1). For this purpose, the kinetics of the reaction were monitored under two different concentrations, both under pseudo-first-order conditions, in buffered media (pH 8 – 11) and controlled temperature (25°C). In the first case, the GFT was in excess with concentration of 0.05 mol L⁻¹ and DNFB with concentration of 1x10⁻⁵ mol L⁻¹. In the second case, the DNFB was in excess with a concentration of 1x10⁻² mol L⁻¹ and the GFT with a concentration of 1x10⁻⁴ mol L⁻¹. The results (figure 2) show that it is possible to detect glyphosate colorimetrically in both cases, which was also confirmed by nuclear magnetic spectroscopy. In addition, the kinetic profiles differs. When GFT is in excess, a typical pseudo-first order curve is observed consistent with the expected product GFTD formation. Whilst, when DNFB is in excess, a peculiar profile with two concomitant pseudo-first order reaction is observed, due to the GFTD formation (faster reaction) and also to the hydrolysis product 2,4-dinitrophenol. Overall, we show that it is possible to detect and quantify real GFT sample contamination in distribution centers and plantations, under the varying reaction conditions carried out.

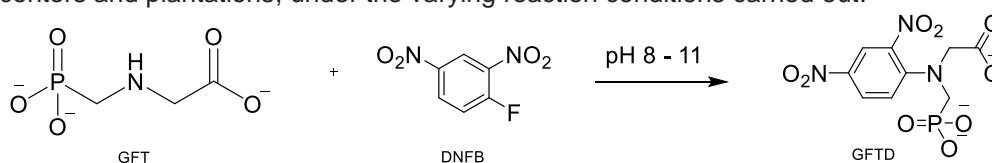


Figure 1 – (a) Reaction of GFT and DNFB.

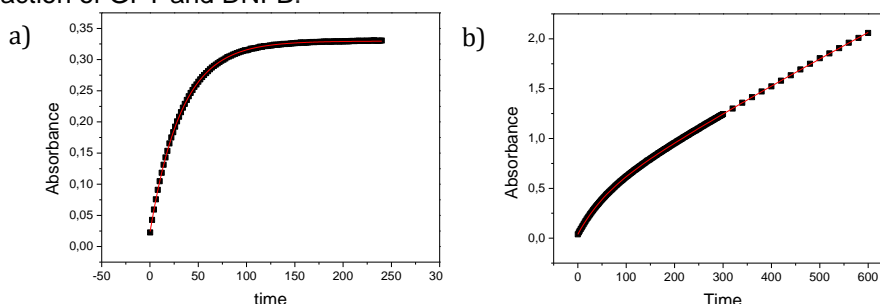


Figure 2 - kinetic profile at pH 9: (a) excess DNFB (1x10⁻² mol L⁻¹); (b) excess GFT (5x10⁻² mol L⁻¹)

¹ A.H.C. Van Bruggen, Et al, *Sci. Total Environ.* **2018**, 616–617, 255-268

Acknowledgments

UFPR, CAPES, CNPq, Fundação Araucária, PhosAgro/UNESCO/IUPAC and L'Oréal-UNESCO-ABC

Synthesis and evaluation of the antitumoral activity of new derivatives from Digoxin and Digitoxin

Matheus V. Machado (PG),¹ Silmara L. G. Alves (PG),¹ Gisele C. de Oliveira (PG),² Sayonarah C. Rocha (PG),² Leandro A. de O. Barbosa (PQ),² José A. F. P. Villar (PQ).^{1*}

matheusmg15@gmail.com; zevillar@ufs.br

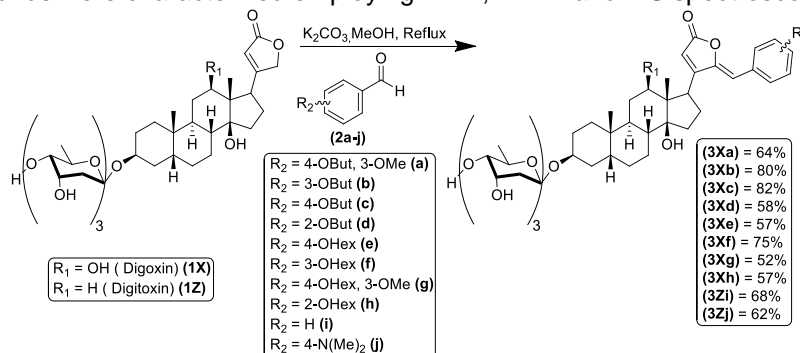
¹Laboratório de Síntese Orgânica e Nanoestruturas; ²Laboratório de Bioquímica Celular– UFSJ-CCO, Divinópolis, MG
Key Words: (Digoxin, Digitoxin, Cancer, Na,K-ATPase, Cardiotonic steroids).

Highlights

New Digoxin and Digitoxin derivatives were synthesized and evaluated as antitumoral agents. Best results showed IC₅₀ of 5,1 µM and 9,74 µM to A549 and HeLa cell lines respectively.

Resumo/Abstract

Digoxin and Digitoxin are an important class of drugs that classically known to inhibit the ion transport of the Na,K-ATPase and nowadays emerge as a promising class of molecules for cancer therapy. Therefore, the goal of our chemical modifications was to introduce an aromatic group in the lactone ring of digoxin to promote a steric hindrance in the binding site of the Na,K-ATPase (**Scheme 1**). Moreover, this chemical modification in the lactone ring of digoxin has been performed to be easy and with good yield. All synthesized compounds were characterized employing NMR, FT-IR and MS spectroscopy.



Scheme 1. Synthesis of digoxin and digitoxin derivatives.

The anticancer activities of all synthesized compounds were showed in **table 1**.

Table 1. Cytotoxic effect of digoxin derivatives against WI-26VA4, A549 and HeLa cells. Means of IC₅₀±SEM of 3 independent experiments and selectivity index (SI). SI = IC₅₀ WI-26 VA4/IC₅₀ HeLa or A549.

| Compounds | WI-26VA4 | A549 | SI | HeLa | SI |
|----------------|-----------------------|-----------------------|------|-----------------------|-----|
| | IC ₅₀ ±SEM | IC ₅₀ ±SEM | | IC ₅₀ ±SEM | |
| 3Xa (µM) | 69±6 | 37,8±4,6 | 1,8 | 9,74±1,21 | 7 |
| 3Xb (µM) | 22,3±2 | 25,1±3,6 | 0,9 | 12,62±1,02 | 1 |
| 3Xc (µM) | 26,1±3,5 | 30,3±2,8 | 0,9 | 13,63±1,36 | 1,9 |
| 3Xd (µM) | 42,4±1,5 | 55,8±4,6 | 0,8 | 15,44±0,78 | 2,7 |
| 3Xe (µM) | 96±9,9 | 57,7±11 | 1,7 | 16,71±1,10 | 5,7 |
| 3Xf (µM) | 50,7±7,8 | 36±0,1 | 1,4 | 14,46±1,16 | 3,5 |
| 3Xg (µM) | 19,1 ± 4,6 | 8±1,3 | 2,4 | 15,34±1,33 | 1,2 |
| 3Xh (µM) | 43,9±0,7 | 18,7±1,8 | 2,3 | - | - |
| Digoxin (µM) | 0,136±0,03 | 0,029±0,004 | 4,7 | - | - |
| Digitoxin (nM) | 74±5,2 | 35,5±3,4 | 2,08 | - | - |
| 3Zi (µM) | 9,6±0,8 | 7,7±0,6 | 1,25 | - | - |
| 3Zj (µM) | 7,4±0,5 | 5,1±0,5 | 1,45 | - | - |

Agradecimentos/Acknowledgments

UFSJ, CAPES, FAPEMIG, RQ-MG, CNPq

Desenvolvimento de leite em pó e composto lácteo de búfala zero lactose e caracterização das propriedades físico-químicas durante *shelf-life*.

Igor Lima de Paula (IC),^{1*} Eduarda Barbosa Scaldini Teixeira (IC),² Júlia d Almeida Francisquini (PG),³ Ítalo Tuler Perrone (PQ),² Luiz Fernando Cappa de Oliveira (PQ),¹ Rodrigo Stephani (PQ).

limaygor1996@gmail.com

¹Departamento de Química, UFJF; ²Departamento de Ciências Farmacêuticas, UFJF; ³Departamento de Ciência e Tecnologia, UFV;

Palavras Chave: Derivados lácteos, Secagem, Amorfo, Cristalização, Spray-dryer, lactose.

Highlights

Development of buffalo milk powder and milk compound zero lactose. Characterization of physical-chemical properties during shelf-life. Raman spectroscopy of buffalo milk powder. Vitreous transition.

Resumo/Abstract

A indústria de alimentos tem como desafio e oportunidade desenvolver novos produtos com baixo teor de lactose, a fim de atender uma crescente massa de consumidores com má digestão deste carboidrato. O desenvolvimento de leite em pó de búfala com baixo conteúdo de lactose é completamente inovador no mercado. Sendo assim, o principal objetivo do trabalho foi produzir leite em pó e composto lácteo (adicionado de maltodextrina) de búfala tradicional e zero lactose, além de realizar a caracterização físico-química dos mesmos durante o armazenamento em diferentes condições de umidade relativa do ar (URA). Os produtos, fabricados em duplicata utilizando um mini Spray Dryer B290 (BUCHI), foram monitorados durante 21 dias por espectroscopia Raman (Bruker, modelo RFS 100), análise de perda mássica e isoterma de sorção em diferentes condições de armazenamento (11%, 31%, 43%, 54% e 75% de URA). Por meio da análise de espectroscopia Raman e isoterma de sorção, verificou-se que os produtos em pó sem hidrólise da lactose (tradicionais) apresentaram evolução rápida no processo de cristalização em ambientes com alta URA (54% e 75%) característica oposta em condições de baixa URA (11%; 31%; 43%). Os produtos com hidrólise da lactose não apresentaram perfis espectroscópicos de cristalização da glicose e/ou galactose em nenhum dos ambientes controlados, e também demonstraram valores mais elevados de perda mássica devido à formação e liberação de moléculas de água provenientes da reação de Maillard durante o aquecimento. A espectroscopia Raman se mostrou importante para avaliar o ambiente químico dos produtos desenvolvidos.

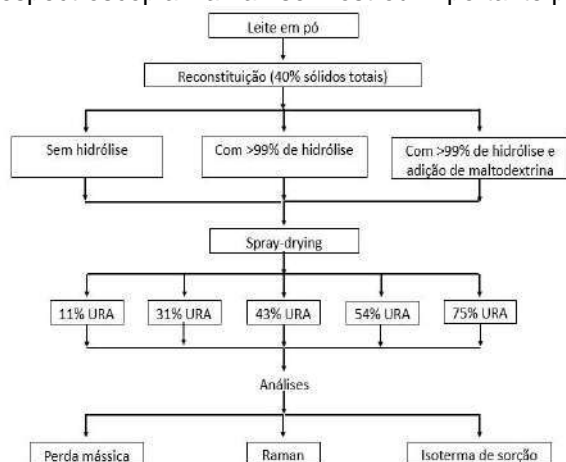


Figura 1: Fluxograma geral do trabalho

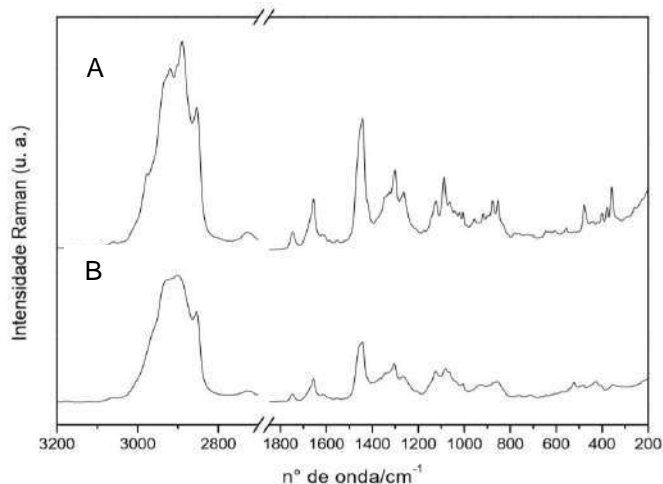


Figura 2: Espectros Raman do leite em pó cristalizado (A) e amorfo (B)

Agradecimentos/Acknowledgments

Ao CNPq, CAPES e FAPEMIG

42ª Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química: Eixos Mobilizadores em Química

Fast synthesis of WO₃/MnO₂ nanocomposite

Daniel Y. Tiba (IC),^{1, 2} **Sergio H. Domingues (PQ)**,^{1, 2*}

daniel.dayati@gmail.com; shdomingues@mackenzie.br

¹MackGraphe – Graphene and Nanomaterials Research Center, Mackenzie Presbyterian University, São Paulo, Brazil;

²Engineering School, Mackenzie Presbyterian University, São Paulo, Brazil.

Keywords: Tungsten oxide, Manganese oxide, Nanocomposite.

Highlights

We performed a very fast synthesis and the characterization of WO₃/MnO₂ nanocomposite.

Abstract

With increased production of renewable energy, storage devices and materials must be upgraded to be associated with future technologies that seek to miniaturize devices while maintaining or increasing their energy storage capacity. Among the several candidates for this purpose, are the transition metal oxides (TMOs), which are very stable materials, with relatively low cost, easy processability and synthesis. In this sense we highlight the tungsten oxide (WO₃) and manganese oxide (MnO₂).^{1,2} Although WO₃ has demerits it has multiple oxidation states and high chemical stability,^{2,3} on the other hand, MnO₂ has a high theoretical capacitance, but its electrochemical stability is not so good.¹ Thinking about this, our work shows a simple and fast synthetic route to prepare a nanocomposite based on WO₃ and MnO₂, using the nascent hydrogen as the reducing agent. For this, an acid suspension of WO₃ nanocubes was prepared and some amount of KMnO₄ was added to this suspension, followed by the addition of metallic magnesium. The reaction between the acid media and the magnesium generates the nascent hydrogen, which in turn reduces the KMnO₄ for the formation of MnO₂ nanostructures under the WO₃. Several proportions were tested, and **Figure 1** shows the scanning electron microscopy image of one of them, where we can observe the WO₃ nanocubes, indicated by the red arrows decorating the MnO₂ structure.

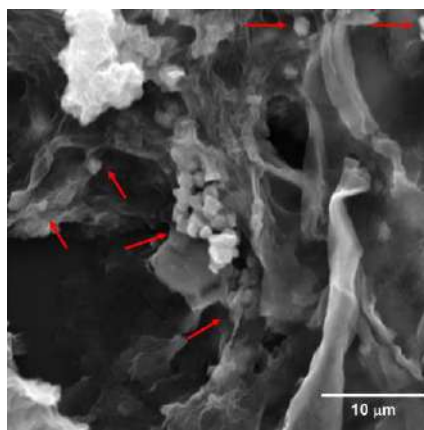


Figure 1. WO₃/MnO₂ scanning electron microscopy image.

The confirmation of nanocomposites was also performed using other techniques, such as spectroscopic, thermal and morphological. Finally, the nanocomposites were electrochemically evaluated, showing promising results when applied in energy storage systems.

Acknowledgments

Mackenzie Presbyterian University (UPM), CNPq (168959/2017-8 and 403544/2016-5), Materials Chemistry Group (GQM – UFPR), INCT of Carbon Nanomaterials and LNNano.

References: [1] Simon, P. *et. al.* Nature Materials **2008**, 7, 845. [2] Cai, Y. *et. al.* Ceramics International **2014**, 40, 4109. [3] Shinde, P. A. *et. al.* Journal of Colloid and Interface Science **2016**, 483, 261.

Área: MAT

Nº de Inscrição: 00530

Ultrasound-assisted extraction: an alternative for rare earth elements recovery from waste printed circuit boards

Thaís L. Gatiboni (PG),¹ Gabrielle D. Iop (PG),² Êmili Raddatz (IC),² Cezar A. Bizzi (PQ),² Érico M. M. Flores (PQ),^{1,2} Paola A. Mello (PQ).^{1,2*}

thaislavardagatiboni@gmail.com; paola.mello@ufsm.br

¹Programa de Pós-Graduação em Engenharia Química, Universidade Federal de Santa Maria (UFSM), Santa Maria - RS, Brazil; ²Departamento de Química, UFSM.

Keywords: Rare earth elements, Ultrasound-assisted extraction, Waste printed circuit boards.

Highlights

Feasibility of an alternative method for rare earth elements recovery from waste PCBs was investigated. Main conditions for ultrasound-assisted extraction were evaluated.

Abstract

Electrical and electronic equipment (EEE) contains a variety of valuable metals, including precious metals and rare earth elements (REE). These elements are mainly present in the printed circuit boards (PCBs). The increasing discharge of waste electrical and electronic equipment, or e-waste, is a consequence of technological advancement, making equipment obsolete quite fast and increasing the demand for new ones. In these sense, recycling of e-waste is very important to avoid environmental pollution and risks to human health, due to the toxic substances present in these materials. Printed Circuit Boards (PCBs) are components in EEE that contain a wide range of metals, including the REE (lanthanide group and yttrium). These elements are specially classified for presenting similar physical and chemical properties. They are used in several technological applications, such as in permanent magnets (Nd, Dy), polishing agents for glass (Ce), nickel metal hydride batteries for hybrid vehicles (Nd, Y, Ce, La, Pr), among others.¹ As an alternative for recycling of e-waste, recovery of metals that are contained in the PCBs, as REE, is an important secondary source of metals. Traditional methods of recycling and recovery of metals from waste PCBs are pyrometallurgy and hydrometallurgy. However, these methods have several problems, as the release of toxic gases and the use of toxic lixiviants.² In this way, the development of an alternative method for REE recovery (as well as any other metal) is an important issue. In this work, a method for REE extraction from waste PCBs was evaluated by using ultrasound combined to diluted solutions (5% v/v HNO₃ + 9% v/v HCl or 16% v/v HNO₃ + 3% v/v HCl). Ultrasound systems as bath and cup horn, operating at several frequencies and power, were evaluated. Process parameters, as temperature, time of ultrasound application and material mass to extractor volume ratio were optimized using and experimental design. Results were compared with those obtained using just heating as silent conditions, which allowed evaluate how sound wave contributed for the extraction efficiency. Characterization of e-waste before and after ultrasound treatment was carried out by scanning electron microscopy. Particle size for materials after ultrasound treatment was also evaluated. The results showed that ultrasound-assisted extraction can be an alternative method for REE extraction since the results were similar to the conventional method, but at milder conditions (diluted solutions and lower extraction time). For elements as Ce, Dy, Er, Eu, Ho, La, Lu, Sm, Tm, Y and Yb recoveries were in the range of 70 to 100%, while for Gd, Nd, Pr and Tb they were in the range of 10 to 60%.

Acknowledgments

CAPES, CNPq, FAPERGS and UFSM.

1. Tunsu, C. et al. *Hydrometallurgy* 156 (2015) 239-258.

2. Xu, Z., Zhang, L. *Journal of Cleaner Production* 127 (2016) 19-36.

Área: INO

Nº de Inscrição: 00531

Ruthenium/nitrosyl/amino acids complexes inhibit MDA-MB-231 breast cancer tumor cell growth and migration

Caio Cesar Candido (IC)¹, Marília I. F. Barbosa (PQ)^{1,3*}, Rodrigo S. Corrêa (PQ)², Adriana P. M. Guedes (PG)³, Francielli M. Andrade (PG)⁴, Celisnólia M. Leite (PG)³, Elisângela P. Silveira-Lacerda (PQ)⁴, Javier A. Ellena (PQ)⁵, Antônio C. Doriguetto (PQ)¹, Alzir A. Batista (PQ)³

caiocandido95@hotmail.com; mariliaifrazaob@gmail.com.br

¹Instituto de Química, UNIFAL-MG; ²Departamento de Química, ICEB-UFOP; ³Departamento de Química, UFSCar; ⁴Instituto de Ciências Biológicas, UFG; ⁵Instituto de Física de São Carlos, USP

Palavras Chave: Amino acids, Ruthenium, Nitric oxide, Breast cancer.

Highlights

Synthesis of nitrosyl amino acids ruthenium (II) complexes; All compounds decrease the percentage of viable cells and induce cell death by apoptosis; Ru(II) complexes inhibited the migration capacity of MDA-MB-231 cells.

Resumo/Abstract

Chemical systems involving ruthenium complexes have been studied regarding to design new transition metal compounds for biological applications, with greater specificity and selectivity for tumor cells. In addition, their biological properties can be improved with association of active ligands, such as nitrogen monoxide (NO), that displays an important role in the regulation of a wide range of physiological processes and cytotoxic action with respect to tumor cells and amino acids, an inoffensive molecule to the organism, which plays central roles both as building blocks of proteins and as intermediates in metabolism. Herein, ruthenium compounds of the type $[\text{RuCl}(\text{AA})(\text{NO})(\text{dppb})]\text{PF}_6$, were AA = glycine (Gly, **1**), alanine (Ala, **2**), phenylalanine (Phe, **3**) and valine (Val, **4**), and the dppb = 1,4-bis(diphenylphosphine) butane were obtained. The complexes **1-4** were characterized by elemental analysis, UV/Vis, infrared spectroscopy, cycle voltammetry, ¹H, ¹³C and ³¹P NMR. Also, crystal structure of complexes **1** and **3** were determined by single-crystal X-ray diffraction (Fig. 1). In vitro evaluation of these Ru(II) /nitrosyl/aminoacids complexes revealed cytotoxic activity against human breast cancer cell line MDA-MD-231 (Table 1). All the compounds decrease the percentage of viable cells and induce cell death by apoptosis. Additionally, Ru(II) complexes inhibited the migration capacity of MDA-MB-231 cells.

Table 1. IC₅₀ values and selectivity index (SI) of ruthenium (II) complexes against breast cancer (MDA-MD-231) and non-tumor (L929) cells. Data show means ± SD of three independent experiments.

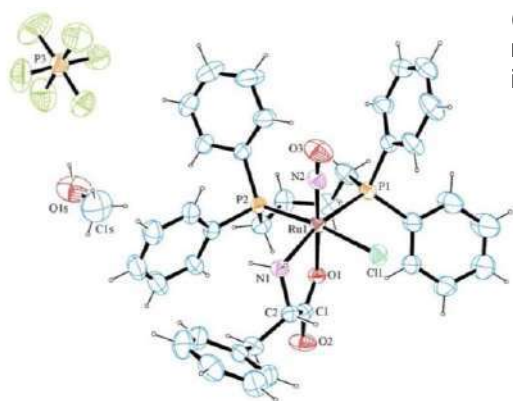


Figure 1. Ortep view of $[\text{RuCl}(\text{NO})(\text{Phe})(\text{dppb})]\text{PF}_6$ (**3**) with 30% probability ellipsoids for non-H atoms

| Compound | IC ₅₀ (μM) | | SI |
|-----------|-----------------------|------------|------|
| | MDA-MB-231 | L929 | |
| 1 | 33.6 ± 3.9 | 84.7 ± 3.1 | 2.5 |
| 2 | 25.9 ± 5.8 | 79.3 ± 2.5 | 3.1 |
| 3 | 12.1 ± 0.7 | 37.5 ± 4.7 | 3.1 |
| 4 | 23.9 ± 1.2 | 66.1 ± 4.2 | 2.8 |
| Cisplatin | 2.43 ± 0.20 | 29.0 ± 2.0 | 11.9 |

Agradecimentos/Acknowledgments

PIBIC/CNPq/UNIFAL-MG, CNPq, CAPES, FINEP, FAPEMIG e FAPESP

Área: QPN

Nº de Inscrição: 00532

Using new tools for the metabolomic study and dereplication of marine actinomycetes extracts.

Eduarda Antunes Moreira (PG)^{1*}, Paula Rezende Teixeira (PG)², Leticia Veras Costa-Lotufo (PQ)², Norberto Peporine Lopes (PQ)¹

em.antunes@yahoo.com.br

¹Núcleo de Pesquisa em Produtos Naturais e Sintéticos (NPPNS), School of Pharmaceutical Sciences (FCFRP) São Paulo University (USP); ²Laboratório de Farmacologia Marinha, Biomedical Sciences Institute, São Paulo University (USP)

Keywords: *Metabolomics, Molecular Networking, Global Natural Products Social Molecular Networking (GNPS), Marine Actinomycetes.*

Highlights

The molecular network of marine actinomycetes extracts showed that they are an important source of structurally diverse metabolites, such as diketopiperazines, auxins and surfactin.

Resumo/Abstract

Within the study of natural products, the marine environment has been raising great interest of researchers by revealing a large number of unpublished compounds each year. Considering the origin of these substances, the microorganisms found either in symbiosis with invertebrates, or in the sea sediment, may represent important sources of structurally diverse and potentially bioactive metabolites. Therefore, this study aimed to apply modern tools for the dereplication of marine actinomycetes extracts, widely exploring their chemical characteristics. An LC-MS/MS method was used for the acquisition of information on the exact mass and fragmentation patterns of the compounds, and data was compiled and treated using the Global Natural Products Social Molecular Networking (GNPS) platform. The samples were prepared by the inoculation of 100 pure cultures of actinomycetes in liquid media containing soluble starch, yeast extract and peptone. After 7 days under 150 RPM agitation and 28 °C, the fermented broth was filtered and added with ethyl acetate for liquid-liquid partition, and dried by reduced pressure. Then, the samples were solubilized in methanol (6.0 mg.mL⁻¹) and analyzed by UFLC-(ESI)-MS/MS (microTOF-QII), using an Ascentis[®] Express C18 column (15 cm x 4,6 mm, 2,7 µm particle size, SupelcoTM). The mobile phase was composed of (A) H₂O/HCO₂H (0.1%) (v/v) and (B) CH₃CN / HCO₂H (0.1%) (v/v), at a flow rate of 0.7 mL.min⁻¹, using an exploratory gradient elution: 0.1 min – 5% B; 30 min – 100% B; 35 min – 100% B; 40 min – 5% B; 45 min – 5% B. The ESI ionization method was applied in the positive mode, with a mass range from 50 to 1500 m/z. Data was converted to the required format and uploaded to GNPS to be submitted to the metabolomic analyzes. A molecular network was created using the online workflow at the platform. Data was clustered with MS-Cluster with a parent mass tolerance of 0.01 Da and a MS/MS fragment ion tolerance of 0.02 Da to create consensus spectra. A network was created where edges were filtered to have a cosine score above 0.7 and more than 3 matched peaks. The spectra in the network were searched against GNPS' spectral libraries. The library spectra were filtered in the same manner as the input data. The resulting molecular network presented 24024 nodes and, among them, 19980 consensus spectra were considered similar to the ones available in the libraries. The annotations suggested by the software so far strongly support the hypothesis that marine actinomycetes, similarly to some terrestrial microorganisms, present great diversity in their secondary metabolites' scaffolds, with potential to present biological activities. Some of the classes and compounds present in the samples include diketopiperazines, auxins and surfactin.

Agradecimentos/Acknowledgments

We thank FINATEC (grant #110/2018) and FAPESP (grant #2015/17177-6) for funding this research.

Área: ANA Nº de Inscrição: 533

Optimization of a CV-ICP-MS system for quantification of Hg²⁺, applying it for total Hg and fractionation analysis

Patricia C.C. Ladeira (PG),¹ Thaís C. de Araújo (IC),¹ Bruno L. Batista (PQ),^{1*}patricia.ladeira@ufabc.edu.br; bruno.lemos@ufabc.edu.br¹Centro de Ciências Naturais e Humanas, UFABCPalavras Chave: cold vapor, mercury, Hg²⁺, hyphenated technique, ICP-MS.

Highlights

Simple system of cold vapor generation was applied to determination of Hg²⁺ with high sensitivity and accuracy, presenting limits of detection and quantification in the order of ng L⁻¹. This system can be applied in fractionation analysis.

Abstract

Mercury (Hg) occurs naturally in environment, including atmosphere, water, soil and bioaccumulated in plants and animals. Exposure and poisoning by Hg and its compounds are a worldwide preoccupation due to its biological effect,¹ so the development of analytical methodologies has an extreme importance, as for total quantification as for fractionation and speciation. In this work, a system for Hg²⁺ determination by cold vapor generation hyphenated to inductively coupled plasma mass spectrometry (CV-ICP-MS) was optimized, allowing its application in total Hg quantification and fractionation analysis. Based on study of Rodrigues *et al.* (2009)², a system was assembled with a peristaltic pump Marte MPV-500 for introduction of reagents through Tygon® tubes with 1.52 mm of intern diameter. The nebulizer argon (Ar) line of ICP-MS (Agilent 7900) was linked to the system and a chamber of gas/liquid separation replaced the nebulizer and spray chamber, being connected to the ICP torch. An online redox reaction occurred between Hg²⁺ and reducing agents (both introduced in a continuous flow) generating Hg^{0(g)}, that was carried to the ICP-MS by the Ar flow while the aqueous phase was wasted. In ICP-MS, the isotope ²⁰²Hg was quantified for being the most abundant in nature and returning a higher sensitivity. The first step to apply the system was the optimization of Ar flow rate introducing Hg²⁺ 5.0 µg L⁻¹ (in HNO₃ 1.0 % v v⁻¹), HCl 4.0 % v v⁻¹ and NaBH₄ 0.4 % w v⁻¹ (in NaOH 0.1 % w v⁻¹) at 400 µL min⁻¹ each. Varying the Ar flow rate from 0.1 to 1.6 L min⁻¹, it was verified a higher sensitivity with 1.2 L min⁻¹. After this, the best concentration of sodium borohydride (NaBH₄) and tin (II) chloride (SnCl₂), applied as reducing agents, were investigated introducing Hg²⁺ 2.0 µg L⁻¹ (in acid medium) and the reducing agent in study at 600 µL min⁻¹ each. Concentration of NaBH₄ (in NaOH, from 0.05 to 0.15 % w v⁻¹) was varied from 0.2 to 0.6 % w v⁻¹ and the best results were got with 0.5 % w v⁻¹. In its turn, SnCl₂ (in HCl 10 % v v⁻¹) concentration was varied from 0.2 to 1.4 % w v⁻¹, and the best condition was obtained for 0.8 % w v⁻¹. Knowing the best experimental conditions for Hg quantification by CV-ICP-MS, analytical parameters were determined for each reducing agent and for determination by ICP-MS. The best results were obtained applying SnCl₂, presenting an enrichment factor in sensitivity equal to 21 when compared to ICP-MS determinations, limits of detection and quantification equals to 9 and 29 ng L⁻¹, respectively, and RSD inferior to 2,0%. The accuracy was investigated by determination of total Hg in LOAM SOIL ERM® - CC141 and FISH MUSCLE ERM® - BB422, both from European Reference Materials, after digestion in closed microwave system equipped with PTFE vessels, model Ethos Easy from Milestone Srl, applying heating program based in Nardi *et al.*, 2009³. Total Hg quantification by CV-ICP-MS with SnCl₂ presented 110 ± 6 and 114 ± 23 % of recovery for LOAM SOIL® and FISH MUSCLE®, respectively. Besides the accuracy and sensitivity of the system for total Hg, experiments performed showed signals for methylmercury similar to blank, allowing the application in fractionation analysis by the determination of inorganic Hg.

1. Clarkson, T.W.; Magos, L., *Crit. Rev. Toxicol.*, v. 36, p. 609-662, 2006.

2. Rodrigues, J.L.; Torres, D.P.; de Oliveira Souza, V.C.; Batista, B.L.; de Souza, S.S.; Curtius, A.J.; Barbosa Jr., F., *Anal. At. Spectrom.*, v. 24, n. 10, p. 1414-1420, 2009.

3. Nardi, E.P.; Evangelista, F.S.; Tormen, L.; Saintpierre, T.D.; Curtius, A.J.; de Souza, S.S.; Barbosa Jr., F., *Food Chem.*, v. 112, p. 727-732, 2009.

Acknowledgments

UFABC, CAPES, FAPESP

42ª Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química: Eixos Mobilizadores em Química

Área: QPN Nº de Inscrição: 535

Metabolomic study of Brazilian Orchidaceae species using molecular network and multivariate analysis.

Camila Capel Godinho (PG),^{1*} Anelize Bauermeister (PQ),¹ Emerson Ricardo Pansarin (PQ),² Norberto Peporine Lopes (PQ),¹ Leonardo Gobbo Neto (PQ)¹

capel.godc@gmail.com

¹Núcleo de Pesquisa em Produtos Naturais e Sintéticos (NPPNS), Physics and Chemistry Department, School of Pharmaceutical Sciences of Ribeirão Preto, FCFRP-USP; ²Laboratório de Biologia Molecular e Biossistemática de Plantas (LBMBP-USP), Biology Department, Faculty of Philosophy, Sciences and Letters of Ribeirão Preto, FFCLRP-USP.

Keywords: Orchidaceae, Metabolomics, LC-MS/MS, Molecular Network, Multivariate analysis, Dereplication.

Highlights

Molecular network (MN) were used to study the chemical diversity of Brazilian Orchidaceae species. Grouping patterns observed in MN and HCA analysis were consistent with phylogenetic studies.

Abstract

Plant Metabolomics studies has shown to be an important tool to accelerate and optimize the evolution of basic science. The omics approaches propose an integrative study, using classic and innovative tools for rapid identification of compounds. Since it reflects the phenotype, the metabolome provides a richness of information for understanding biological systems. The Orchidaceae family is one of the most fascinating due to its ecological diversity and variety and specialization of the floral structure. In addition to ornamental use, studies have shown the wide chemical diversity of the family and their use in folk medicine. However, studies on Brazilian orchids are still scarce. Due to the potential demonstrated by the family, the study of metabolites from Brazilian orchids and their importance in a biological and ecological context are of great interest. Therefore, this work aimed to investigate the chemical diversity of 111 species of Brazilian Orchidaceae through LC-MS/MS analyzes, to allow the dereplication of extracts by molecular network (GNPS) and data mining. 10 mg of powdered plant were extracted with methanol:water (7:3) under sonication for 10 minutes, followed by centrifugation, filtration and drying. The extracts were analyzed by UFLC-DAD-ESI-MS/MS (micrOTOF-QII), using CH₃CN / HCO₂H (0.1%) (v/v) (B) and H₂O/HCO₂H (0.1%) (v/v) (A) as the mobile phase at a flow rate of 1.0 mL/min. The LC-MS/MS data was used to construct a molecular network, an online molecular tool based on MS/MS spectral similarity. 375 fragmentation spectra matches those present in the GNPS library, among them flavonoids, such as O-diglycosylated, C-O-diglycosylated and Di-C-glycosylated flavones, O-glycosylated and O-diglycosylated flavonols, besides aurones, coumaric, caffeic and ferulic acid derivatives, coumarins, polyphenols, chalcones and dihydrochalcones, glycopiranosides, phenolic amides, xanthenes, terpenoides, and steroidal saponins. However, many nodes were not annotated, highlighting the potential of new structures in Orchidaceae. In addition, the Molecular Network demonstrated a trend of metabolites distribution among taxa and phylogenetic groups, presented in the classification of Chase *et. al.* (2015) and phylogenomic study of Givnish *et. al.* (2015, 2016). Such trend of grouping was also visualized by non-supervised multivariate statistical analysis HCA (Hierarchical Cluster Analysis). In the context of omics approaches and using classical and innovative tools, this study performed the rapid dereplication of secondary metabolites, making it possible to explore the chemical composition of extracts of Brazilian Orchidaceae species, and open doors to new possibilities that extend studies of chemotaxonomy, biosynthesis routes and bioactivity of compounds.

References:

- Givnish, T.J. *et. al.* (2016). *Journal of Biogeography*, v. 43, 1905–1916.
Givnish, T.J. *et. al.* (2015). *Proceedings of the Royal Society B*, v. 282, p. 1553.
Chase, M.W. *et al.* (2015). *Botanical Journal of the Linnean Society*, v.177, p. 151–174.

Acknowledgments

We thank CAPES for funding this project.

Área: ANA

(Inserir a sigla da seção científica para qual o resumo será submetido. Ex: ORG, BEA, CAT)

Nº de Inscrição:00537

(Inserir o número de inscrição do autor que fez a submissão)

Optimization of analytical method for determination of aminoglycosides in pharmaceutical formulations by CE-DAD**Tiago Augusto Donegatti (PG),¹Elisabete Alves Pereira (PQ),^{1*}****tiagodonegatti@hotmail.com; ealves@ufscar.br**¹ Departamento de Física, Química e Matemática, Programa de Pós Graduação em Biotecnologia e Monitoramento Ambiental (PPGBMA)– UFSCar, Sorocaba.Palavras Chave: *O*-phtalaldehyde (OPA), Aminoglycosides, Gentamicin, Paromomycin, CapillaryElectrophoresis-Diode Array Detector (CE-DAD).**Highlights**

First time simultaneous separation of gentamicyn and paromomycin was presented by CE; OPA as derivatizing reagent for gentamicin and paromomycin determinaiton by CE – DAD;

Resumo/Abstract

One of the major challenges for public health in developing countries is the creation of tools to combat and eradicate some neglected tropical diseases, such as leishmaniasis. A variety of therapies for cutaneous leishmaniasis exists and has been described in literature. The use of a 15% paromomycin (PM) formulation containing 0.5% gentamycin (GM) have produced satisfactory effects in the treatment of certain species of leishmaniasis. In this work, a new method for the simultaneous determination of PM and GM using *o*-phtalaldehyde (OPA) as derivatizing reagent was established. Figure 1 shows the separation system under optimized conditions. The calibration curves were linear in the concentration range from 50 - 200 mg L⁻¹ ($r > 0,99$). The detection limits (LODs) of the CE method were evaluated based on the signal-to-noise ratio and varied in the range of 5,0 mg L⁻¹ (P3) to 50mg L⁻¹ (G2). The application of the method for pharmaceutical formulations is under investigation.

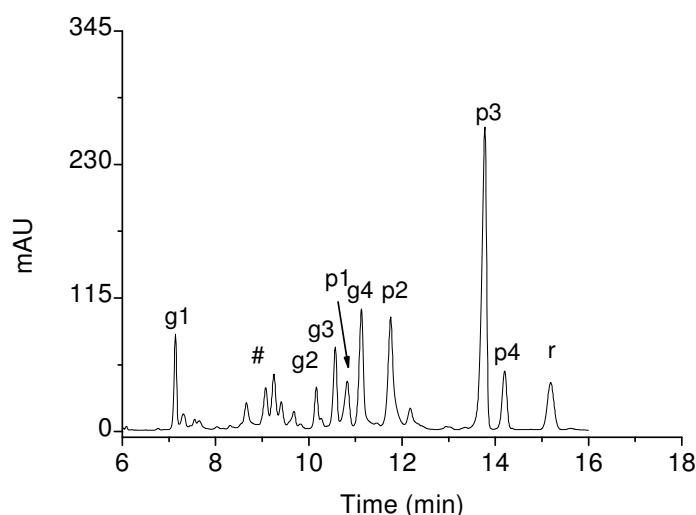


Figure 1: Electropherogram of the standard of 200 mg L⁻¹ of GM and PM. Conditions: electrolyte containing 40 mmol L⁻¹ sodium tetraborate, 3 mmol L⁻¹ β-cyclodextrin and 15.5% Methanol. Temperature: 23 ° C. Voltage: 15 kV. Injection: 50 mbar x 5 s. Capillary of 75 μm i.d. x 40 cm of total length (31.5 cm of effective length). Detection: 230 nm. Identification of the peaks: (g1) (g2) (g3) (g4): gentamicin, (p1) (p2) (p3) and (p4): paromomycin, (r): reagent, (#) unknown.

Acknowledgments: This study was financed in part by the Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior - Brasil (CAPES) - Finance Code 001. EAP acknowledges FAPESP (11/23286-1).

42ª Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química: Eixos Mobilizadores em Química

Fuels production by thermal decomposition of copper oleates

Vivian Andrade Luciano (PG),¹ Marcelo G. Rosmaninho (PQ),² Ana Paula C. Teixeira (PQ)¹

vivian.andrade87@gmail.com;

¹Departamento de Química, UFMG; ²Departamento de Química UFOP

Keywords: Copper oxide, copper oleate, oleic acid, fuels, thermal decomposition

Highlights

A new synthesis of copper oleates from copper oxide and oleic acid is proposed; Production of fuels by thermal decomposition of the copper oleates;

Resumo/Abstract

In recent years, the main investigated raw material for fuels production is the vegetable oils¹. However, the presence of free fatty acids in the composition of vegetables oils, it is the main drawback on the fuel production, mainly for the production of biodiesel². Several processes have been studied as an alternative for the production of other fuels, using acid oils. Therefore, in this work, was developed a new synthesis of copper oleates and its applied in the production of fuels of industrial interest, using a thermal decomposition of the oleates. The oleates were prepared in the molar ratios 1:1 and 2:1 (acid: copper oxide), at 150 °C and were characterized by infrared spectroscopy (Figure 1.A) and thermogravimetric analysis. The reactions of thermal decomposition were realized at 550 °C and were obtained solids, liquids and gaseous products (Figure 1.B). The products were characterized by elemental analysis (CNH), XRD, Raman spectroscopy, SEM, TEM, FTIR, TG, TG-MS, GC and GC-MS. The results showed that the solid products obtained for the two molar ratios are constituted by carbon and reduced Cu⁺ and Cu⁰ species. The major liquid product formed was the oleic acid. Moreover, the main gaseous product was the hydrogen gas, and as secondary products CO₂ and some hydrocarbons (C₁ the C₄). Thus, from the thermal decomposition at 550 °C, the oleic acid deoxygenation was realized obtaining several important products for the industrial sector.

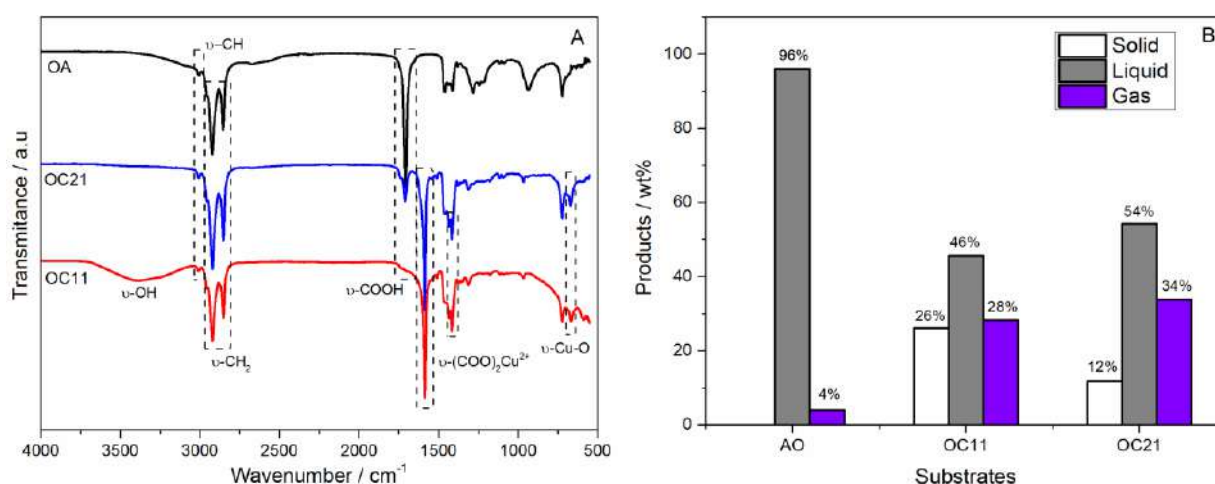


Fig. 1 – A) FT-IR spectra obtained for oleic acid and the copper oleates in the 2:1 and 1:1 molar ratios at 150°C. B) Product distribution (wt%) for the thermal decomposition of oleic acid and OC11 and OC21 oleates at 550°C.

References:

¹ K.Hengst, *et al*, *Appl. Catal. B. Environ.* 174 (2015); ² M. Liu, *et al*. *Food Chem.* 242 (2017).

Acknowledgment: CNPq, FAPEMIG, CAPES, INCT Midas

Área: EDU

Nº de Inscrição: 00540

Desafios e possibilidades de inclusão em IFES: Uma análise a partir de relatos de licenciandos em química da UFTM

Milena Sampaio dos Santos (IC)¹, **Junfanlee Manoel O. Feliciano** (IC)^{1*}, **Luciana Caixeta Barboza** (PQ)².

milenasampsts68@gmail.com; **junfanleemanoel@hotmail.com**; **luciana@ensinodeciencias.com**

¹Curso de Licenciatura em Química, UFTM; ²Depto. de Educação em Ciências, Matemática e Tecnologias, UFTM.

Palavras Chave: *Inclusão, IFES, Deficiência.*

The challenges and possibilities of inclusion in IFES: An analysis based on reports from chemistry graduates of UFTM

The objective of this study was to analyze the reports of chemistry graduates at the Federal University of the Triângulo Mineiro (UFTM) on the difficulties of inclusion in higher education in Brazil.

Resumo/Abstract

A Lei 13.409, de 28 de Dezembro de 2016¹, elaborada pelo Ministério da Educação, determina a obrigatoriedade das Instituições Federais de Ensino Superior (IFES) reservarem vagas para pessoas com deficiência em seus cursos. Observa-se, assim, uma ampliação do acesso aos espaços da Universidade às pessoas que possuem deficiência. Esse aumento por si só é motivo de comemoração, porém, faz-se necessário refletir sobre as necessidades e demandas que esta ampliação acarreta. Utilizando-se deste panorama o objetivo deste estudo foi analisar os relatos dos licenciandos em Química na Universidade Federal do Triângulo Mineiro (UFTM) a partir de uma questão norteadora: “Você considera que a UFTM fornece suporte para a inclusão de pessoas com deficiência nos cursos de graduação?”. Amparando-se no paradigma de estudo de caso buscou-se compreender os desafios e possibilidades para o processo de inclusão no ensino superior de pessoas com deficiência bem como quais as medidas para amenizar a realidade observada na UFTM. O instrumento para coleta de dados utilizado nesta pesquisa foi um questionário aberto ancorando-se em uma abordagem qualitativa de pesquisa utilizando Ginsburg² e buscando os indícios e pistas nos discursos dos sujeitos da pesquisa. Nos discursos apresentados observam-se alguns pontos comuns como a falta de recursos estruturais, de pessoas capacitadas, entre outros fatores, como apresenta alguns dos participantes da pesquisa em resposta a pergunta. Os mesmos foram identificados com a letra P e um número: “Não, porque faltam pessoas capacitadas para transmitir a informação; investimento e estrutura para atendermos tal público.” (P2); “Bom no meu ponto de vista precisaria dar uma reestruturada na faculdade e no prédio da faculdade, para dar um suporte digno e de qualidade ao aluno. Ele terá muita dificuldade se for fazer um curso no prédio da Univerdecidade.” (P3); “Acredito que não, pelo menos na época em que cursei. Não havia recursos para pessoas cegas, surdas e acredito que isso envolve outras especificidades.” (P4). Constatou-se nesta pesquisa que os participantes consideram que a UFTM não fornece suporte adequado para a inclusão de pessoas com deficiência nos cursos de graduação. A sua estrutura física possui escassas áreas acessíveis à pessoas com deficiência. No contexto profissional, os profissionais capacitados para o atendimento à essas pessoas e as disciplinas nas matrizes curriculares dos cursos de graduação que agregam a educação especial e inclusiva são limitados. Sendo assim, a acessibilidade ainda deve ser ampliada e discutida para mobilizar as IFES a receberem mais adaptações e se tornarem cada vez mais acessíveis e as discussões sobre esta temática ampliada.

Agradecimentos/Acknowledgments

Agradecemos aos participantes da pesquisa e à UFTM pelo apoio recebido.

¹ BRASIL. *Lei Nº 13.409, de 28 de dezembro de 2016*. Altera a Lei no 12.711, de 29 de agosto de 2012, para dispor sobre a reserva de vagas para pessoas com deficiência nos cursos técnicos de nível médio e superior das instituições federais de ensino. 2016. Disponível em: <http://www.planalto.gov.br/ccivil_03/_Ato2015-2018/2016/Lei/L13409.htm>. Acesso em: 20 jan. 2019.

² GINZBURG, C. *Sinais – raízes de um paradigma indiciário*. In: GINZBURG, C. *Mitos, emblemas, sinais: morfologia e história*. São Paulo: Companhia das Letras, 1989.

Evaluation of electrochemiluminescence activity of luminol functionalized AgNPs for application as ECL labeling

Carolina Venturini Uliana (PQ),^{1,2*} Hideko Yamanaka (PQ),^{1,2}.

hideko.yamanaka@unesp.br; ulianacv@gmail.com

¹Departamento de Química Analítica, Instituto de Química da Unesp de Araraquara; ² Instituto Nacional de Tecnologias Alternativas para Detecção, Avaliação Toxicológica e Remoção de Contaminantes Emergentes e Radioativos (INCT-DATREM).

Palavras Chave: ECL, Nanoparticle, Luminol, Label.

Highlights

- Synthesis of luminol functionalized silver nanoparticle
- Electrochemiluminescence of luminol and AgNP-Lu
- Silver nanoparticles catalyze the luminol reaction at pH 7.4.

Abstract

Electrochemiluminescence (ECL), which combines the electrochemical and luminescent techniques, is a light emission process in a redox reaction of electrogenerated reactants. Luminescent transitions occur during relaxation from an excited intermediate level to a lower energy level state [1]. Functionalized nanomaterials have attracted interest due to their promising applications. Among them, luminol functionalized AgNPs (AgNP-Lu) as ECL tags allow ultrasensitive assays [2]. AgNPs-Lu were prepared by the reduction of AgNO₃ with luminol in the presence of ethanol, according to the literature [2]. The solution was maintained at stirring, and a color change from colorless to primrose yellow to deep yellow indicated the formation of silver nanoparticles. ECL and voltammetric simultaneous measurements were carried out using the μ Stat ECL Dropsens. Luminol solution presents ECL signal only in basic pH values as pH 10 and has no luminescence signal at pH 7.4 (Fig.a). However, AgNPs-Lu presented an intense ECL signal (Fig.b) and electrochemistry signal (Fig.c). The linear scanning voltammogram can refer to the oxidation of silver and luminol and ECL peak, with a maximum of 0.43 V indicating that the silver nanoparticles catalyze the luminol reaction at pH 7.4. This result is important, since for using it as a label for the affinity reactions, for example, antigens-antibodies, the pH value has a great effect, and is generally carried out in pH 7.4 medium. Thus, AgNP-Lu has ECL signal at neutral pH and can be used as label of affinity reactions.

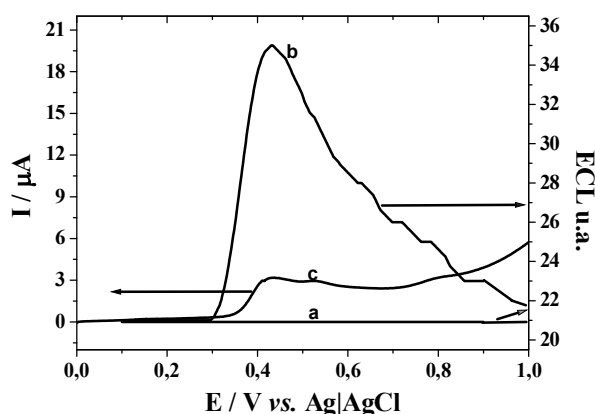


Figure 1: ECL intensities obtained in luminol solution (a) and AgNP-Lu solution (b) in PBS pH 7.4 in the presence of H₂O₂, and LSV voltammogram of AgNP-Lu (c).

Acknowledgements: INCT-DATREM (Proc. CNPq 465571/2014-0, Proc. FAPESP 2014/50945-4), Proc. CAPES 88887136426/2017/00).

References

- [1] RICHTER, M. M. Electrochemiluminescence (ECL). Chem. Rev. v. 104, p. 3003-3036, 2004.
 [2] Zhao, H.-F., et al. Biosens. Bioelect. v. 63, p. 458-464, 2015.

Área: ANA*(Inserir a sigla da seção científica para qual o resumo será submetido. Ex: ORG, BEA, CAT)***Nº de Inscrição: 00546***(Inserir o número de inscrição do autor que fez a submissão)*

Multivariate image analysis for fast determination of total solid soluble in mangos (*Mangifera indica*) using the PhotoMetrix-PRO 1.1.3

Ionara Xavier Bento (IC).¹ Allan Nilson de Sousa Dantas (PQ).^{2*}**xavier.ionara2@gmail.com; allan.dantas@ifrn.edu.br.**^{1,2}Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia do Rio Grande do Norte, IFRN.

Palavras Chave: PhotoMetrix-PRO, Imagens Digitais, PLS, Calibração Multivariada, BRIX.

Highlights

Digital image analysis for prediction of Brix in mangoes.

Resumo/Abstract

Estabelecer um período adequado para colheita de frutos visando o alcance de propriedades desejáveis é um dos objetivos dos produtores. Neste contexto, análises de imagens digitais associadas com ferramentas quimiométricas auxiliam na rápida determinação de parâmetros físico-químicos. Este trabalho tem por objetivo desenvolver um modelo de calibração por mínimos quadrados parciais utilizando o app PhotoMetrixPRO 1.1.3 embarcado em smartphone para previsão do teor de sólidos solúveis totais em amostras de manga espada. As imagens (96 x 96 pixels e canais RGB) foram obtidas em uma caixa (30x20cm) dotada de iluminação artificial em led. As amostras foram separadas em dois conjuntos: calibração (n = 152) e validação (n = 40). O teor de SST variou de 16,5 a 23,3 °Brix. A calibração foi desenvolvida para os canais RGB permitindo combinações lineares das variáveis X (°Brix), que melhor modelam as variáveis dependentes Y (cores). Para o modelo obtido, o valor de R²cal (0,9058), com uma eficiência em função do RMSEC (0,41214). A manga é um fruto climatérico cuja evolução de cor da casca pode ser relacionada ao teor de açúcares presentes. Após a colheita o teor de açúcares permanece praticamente constante nos frutos, o que reforça a importância de um modelo que indique, por exemplo, o ponto certo de colheita dos frutos, garantindo assim que os mesmos atinjam os níveis desejados de açúcares bem como evitem problemas oriundos por estágios avançados de maturação que prejudicam os frutos durante o transporte e armazenamento.

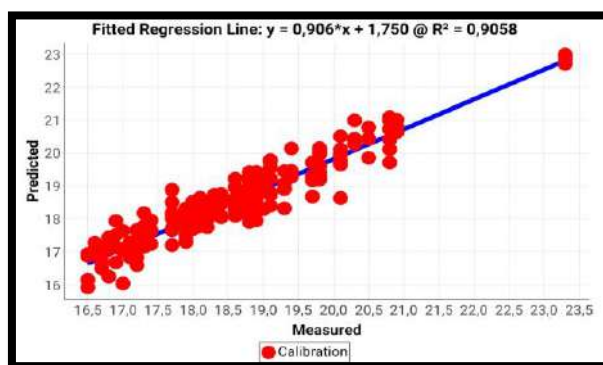


Figura 1. gráfico de previsão (eixo Y) versus dados de referência (eixo X) para as amostras de mangas espada (*Mangifera indica*) obtido pelo PhotoMetrix PRO versão 1.1.3.

DAMASCENO, D.; TOLEDO, T.G. GODINHO, M.S.; SILVA, C.P.; OLIVEIRA, S.B.; OLIVEIRA, A.E. *Química Nova*, 38 (2015) 836 – 841.
FERREIRA, M.M.C. *Quimiometria: conceitos, métodos e aplicações*. Editora da Unicamp, Campinas – SP, 2015.
HELPER, G.A.; MAGNUS, V.S.; BÖCK, F.C.; TEICHMANN, A.; FERRÃO, M.F.; COSTA, A.B.; *Journal of Brazilian Chemical Society*, 28 (2017) 328 – 335.

Agradecimentos/Acknowledgments

Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia do Rio Grande do Norte, Campus Nova Cruz.

Preparation of β -caryophyllene derivatives for evaluation of anxiolytic potential in the zebrafish model

Luely O. da Silva (PG), Jéssica de S. Viana (IC), Felipe A. da S. Bezerra (IC), Steven S. Paes (PG), Manoel L. Lopes Junior (PQ), Dalglis G. de Oliveira, Giselle Maria S. P. Guilhon (PQ), Waldo Lucas L. da Silva (PG), Anderson Manoel H. O. da Silva (PQ), Cláudio N. Alves (PQ), Lourivaldo S. Santos (PQ)*

luelyoliveira@hotmail.com; Isslouri@gmail.com

Programa de Pós-Graduação em Química, Instituto de Ciências Exatas e Naturais (ICEN – UFPA)

Key words: β -caryophyllene, anxiolytic potential, Zebrafish.

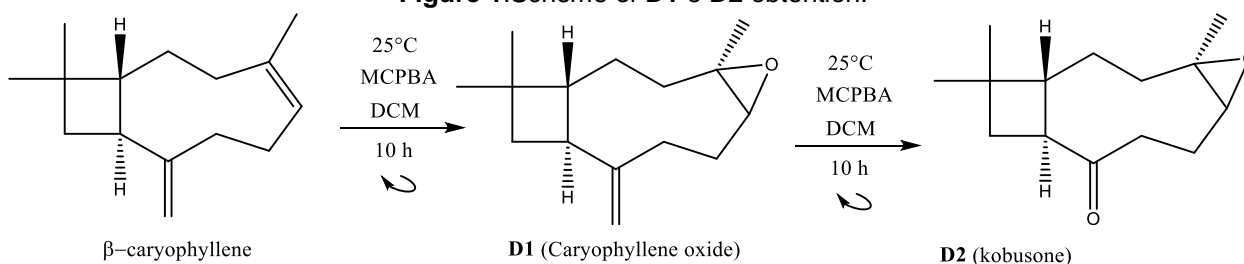
Highlights

Obtaining derivatives of β -caryophyllene. Behavioral evaluation of the effect of β -caryophyllene and derivatives in the zebrafish model light / dark test. Anxiogenic effect of the carbonylated derivative.

Abstract

When examining records of scientific investigations it is verified that β -caryophyllene has been the subject of chemical, biological, molecular modeling and biotransformation studies, composing several databases of molecules. It is characterized as a phytocannabinoid because it is a specific agonist of the cannabinoid receptor CB2 (KLAUKE et al., 2014), and is the ideal initiator to generate several other important macrocyclic terpenes (scaffolds). In this investigation we aimed to obtain β -caryophyllene derivatives to evaluate the anxiolytic potential in the light / dark behavioral zebrafish model. From the β -caryophyllene, commercially purchased (98.5%) from Sigma-Aldrich, the reaction was carried out to obtain the monoepoxidated derivative (D1, 81%) and the keto-oxirane formation reaction (D2, 40%), using the methodologies with adaptations of Tressel et al. (1983) and Bombarda et al. (1995) (Figure 1), where m-chloroperbenzoic acid (MCPBA) promotes oxidation of the double bonds. The obtained derivatives were identified by ¹H and ¹³C unis and ¹³D spectroscopic techniques and the data compared to the literature. The D1 (caryophyllene oxide) derivative, as well as β -caryophyllene in the behavioral test in the zebrafish model did not present anxiolytic effect at the tested concentrations of 500 and 250 mg / kg of the animal, whereas the derivative D2 (Kobusone) suggested an anxiogenic potential in both concentrations, requiring further studies for complete evaluation of the outcome.

Figure 1: Scheme of D1 e D2 obtention.



ACKNOWLEDGMENTS

CAPES, CNPQ, UFPA, PPGQ

References:

- BOMBARDA, I. et al. Synthesis of Oxygenated Compounds Derived from Caryophyllene. *Bulletin de la Société Chimique de France*, vol. 132, p. 836-842, 1995.
- KLAUKE, A. L. et al. The cannabinoid CB2 receptor-selective phytocannabinoid beta-caryophyllene exerts analgesic effects in mouse models of inflammatory and neuropathic pain. *European Neuropsychopharmacology*, vol. 24, p. 608-620, 2014.
- TRESSL, R. et al. Characterization of tricyclic sesquiterpenes in hop (*Humulus lupulus* var. Hersbrucker Spaet). *Journal of Agricultural and Food Chemistry*, vol. 31, n.4, p. 892-897, 1983.

Síntese e caracterização de eletrocatalisadores Pt/C-CeO₂ para eletro-oxidação de etanol em meio básico

Seiti I. Venturini (PG),¹ Joelma Perez (PQ)²

seitiventurini@gmail.com

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

Palavras Chave: Eletrocatalise, Oxidação de Etanol, Terras Raras, Meio Básico

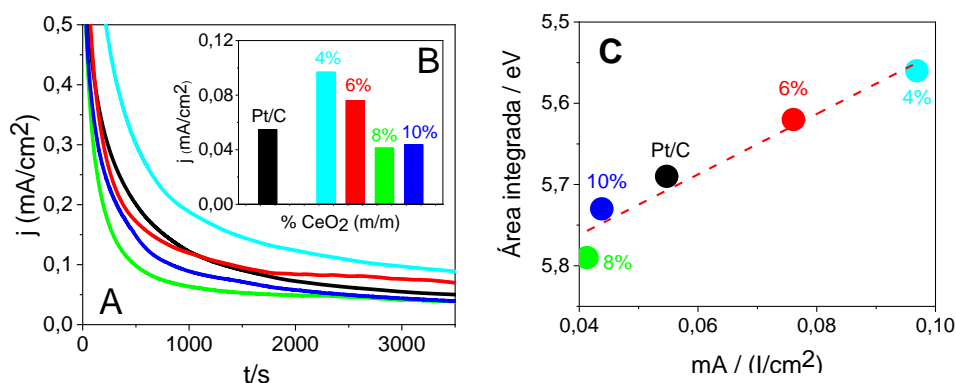
Synthesis and characterization of Pt/C-CeO₂ electrocatalysts for ethanol electro-oxidation in alkaline medium

- CeO₂ improve ethanol oxidation reaction (EOR)
- CeO₂ improve thermal stability of electrocatalyst
- Acetaldehyde and acetic acid formation of EOR were observed by *in situ* FT-infrared spectroscopy

Resumo/Abstract

As células a combustível são dispositivos eletroquímicos que convertem energia química em energia elétrica e são também uma alternativa para produção de energia limpa e renovável. Dentre os vários tipos de células, as PEMFC (*Proton Exchange Membran Fuel Cell*) se destacam devido à possibilidade de operar em baixas temperaturas e de utilizar combustíveis como hidrogênio e álcoois. Entretanto nos últimos anos a célula do tipo AFC (*alkaline fuel cell*) ganhou destaque devido a possibilidade de utilização de metais não nobres ou óxidos metálicos, devido a maior estabilidade destes materiais neste meio. Dentre esses óxidos metálicos o CeO₂ apresenta destaque pois apresenta incremento na atividade catalítica para reação de oxidação de etanol (ROE) (JACOB *et al*). Neste trabalho, catalisadores do tipo Pt/C-CeO₂ foram sintetizados sobre o suporte de carbono de alta área superficial (Vulcan XC-72R), variando-se a quantidade de CeO₂ entre 0 a 10% com objetivo de otimizar a ROE. Observou-se que os eletro-catalisadores contendo menor quantidade de óxidos apresentaram maior atividade frente a ROE em meio básico, isso pode ser observado na figura 1A e 1B. Um dos motivos deste aumento de atividade está relacionado ao efeito eletrônico, demonstrado na figura 1C.

Figura 1. A) Curvas amperométricas em potencial aplicado de 0,6 V vs. ERH durante 3600 segundos em NaOH de 0,1 mol L⁻¹ e Etanol 1,0 mol L⁻¹ sobre os diferentes catalisadores sintetizados. B) Relação entre a %CeO₂ e a densidade de corrente dos catalisadores Pt/C-CeO₂. C) Relação entre a densidade de corrente amostrada em 3000 segundos via cronoamperometria em função da intensidade da linha branca integrada na região de XANES. Ambos as medidas foram polarizadas a 600 mV vs. ERH.



Referências Bibliográficas:

JACOB, J. M.; CORRADINI, P. G.; ANTOLINI, E.; SANTOS, N. A.; PEREZ, J. Electro-oxidation of ethanol on ternary Pt-Sn-Ce/C catalysts. **Applied Catalysis B: Environmental**, v. 165, p. 176–184, 1 abr. 2015.

Polarized ketenedithioacetals as substrates to imidazolidine synthesis

Carolina M. Almeida (IC), Felipe P. Machado (IC), Edward K. S. Gonçalves (IC), Evelin R. Cardoso (IC), Diego P. Sangi (PQ).

carolinamoreira@id.uff.br; dpsangi@id.uff.br

Departamento de Química, Instituto de Ciências Exatas, Universidade Federal Fluminense

Keywords: Ketenedithioacetals; Vinylic substitution; Imidazolidine synthesis.

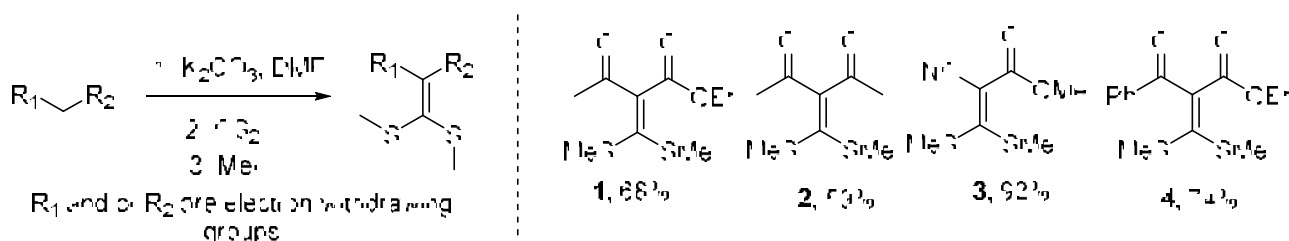
Highlights

Synthesis of polarized ketenedithioacetals and application on the imidazolidine compounds' preparation using double vinylic substitution assisted by microwave.

Resumo/Abstract

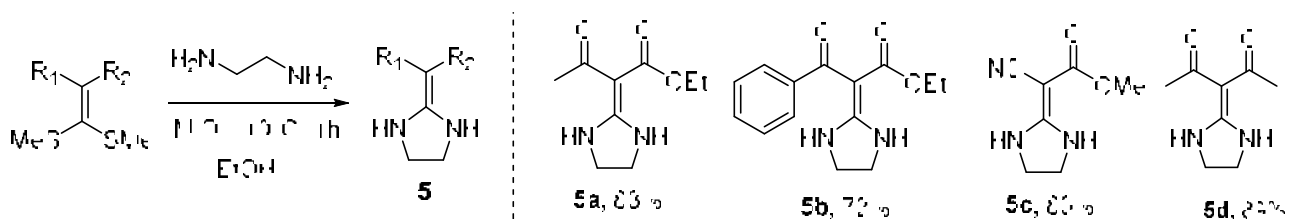
Nucleophilic substitution figure as one of the most important reactions used to synthesize organic compounds. The majority substrate where leaving group is tied to sp^2 carbon hybridized hardly react by SN_1 or SN_2 mechanisms, although vinylic compounds containing electron withdrawal group in β carbon of leaving group currently works as a substrate to nucleophilic substitution reactions that operates by addition and elimination mechanisms.

Polarized ketenedithioacetals are well known substrates of vinylic substitution reactions, and might also be converted to several heterocyclic through double replacement reaction. In the last years our search group have been investigating the use of microwave irradiation for several heterocyclic compounds' synthesis.¹ In this work we report the polarized ketenedithioacetals synthesis (1-4), important substrates to vinylic double replacement reactions and new heterocyclic compounds. In this synthesis, we explored acidness of active hydrogen's compounds, and carbon disulfide addition followed by one-pot methylation using methyl iodide.² The polarized ketenedithioacetals were obtained with good incomes like showed in scheme 1.



Scheme 1. Polarized ketenedithioacetals synthesis 1-4.

We also investigated the ability to ketenedithioacetals furnish series of imidazolidine compounds, employing the double vinylic substitution reaction. For this, we prepared a suspension of ketenedithioacetals (1-4) and ethylenediamine, and irradiated in microwave for 1 hour in 110°C. Imidazolidines were prepared with good yields according scheme 2.



Scheme 2. Microwave assisted synthesis of imidazolidine compounds.

Agradecimentos/Acknowledgments

Thanks to the Carlos Chagas Filho Foundation for Research Support of the State of Rio de Janeiro (FAPERJ) and to the Pro-Rector for Research, Graduate Studies and Innovation (proppi-UFF).

Synthesis and evaluation of antiparasitic and cytotoxic activities of thymol and carvacrol derivatives.

Adalberto M. Silva (FM), ^{1*} Eliakin S. Borba (IC), ¹ Ingrisson M. Santos (IC), ¹ Poliana A. R. Gazolla (PG), ¹ Róbson R. Teixeira (PQ), ² João H. G. Lago (PQ), ³ Thais da Costa-Silva (PQ).³

adalberto.silva@ifc.edu.br

¹Instituto Federal Catarinense, IFC – Campus Araquari; ²Departamento de Química, Universidade Federal de Viçosa, UFV – Campus Viçosa; ³Departamento de Química, Universidade Federal do ABC.

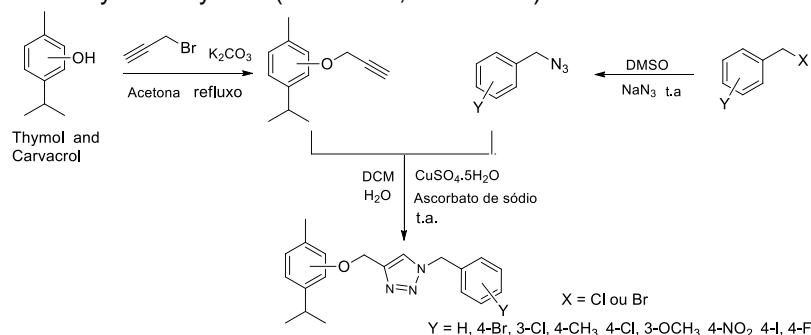
Palavras Chave: (Chemistry Click, trypanomicidal, thymol, carvacrol).

Highlights

It is described the synthesis of nine thymol derivatives and nine carvacrol derivatives bearing triazolic functionalities and the evaluation of their antiparasitic and cytotoxic activities against NCTC cells.

Abstract

Thymol (2-isopropyl-5-methylphenol) and Carvacrol (5-Isopropyl-2-methylphenol) are natural products found in several aromatic plants. It presents important biological activities including tripanomicidal [1,2]. It is herein described the synthesis and the evaluation of the tripanomicidal activity of thymol and carvacrol derivatives bearing 1,2,3-triazole functionalities. Thymol and carvacrol were purchased from sigma-aldrich. Alkylation reactions of thymol and carvacrol afforded terminal alkynes in good yields. The key reaction involved in the preparation of thymol and carvacrol derivatives with triazolic moieties corresponded to the Copper(I)-catalyzed Azide-Alkyne Cycloaddition (CuAAC), also known as click reaction, between alkynylated derivatives and different benzyl azides. Reactions were conducted in DCM/H₂O (1:1 v/v) at room temperature and afforded compounds with synthetically useful yields (62%-85%, Scheme 1).



Scheme 1 – Reactions involved in the preparation of thymol and carvacrol triazolic derivatives.

The evaluation of the eighteen synthesized compounds (nine derivatives of each starting material) on trypanomastigotes of *Trypanosoma cruzi* (NCTC cells) showed that thymol and carvacrol derivatives present trypanomicidal activities with varying degrees of effectiveness. One of the most active compounds 1-(4-bromobenzil)-4-((5-isopropil-2-metilfenoxi)metil)-1*H*-1,2,3-triazol (**CC-02**) presented IC₅₀ = 20.4±9.5 μmol L⁻¹. The cytotoxicity of **CC-02** against macrophage cells presented CC₅₀ greater than 200 μmol L⁻¹ and the selective index was greater than 9.8. It is believed that Thymol and carvacrol triazolic derivatives may represent a scaffold to be explored toward the development of new agents to treat against *Trypanosoma cruzi*.

References: [1] Juan, R. A, Olga, P. A, Mirian, P. P. Chemical Composition and Anti-*Trypanosoma cruzi* Effect of *Thymus vulgaris* L. (Thyme) Essential Oil and Its Main Component, Thymol, in Mice. *Am J Pharm.* 2 (4) (2015) 21-27; [2] Sobral-Souza, C. E, et al. Cytotoxic and antiparasitic in vitro activities of α-pinene and carvacrol. *Acta Toxicol. Argent.* 22 (2) (2014) 76-80

Acknowledgments

The authors are grateful to CNPq for financial support.

Molecular modeling studies of neolignans obtained from *Virola surinamensis* (Rol.) Warb. against cruzain.

Steven S. Paes (PG),^{1*} Jéssica de S. Viana (IC),² Ana Paula Costa (IC),³ Luely O. da Silva (PG),⁴ Oscar A. S. Romero (PQ),⁵ Dalglish G. de Oliveira (PG),⁶ Manoel L. L. Júnior (PQ),⁷ Evonnildo C. Gonçalves (PQ),⁸ Lourivaldo S. Santos (PQ),⁹ Fábio A. de Molfetta (PQ).¹⁰

steven.ufpa@gmail.com; lsslouri@gmail.com

Programa de Pós-Graduação em Química, Instituto de Ciências Exatas e Naturais (ICEN – UFPA).

⁷Programa de Pós-Graduação em Genética e Biologia Molecular

Key Words: Molecular modeling, cruzain, neolignans.

Highlights

Neolignans of *Virola surinamensis* (Rol.) Warb. Docking and Molecular Dynamics to evaluate the inhibitory potential of the cruzain enzyme.

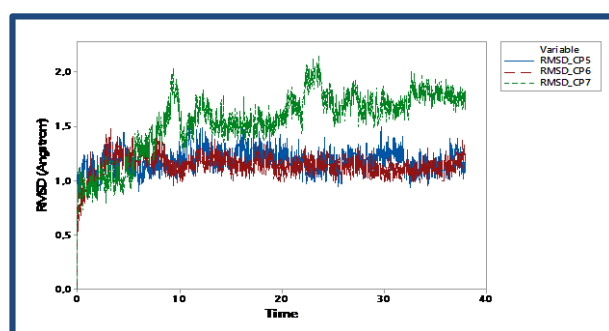
Abstract

Chagas disease is parasitic pathology that affects about 6 to 7 million people worldwide, most in Latin American (WHO, 2009). The cruzain enzyme is involved in main processes of the life cycle of the parasite *Trypanosoma cruzi* (*T. cruzi*), causer of chagas disease. The use of medicinal plants can be promising in the discovery of new substances with trypanocidal potential. The species *Virola surinamensis* is easily found in Central and South America, including Brazil, demonstrating a biological potential of the neolignans found in the species investigated. The neolignans are an important class of widely distributed phenylpropane derivatives in the plant kingdom (ŞÖHRETOĞLU, 2018), the ones modeled in this study have skeletons 8.O.4 'and tetrahydrofuran. In this work, Molecular Modeling (docking and molecular dynamics) studies were carried out on seven compounds isolated from *Virola surinamensis* (Rol.) Warb. in order to find substances with potential to inhibit the enzyme cruzain. The selected program that presented the lowest RMSD (Root Mean Square Deviation) for molecular docking was Fitted 2.6, and interactions with important enzyme residues were observed with three compounds (cp5, cp6 and cp7) shown in Table 1. Subsequently, the molecular dynamics simulations with the three compounds were performed in the Amber 16 program. In the dynamics, the free energy values of the interaction between the ligands and the enzyme were calculated using the MM / GBSA and MM / PBSA methods. The compound that presented a lower free energy value was cp5 (MM / PBSA = -29.737 ± 2.75 and MM / GBSA = -37.078 ± 3.84). In addition, by means of Graph 1 it can be seen that the RMSD values of the complexes were below 2 Å. Thus, by the energy values and stability found the substance cp5 will be used *in vitro* tests with the enzyme cruzain and the *T. cruzi* parasite.

Table 1: Ligand interactions with the active site of the cruzain enzyme

| | Hydrogen Interaction | Hydrophobic | Å of hydrogen interactions |
|-----|----------------------|------------------------------|----------------------------|
| cp1 | Gly66 | Leu160, Gly65, Ser64, Asp161 | 1,86 Å |
| cp2 | Glu208 | Gly65, Ser64, Leu160, Leu67 | 2,29 Å |
| cp3 | Sem interações | Sem interações | Sem interações |
| cp4 | Cys25 | His162, cys25 | 2,32 Å |
| cp5 | Cys25 | His162, Gly65, Cys25 | 2,58 Å |
| cp6 | Cys25, Gly23 | Sem interações | 2,89 Å, 3,84 Å |
| cp7 | Leu160, 2xGly66 | His162, Cys25 | 2,32 Å |

Graph 1: RMSD of the cp5, cp6 e cp7 compounds.



References:

ŞÖHRETOĞLU, D., SARI, S., BARUT, B., & ÖZEL, A. (2018). Tyrosinase inhibition by a rare neolignan: inhibition kinetics and mechanistic insights through *in vitro* and *in silico* studies. *Computational Biology*.
WHO - World Health Organization. Distribution of cases of *Trypanosoma cruzi* infection. 2009.

Acknowledgments



Forensic electroanalysis: Direct use of the graphite sheet as a swab and working electrode for determination of explosive residues

Sílvia V.F. de Castro (PG),¹ Rafael M. Cardoso (PG),¹ Mário H.P. Santana (PQ),² Eduardo M. Richter (PQ),¹ Rodrigo A.A. Munoz (PQ)¹

silviavaz.quimica@gmail.com

¹Instituto de Química, UFU; ²Unidade Técnico-Científica, Superintendência Regional da Polícia Federal em MG.

Keywords: Graphite sheet, Explosives, Residues, Swab.

Highlights

Development of a method for electrochemical analysis of TNT residues using the graphite sheet. Application of the material as a platform of residues collection from the simple direct contact. Sampling on granite, metal, bare and gloved hands and cash banknotes. Quantification of the collected material using Faraday's Law of electrolysis. Stability of the explosive on sensor surface during storage.

Abstract

Analysis and identification of residues in scenes crimes, such as explosives and gunshot residues, are very important stages in the investigation process. From this stage, it is possible to trace new directions for the investigation and/or assist in the reconstruction of criminal events¹. Differently of the conventional methods used for the collecting of residues (cotton swabs), this work demonstrates the use of the graphite sheet (GS) as TNT collection device and its direct use as a working electrode, with the determination of the analyte being performed by square wave voltammetry. The experiments were initially conducted by spreading the explosive on different surfaces. Then, the collect was performed by swabbing of the GS on each surface.

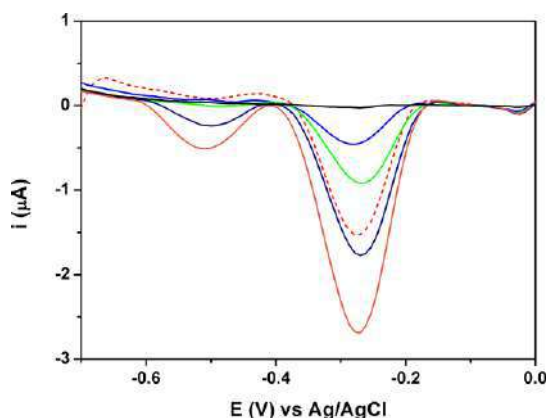


Figure 1. SWV responses for the first scan (red dotted line) after collecting on granite surface. Blue, green and orange lines correspond to additions of standard solutions of TNT to identify the explosive.

The GS was introduced in the electrochemical cell, in which 5 mL of a 0.1 mol L⁻¹ HCl solution was added, as a supporting electrolyte. The evaluated surfaces were granite and metal, considering the possibility of this type of surface being located near of the explosion places; bare and gloved hand for the possibility of assisting in the identification of suspects who have handled the explosive; and it also was evaluated the ability of TNT to be transferred from one surface to another with a simple contact for a short time. For this, a cash banknote handled by bare and gloved hand, both contaminated with TNT, was analysed. Figure 1 shows the voltammograms obtained for the analysis after collecting on granite surface. In order to prove the identity of the explosive, simple additions of a stock solution of the analyte were performed. Similarly, the other surfaces were evaluated, and the results showed reduction peaks with different intensities and the peak area generated during the electrochemical reduction of TNT was used to quantify the material detected

on the sensor surface using Faraday's Law. The calculated masses were 0.12, 0.026, 0.16, 0.007, 0.13 and 0.0096 ng for granite, metal, gloved and bare hand and cash banknotes handled gloved and bare hand, respectively. In addition, the ability of the new material to retain TNT on its surface after a storage period (24 h) was evaluated and the results were satisfactory, evidencing the potential of this sensor for the using in analysis of forensic interest.

¹W. Pawlowski, L. Matyjasek, K. Cieslak, M. Karpinska, Contamination with explosives in analytical laboratory procedure, Forensic Sci. Int. 281 (2017) 13–17.

Acknowledgments

FAPEMIG, CNPq and CAPES (001 and Pró-Forenses).

Gold nanoparticles stabilized in kappa-carrageenan applied in the construction of electrochemical immunosensor for the PSA detection

Gabriele Smanhotto Malvessi (IC),* Thaynara Dannehl Hoppe (IC), Daniela Brondani (PQ)

gabi_ism@hotmail.com

Departamento de Ciências Exatas e Educação, UFSC – Campus Blumenau.

Keywords: Immunosensor, Gold nanoparticles, Tumor biomarker, Prostate cancer.

Highlights

The gold nanoparticles were synthesized in aqueous solution of kappa-carrageenan. The electrochemical immunosensor based on redox probe (methyl red dye) and the gold nanoparticles was applied for PSA detection.

Abstract

Cancer is the second-leading cause of death from disease in the world, according to the World Health Organization. Prostate cancer (PC) is the type of cancer that has the highest incidence among men.¹ The electrochemical immunosensors have shown to be a promising alternative for PC diagnosis applying a prostate specific antigen (PSA) biomarker determination. This quick and less invasive way of detection may contribute to the early diagnosis of the disease. For this reason, this work aimed to develop a label-free electrochemical immunosensor for the PSA detection in blood serum. For this, gold nanoparticles (AuNP) were synthesized in aqueous solution of kappa-carrageenan (KC) (0.15%, w/v), using sodium borohydride as the reducing agent. The AuNP-KC were characterized by transmission electron microscopy (TEM) (Figure 1), showing a mean diameter of 13 nm. A graphite electrode was handcrafted using a graphite rod removed from discharged AAA batteries. In order to obtain the immunosensor, the graphite electrode was modified with methyl red dye as a redox probe, and an AuNP-KC film for antibody immobilization (Ab-PSA). Different architectures for the construction of the immunosensor were investigated, as well as the optimization and characterization of the studied platforms. Several experimental parameters were optimized, such as the antibodies immobilization time (30 min), the incubation time of the sample containing PSA (20 min), the square wave voltammetry parameters (frequency: 80 Hz, pulse amplitude: 70 mV, increment: 10 mV). The suppression of the base peak current (redox probe) increased proportionally to the concentration of PSA, allowing the construction of a calibration curve with linear range of 0.015 to 50.0 ng mL⁻¹. Therefore, this linear range comprises the cut-off value of PSA in serum (4 ng mL⁻¹),² that indicates a possibility of prostate cancer. Further studies of potential interferences, reproducibility and stability will be carried out, as well as the application in the quantification of PSA in fortified serum samples.

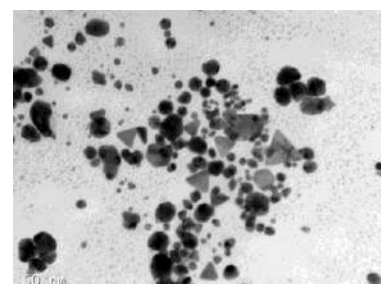


Figure 1. TEM image of an AuNP-KC sample.

¹ BRAY, F.; *et al.* **CA Cancer J. Clin.**, 68, 394–424, 2018.

² ERTÜRK, G.; *et al.* **Sens. Actuators B**, 224, 823–832, 2016.

Acknowledgments

CNPq, UFSC-Blumenau, Laboratory of Electroanalytical and Sensors (LAES).

Diastereoselective Total Synthesis of Raputindole A: An Iridium-catalyzed approach.

Juliana L.L.F. Regueira (PG),¹ Ronaldo A. Pilli (PQ)², Luiz F. Silva Jr (PQ),^{1,3}

julianaliraregueira@usp.br; rapilli@unicamp.br

¹Instituto de Química, Universidade de São Paulo, CEP 05513-970, São Paulo-SP, Brazil; ²University of Campinas, Institute of Chemistry, 13083-970 Campinas, SP, Brazil; ³In memoriam.

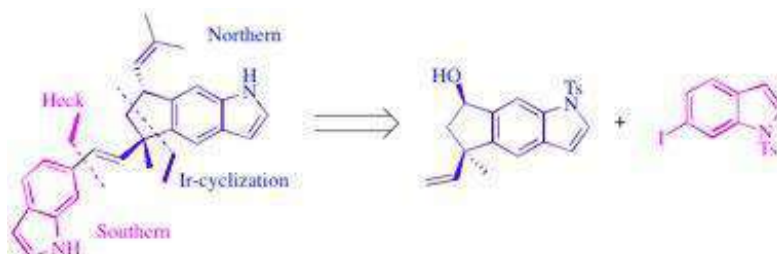
Keywords: Raputindole A, total synthesis, iridium-catalyzed approach.

Highlights

The present work reports our studies aiming the diastereoselective synthesis of raputindole A, a bisindole alkaloid isolated from *Raputia simulans Kallunki* (Rutaceae), collected in the peruvian Amazon region. The key steps envisioned in our approach are: 1) an Ir-catalyzed pentannulation to build the northern fragment and 2) a Heck reaction in order to join the northern and southern fragments.

Abstract

The Raputindoles are bis-indole alkaloids unsubstituted at the nitrogenated ring bearing a cyclopentyl unit linearly fused to one of the indole moieties (northern fragment), thus characterizing a new class of indole alkaloids. They are natural products isolated in 2010 from the Amazonian plant *Raputia simulans kallunki* (Rutaceae) which displayed moderate kinase inhibition (CDK2, GSQ-3beta e DYR-K1) with IC50 > 10 micromolar.¹ The first racemic total synthesis was concluded by Lindel's group in 2017, in parallel with our attempts to develop its asymmetric total synthesis, involving an Au(I)-catalyzed cyclization which led to a 1:1 mixture of racemic raputindole A and its 7-*epi* isomer.^{2,3} Our diastereoselective approach to raputindole A comprises an Ir-cyclization⁴ to access the cyclopentane[*f*]indole moiety (northern fragment) unit and a Heck coupling between the southern part and northern fragments (scheme 1).



Scheme 1.

We started from commercially available 2-bromo toluic acid to prepare the corresponding 5,6-disubstituted indole via a Batcho-Leimgruber protocol. The key boronic acid required for the iridium-catalyzed cyclization was prepared via Myaura borylation of 5-bromo-1-tosyl-1*H*-indole-6-carbaldehyde and afforded linear tricyclic northern fragment as a single diastereoisomer in 13% yield after the iridium-catalyzed cyclization. The southern fragment, prepared in 37% yield from commercially available 4-methyl-3-nitroaniline, was coupled to the northern fragment via a Heck coupling to afford a bisindole intermediate, in 33% yield, exhibiting the key pentacyclic core of Rapudintole A. We are now working on the final steps towards Raputindole A (insertion of the isobutenyl group and tosyl deprotection) as well on the optimization of the Ir-catalyzed pentannulation.

References: [1] Benedetti, E. et al. *Org. Lett.* 2010, 12, 1908.; [2] Kock, M.; Lindel, T., *Org. Lett.* 2018, 20, 17, 5444-5447; [3] Kock, M.; Jones, P. G.; Lindel, T., *Org. Lett.* 2017, 19, 23, 6296-6299; [4] Nishimura, T.; Yasuhara, Y.; Hayashi, T., *J. Am. Chem. Soc.* 2007, 129, 7506-7507.

Acknowledgments. The authors would like to thank CNPq (RAP, JLLFR) and FAPESP (RAP) for financial support.

Área: QPN

Nº de Inscrição: 00557

Antimicrobial activity of bergenin and its pentaacetyl derivative

Jéssica de S. Viana (IC), Felipe A. da S. Bezerra (IC), Luely O. da Silva (PG), Steven S. Paes (PG), Dalglish G. de Oliveira (PG), Railda Neyva M. Araújo (PQ), Giselle Maria S. P. Guilhon (PQ), Lourivaldo S. Santos (PQ)*

jessicaviana698@gmail.com; lsslouri@gmail.com

Graduate Program in Chemistry, ICEN, Federal University of Pará, CEP 66075, Belém-PA, Brazil

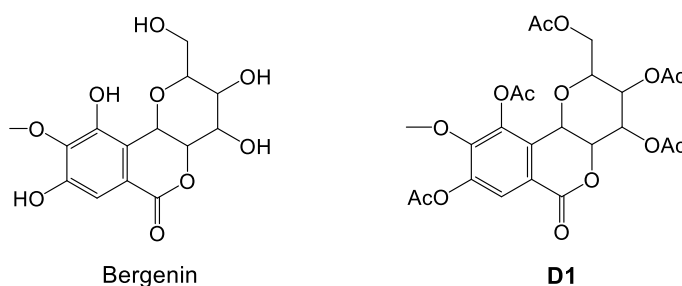
Keywords: Acetylbergenin, Bergenin, *Endopleura uchi*, Antimicrobial Activity.

Highlights

Isocoumarin bergenin was isolated from the methanolic extract of stem bark of *Endopleura uchi*. Bergenin pentaacetyl derivative was obtained. The substances were submitted to antimicrobial tests.

Abstract

Endopleura uchi (Huber) Cuatrec is a tree native from Amazon and stem bark has been used in traditional medicine as anti-inflammatory, antitumor and uterine infections (Corrêa, 1984). Isocoumarin bergenin is the major component of the bark and is responsible for several biological activities such as antiasthma, antitussive, anti-inflammatory, antifungal (Prithiviraj et al., 1997), anti-HIV (Piacente et al., 1996) hepatotoxic (Kim et al., 2000), among others. This work aimed to isolate bergenin and obtain its pentaacetyl derivative to evaluate its antimicrobial activity. Bergenin was obtained from the methanolic extract of stem bark of *E. uchi*. The pentaacetyl derivative **D1** was obtained by reaction with acetic anhydride and pyridine according to the methodology of Ramaiah et al. (1979) in 98% yield. The substances were identified by uni and bidimensional Nuclear Magnetic Resonance spectroscopy, and comparison with literature data (Magalhães et al., 2007; Ramaiah et al., 1979). The antimicrobial activities of bergenin and **D1** derivative were evaluated by the BHI broth microdilution method based on the CLSI methodology (2003), with some adaptations using Ciprofloxacin Hydrochloride as positive control. Antimicrobial tests were performed using certified strains of the following bacteria: *Escherichia coli* (ATCC 8739), *Salmonella* spp. (ATCC 4029), *Staphylococcus aureus* (ATCC 25923) and *Klebsiella pneumoniae* (ATCC 70063). The bergenin was inactive against the microorganisms tested up to the concentration of 500 µg/mL. The **D1** derivative was active only against the *Staphylococcus aureus* bacterium, presenting bacteriostatic activity with a minimum inhibitory concentration (MIC) of 250 µg/mL. Although the results were not as relevant, the derivation of bergenin indicated that might lead to derivatives that are more active. New derivatives are being planned from bergenin.



References:

- CLSI – Clinical and Laboratory Standards Institute, CLSI Approved Standard M7-A4, v. 23, n. 2, 2003.
 Corrêa, M.P. 1984. Rio de Janeiro, Imprensa Nacional, vol. 6, p. 326.
 Kim, H. S. et al., Journal Ethnopharmacology, v. 69, p. 79-83, 2000.
 Magalhães L. A. et al., Acta Amazon; 37:447–50., 2007.
 Piacente, S. et al., Journal of Natural Product, v. 59, p. 65-9, 1996.
 Prithiviraj, B. et al., Plant Pathology, v. 46, p. 224-228, 1997.
 Ramaiah et al. *Journal of the Chemical Society, Perkin Transactions 1*, 2313, 1979.

Acknowledgments

CNPq, CAPES, LabSiC and UFPA.

42ª Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química: Eixos Mobilizadores em Química

Strategic approach for the highly regioselective synthesis of trifluoromethylated 4-(iminomethyl/formyl)isoxazoles by cyclocondensation

Fernanda A. Rosa (PQ),¹ Karlos E. Pianoski (PG).^{1*}

farosa@uem.br; karlosdrd@gmail.com

¹Departamento de Química, Universidade Estadual de Maringá (UEM), 87030-900.

Palavras Chave: regioselective synthesis, trifluoromethyl group, β -enamino diketones, isoxazoles.

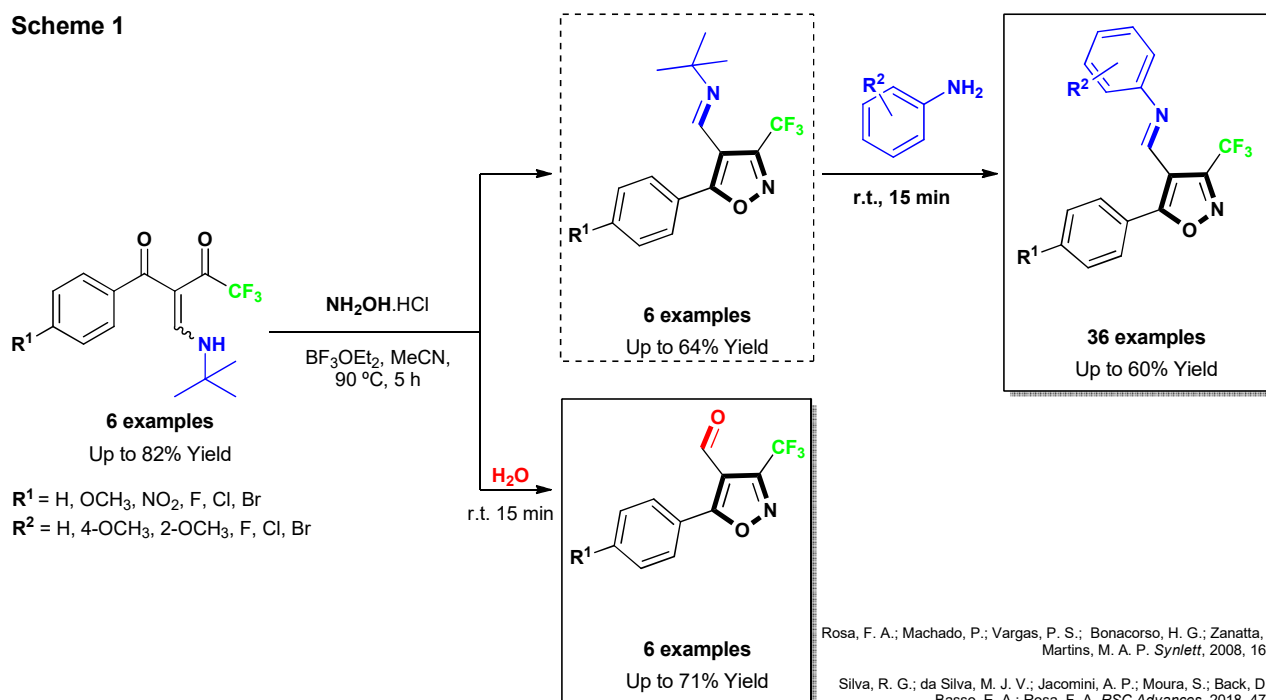
Highlights

-Isoxazole containing the trifluoromethyl group displays a key role due to be a potential medicinal product.
-Highly regioselective synthesis for the preparation of trifluoromethylated 4-(iminomethyl/formyl) isoxazoles.

Abstract

In general, the construction of isoxazole core by Claisen synthesis is a limited method due to formation of regioisomers with poor regioselectivity. Then, in this work a new approach is described for the highly regioselective synthesis of 3-trifluoromethyl-4-(iminomethyl/formyl)-5-aryl-isoxazoles by cyclocondensation reaction of trifluoromethylated β -enamino diketones with hydroxylamine assisted by Lewis acid $\text{BF}_3 \cdot \text{OEt}_2$ (Scheme 1).

Scheme 1



This method allowed the synthesis of 48 novel polyfunctionalized isoxazoles under mild reaction condition, in good yields and with high regioselective. The presence of trifluoromethyl group ($-\text{CF}_3$) in the isoxazole core allowed to stabilize the iminomethyl group in the heterocycle. In addition, the pharmacological properties of compounds that contain this heterocycle core may be improved by the unique properties of $-\text{CF}_3$ group.

Acknowledgments

We gratefully acknowledge for the financial support from CNPq-Brazil, CAPES and Fundação Araucária.

Área: ANA

Nº de Inscrição: 00559

Development of a low-cost DNA thermocycler (PCR)

Lucas Blanes (PQ),^{1,2} Victor Siqueira Cunha (IC),² Viviane Klassen de Oliveira (IC),² Fabiana Alexandrino (PQ),² Luis Gustavo Morello (PQ),^{1,2} and Fabricio Klerynton Marchini (PQ).¹

Lucas.blanes@fiocruz.br

¹Carlos Chagas Institute, Oswaldo Cruz Foundation (FIOCRUZ), Curitiba, PR, Brazil

² Molecular Biology Institute of Paraná, Curitiba, PR, Brazil

Keywords: PCR, microcontroller, PID, temperature control, arduino, DNA

Highlights

This PCR device uses a microcontroller, a diode and a PID algorithm to control the temperature

The instrument heat up and cool down at a rate of $\sim 1.6^{\circ}\text{C/s}$

A DNA fragment was amplified successfully

Abstract

Thermocyclers (also named PCR instruments) are analytical devices used to precisely heat and cool down molecular biochemical reactions to promote DNA amplification. In this presentation we will show a simple way to create a low-cost PCR instrument using a small number of electronic and mechanical components. We used two double side Printed Circuit Boards (PCB) built-in a sandwich-like shape to hold a 200 μL vial containing the reaction. A computer fan of 4x4 cm / 12 V was used to cool down the liquid. One of the the main innovations here described is the construction of built-in resistors using the PCB copper. The interface was designed using the software Elipse, and the firmware was witten in C++. The instrument operates using a 12V, 3A power supply. Three MOSFETs IRF3415 were used to switch the botton and top heaters (2,2 and 0.8 Ω). The Instrument firmware has a Proportional-Integral-Derivative (PID) equation necessary to controll precisely the temperature. The diode 1N4148 was used as a thermal sensor. The prototype was tested through the amplification of a DNA fragment during 40 cycles: 95 $^{\circ}\text{C}$ for 15 seconds and 60 $^{\circ}\text{C}$ for 1 min. This prototyper heat up and cool down at a rate of 1.6 $^{\circ}\text{C/s}$. The instrument efficacy was evaluated through the comparison of our prototype with a commercial qPCR instrument under the same conditions. After the amplification, the fluorescence intensity in both vials was recorded and comparred using the qPCR comercial instrument. We also run a conventional gel electrophoresis and recorded the images with a câmera after illumination with a UV lamp. This presentation also will discuss the equipament calibration made with an external NTC thermal sensor electronic device.

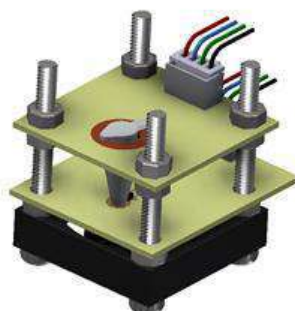


Figure 1: PCR holder diagram

Acknowledgments

We would like to thanks the Molecular Biology Institute of Paraná (IBMP) for the support

Determination of the stability of toasted coffees using Headspace Solid Phase Microextraction and Gas Chromatography coupled to Mass Spectrometry

Cinthia C. Garcia (PG),^{1*} Michelle C. da Silva (PG),¹ Daiane F. de Oliveira (IC),² Nadine M. Assis (IC),² Ademário I. Silva Júnior (PQ),² Annibal D.P. Netto (PQ).^{3*}

annibalnetto@id.uff.br; cinthia.c.garcia@gmail.com

¹Programa de Pós-Graduação em Química, UFF; ²Departamento de Química, IFRJ; ³ Departamento de Química Analítica, UFF

Keywords: *specialty coffees, volatile organic compounds, stability, HS-SPME-GC-MS*

Highlights

Determination of roasted coffee samples stability by gas chromatography coupled to mass spectrometry.

- Determination of the primary validity of special coffees samples from different processes.
- The use of HS-SPME-GC-MS associated with analysis of primary components proved to be efficient for the differentiation of coffees from different processes and for the evaluation of primary validity.
- The fermented coffee showed the lowest stability among the studied coffees.

Resumo/Abstract

Coffee is appreciated worldwide for its distinctive taste and aroma and considered one of the most valuable exportation products (commodities) around the world¹. Arabica coffee – studied here – can produce high quality specialty coffees. The final quality of the coffee and its economic value are associated with the complexity of the aroma and taste developed². Coffee is usually evaluated through the cupping test (sensory analysis), in which the quality of the coffee is determined by the evaluation of its sensorial attributes³. Among the various procedures from planting to cupping, it is worth mentioning the roasting process – the heating process in which the volatile organic compounds responsible for the coffee flavor (taste and aroma) are developed². Most of these compounds are highly volatile, which leads to rapid degradation and evaporation, resulting in losses of freshness and coffee quality⁴. The aim of this work was to evaluate the stability (primary validity) of samples of special coffee of different processing (peeled cherry, natural / fermented, and natural) by means of the analysis of the volatile profiles, using Headspace Solid Phase Microextraction and Gas Chromatography coupled to Mass Spectrometry (HS-SPME-GC-MS) and two columns of different polarity. The determinations aimed estimating the stability of the coffees. i.e., for how long the coffees studied maintained their chemical properties and composition unchanged. The chromatographic data – peak areas – were compared using Principal Component Analysis (PCA), which allowed determining the primary stability of the studied coffees within the selected period. The evaluation of the primary stability indicated that: (i) the peeled cherry coffee (coffee 1) is chemically stable for 60 days; (ii) The coffee 2 (natural / fermented) has the lowest stability, presenting a significant chemical change after the fifth day of analysis and (iii) the natural coffee (coffee 3) presents a chemical stability of 30 days. Our results showed that the comparison of different coffees using PCA as a comparison tool is also efficient to classify coffees obtained through different processes.

1. BAUMANN, T. W. et al. Espresso Coffee: The Science of Quality. Elsevier Academic, 2005. p. 21-86.
2. YERETZIAN, C. et al, European Food Research and Technology, 214, 2002, p.92.
3. SCA. Specialty Coffee Association. SCA Protocols - Cupping Protocols.
4. GLÖSS, A. N. et al. CHIMIA International Journal for Chemistry, 68, 2014, p.179–182.

Agradecimentos/Acknowledgments

CNPq; CAPES; APRUPEM; Café ao Léu

Área: QPN

Nº de Inscrição: 00561

Toxicity of the *Pachira aquatica* AUBL. leaves on *Artemia salina*

Felipe A. da S. Bezerra (IC),¹ Dalglis G. de Oliveira (PG),¹ Jéssica de S. Viana (IC),¹ Davi do S.B. Brasil (PQ),¹ Marivaldo J.C. Corrêa (PQ),¹ José Otávio C. Silva Junior (PQ),¹ Steven S. Paes (PG),¹ Luely da S. Oliveira (PG),¹ Lourivaldo S. Santos (PQ).^{1*}

felipeufpa123@gmail.com; lsslouri@gmail.com

¹Programa de Pós-Graduação em Química, UFPA; ²Programa de Pós-Graduação em Ciências Farmacêuticas, UFPA.

Key Words: *Pachira aquatica*, *Artemia salina*, Toxicity

Highlights

Toxicity of the leaves of *Pachira aquatica* AUBL. on *Artemia salina*. The chemical composition of Fraction 1 from the *P. aquatica* leaves was identified by GC / MS. Fraction 1 was submitted to the toxicity test using *Artemia salina*.

Abstract

The species *Pachira aquatica* (*P. aquatica*) is popularly known as mamorana, munguba or fake cocoa. The fruits of *P. aquatica* present high oil content (44.1%), with palmitic acid being their main component (POLIZELLI et al., 2008). BRUM et al. (2009), in a study carried out with the oil of the seeds of *P. aquatica*, demonstrated promising results for the oil, with possible application in biodiesel. To our knowledge, no studies were carried out with the leaves of this species. The leaves (2 kg) were collected on the island of Cotijuba, located in the metropolitan region of Belém-PA, and subjected to drying, crushing, methanol extraction for 48 hours (2x), concentrated under reduced pressure in a rotary evaporator and then methanolic crude (21.3 g) was obtained. The crude extract (20 g) was fractionated in a classical column with hexane / AcOEt 20% (fraction 1, 0.7 g), 50% hexane / EtOAc (fraction 2.7 g), 100% AcOEt (fraction 3, 24 g), 50% AcOEt / MeOH (fraction 4, 1.9 g) and 100% MeOH (fraction 5, 6.9 g). Fraction 1 showed to be rich in fatty acids for that reason it was esterified by the method adapted from HARTMAN & LAGO (1973), and analyzed by GC / MS (SHIMADZU QP-2010). Fatty acids have been identified in the form of their methyl esters: methyl dodecanoate (1.27%), methyl tetradecanoate (0.6%), methyl hexadecanoate (9.14%), 9Z, 12Z-octadecadienoate (2.19%), methyl 9E-octadecenoate, methyl stearate (38.24%) and methyl 18-methyl-nonadecanoate (7.18%). Fraction 1 was submitted to the toxicity test against *Artemia salina* larvae and the result was evaluated according to the statistical method PROBIT (FINNEY, 1974). Thus, fraction 1 presented LC50 = 380.18 µg / mL on *A. salina*, demonstrating satisfactory results as a indicative of cytotoxic activity (Meyer, 1982).

Table 1: Toxicity of fraction 1 from *Pachira aquatica* to larvae of *Artemia salina*

| Concentration (µg/mL) | %Death | Log10 (concentration) | Probit |
|-----------------------|--------|-----------------------|--------|
| 1500 | 73,33 | 3,17 | 5,61 |
| 1000 | 73,33 | 3 | 5,61 |
| 500 | 53,33 | 2,69 | 5,08 |
| 250 | 43,33 | 2,39 | 4,82 |

References:

- BRUM, M.C. et al. 32ª Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química - SBQ, Fortaleza, 2009.
 FINNEY, D. J. Probit Analysis: A statistical Treatment of the Sigmoid Response Curve. Cambridge: Cambridge University Press, 1974.
 HARTMAN, L.; LAGO, R.C.A. Rapid preparation of fatty acid methyl from lipids. *Laboratory Practice*, v.22, p.474-476, 1973.
 MEYER et al. Brine shrimp: a convenient general bioassay for active plant constituents. *J. Med Plant Res* 1982; 45:31-4.
 POLIZELLI, P.P. et al. 2008. *Applied Biochemistry and Biotechnology*, v. 150, n. 3, p. 233-242, 2008.
 SOUZA, D. K. et al. *Revista Saúde e Pesquisa*, Porto Velho, v. 5, n. 2, p. 352-358, maio/ago. 2012.

Acknowledgments

The authors thanks CNPq, CAPES, the Laboratório de Farmacologia e Nanotecnologia and the Laboratório de Síntese e Cromatografia (LABSIC) of UFPA.

Área: MAT

Nº de Inscrição: 00562

Production and characterization of activated carbons from yeast residues from industrial fermentation processes

Mikaela S. dos Santos (IC),^{1*} Helen R. Modesto (IC),¹ Renan S. Nunes (PG),² Jenny S. Komatsu (PG),² Wagner A. Carvalho (PQ),² Geórgia Labuto (PQ).¹

myykaela.s@gmail.com, geolabuto@gmail.com

¹Departamento de Química, UNIFESP; ²Ciência e Tecnologia Química, Núcleo de Tecnologias Sustentáveis, UFABC

Keywords: New Materials, Different Drying Process, High Surface Area, PZC, Total Acid Groups

Highlights

Different drying methods can affect the characteristics of activated carbon.
Yeast residues provides activate carbons with high surface area, highly microporous.

Abstract

Since yeast residue biomass from fermentation processes can still be used for the extraction of products of commercial value such as β -glucan, leaving at last tons of a residue rich in carbon (46%), whose only destination is the disposal, the search for new uses for such material in order to insert the same commercial value that can contribute to the bioeconomy becomes necessary. Obtaining activated carbon from such material is an attractive alternative as it is a product with aggregated commercial value and diverse applications such as gas adsorption, water and wastewater treatment, purification of food and pharmaceutical products and catalytic processes. This work presents the characterization of activated carbon obtained from yeast residue (YR) using a patented chemical activation process (BR10201700300). Some variations were made on that process, in the drying process of the material after addition of the activating agent. The precursor containing the chemical activating agent was dried in an oven (YRC-O) or lyophilized (YRC-L), which led to the production of an activated carbon with different characteristics, as denoted by pore surface area, point zero charge (PZC), total acid groups (TAG) (Table 1), indicating that different drying process influences the activation process, probably due to variations in the interaction of the activating agent with the surface of the precursor of the carbon and state of aggregation of the material to be activated. The obtained materials presented high BET area, with high micropores volume with average pore diameter of 1,96nm and 1,26nm for YRC-O and YRC-L, respectively. Activated carbons obtained presented ideal characteristics to be employed as adsorbent for metals and organic compounds with small sizes and in catalytic process.

| Activated carbon | BET Area (m ² .g ⁻¹) | Vmicro (%) | Vmeso (%) | pHpzc | TAG (mmol.g ⁻¹) |
|------------------|---|------------|-----------|-------|-----------------------------|
| YRC-O | 1595 | 72 | 28 | 4.9 | 0.8 ± 0.05 |
| YRC-L | 1730 | 97 | 3 | 4 | 1.09 ± 0.05 |

Table 1. Main characterization of activated carbons obtained from YR

Acknowledgments

FAPESP (research support: 2016/06271-4, research grant: 2017/13074-3), Centro de Equipamentos e Serviços Multiusuários (CESM-Unifesp), UFABC

Adsorption of Cu (II) ions by functionalized Fe₃O₄ nanoparticles

Aroldo G. Magdalena (PQ),^{1*} Emerson L. da Silva (PG),² Isabela M.B da Silva (IC),¹ Gêssika H.O da Silva (IC),¹ Marina P. Silva (PQ).²

***aroldo.magdalena@unesp.br**

¹Departamento de Química da Faculdade de Ciências de Bauru, UNESP; ²Departamento de Física da Faculdade de Ciências de Bauru, UNESP; ³Centro de Ciências Exatas Departamento de Ciências exatas e da Faculdade de Ciências de Bauru, UNESP.

Palavras Chave: Nanoparticles, Functionalization, Adsorption, Cu (II) ion.

Highlights

The adsorbents are nanomaterials;
The functionalization of the magnetite led to a better colloidal stability;
The q_{max} increases $Fe_3O_4 < Fe_3O_4-NH_2 < Fe_3O_4-chitosan < Fe_3O_4-NH_2-chitosan$ nanoparticles.

Resumo/Abstract

Environmental contamination by toxic elements due to the increasing anthropic action has a direct effect on the environmental balance. The excessive concentration of metals is one of the serious problems affecting this balance. Among such metals, copper(II) ion stands out, which high concentrations in rivers may cause fish deaths and affect human beings directly. In this study, Fe₃O₄ nanoparticles were synthesized and later functionalized with (3-aminopropyl) trimethoxysilane (APTMS) and chitosan, forming Fe₃O₄-NH₂, Fe₃O₄-chitosan and Fe₃O₄-NH₂-chitosan nanoparticles. The adsorption of Cu (II) ions in aqueous medium was studied with the nanoparticles synthesized as adsorbents. The Cu(II) solutions were synthesized in the range of 250 to 1000 mg L⁻¹. The nanoparticles were characterized by X-ray diffraction techniques, Fourier transform infrared (FTIR) spectroscopy, zeta potential, and transmission electron microscopy (TEM); UV/Vis spectroscopy was performed for studying Cu(II) adsorption onto nanoparticles. The results showed that the nanoparticles presented good morphology of shapes and sizes. The surface functionalization of Fe₃O₄ nanoparticles was confirmed by the FTIR, zeta potential and TG measurements. The experimental data of the adsorptive amount at equilibrium were adjusted on the Langmuir and Freundlich isotherms. As results, the experimental data better fit the Langmuir equation with the highest coefficient of determination (R²) and the lowest values of the reduced chi-square (χ_{red}^2) and residual sum of squares (RSS) in relation to the Freundlich isotherm. The results of the statistical analysis showed that there is a statistically significant difference between the adsorptive amounts at equilibrium at different temperatures (25, 35 and 45 °) for each adsorbent. In an adsorbent analysis only a statistically significant difference was found between Fe₃O₄-chitosan and Fe₃O₄-NH₂-chitosan nanoparticles at the initial concentration of Cu (II) around 750 mg L⁻¹ at 35 ° C. However, there is a tendency to increase the adsorptive amount in the equilibrium portrayed by the maximum adsorption capacity (q_{max}) that was found in the following order: Fe₃O₄ < Fe₃O₄-NH₂ < Fe₃O₄-chitosan < Fe₃O₄-NH₂-chitosan this sequence present statistically significant difference. This increase in maximum adsorptive capacity is associated with higher colloidal stability and complexation of Cu (II) by the amino group, as indicated in the FTIR after adsorption.

Agradecimentos/Acknowledgments

The authors thank FAPESP, CNPq and CAPES.

New phenylphenalene isolated from *Eichhornia crassipes*

Mayra F. Costa (PG),¹ Walter A. Soares Filho (IC),¹ Mayara M. Luiz (IC),¹ Isabele R. Nascimento (PQ).^{1*}

mayra-fonseca@hotmail.com; isabele.nascimento@iq.unesp.br

¹Institute of Chemistry, São Paulo State University, UNESP, Araraquara, SP, Brazil.

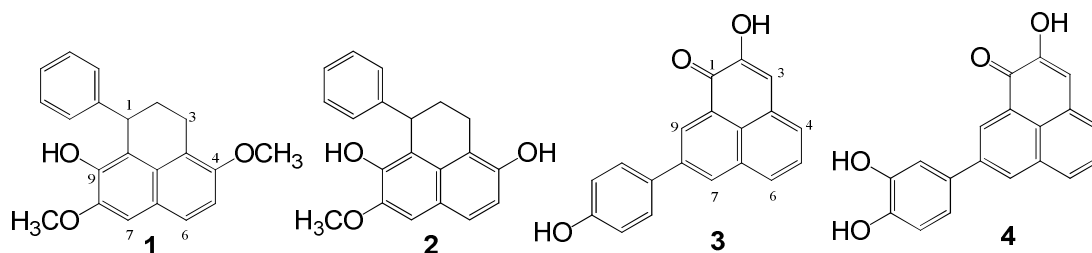
Keywords: Pontederiaceae, *Eichhornia crassipes*, Phenylphenalenes, Phenylphenalenones.

Highlights

- Water hyacinth as an invasive aquatic plant.
- Phenylphenalene derivatives isolated from *E. crassipes*.
- 2,3-dihydro-9-hydroxy-4,8-dimethoxy-1-phenylphenalene (**1**) is been reported for first time.

Abstract

Eichhornia crassipes (water hyacinth) is an invasive aquatic plant and considered as a noxious weed in many parts of the world. Phenylphenalene metabolite derivatives have been isolated from *E. crassipes*.¹ Phenylphenalenones are of special interest because of their potential role as phytoalexins and phytoanticipins, as well as leishmanicidal agents.² The aerial part and roots of *E. crassipes* were individually dried, ground, and extracted at room temperature with ethanol. The crude extracts of both parts were solubilized with H₂O/MeOH 1:1 and partitioned with hexane. The hydroalcoholic fractions were subjected to different chromatographic procedures such as CC (Sephadex™ LH-20, MeOH 100%, isocratic) and semipreparative HPLC-DAD (C18, ACN-H₂O 92:08, gradient with 0.025% TFA) to give four compounds: 2,3-dihydro-9-hydroxy-4,8-dimethoxy-1-phenylphenalene (**1**), 2,3-dihydro-4,9-dihydroxy-8-methoxy-1-phenylphenalene (**2**), 2-hydroxy-8-(4-hydroxyphenyl)-phenalen-1-one (**3**), and 2-hydroxy-8-(3,4-dihydroxyphenyl)-phenalen-1-one (**4**). The structures of the compounds were elucidated by spectroscopic analysis using 1D and 2D NMR, as well as by comparison with literature data.^{3,4} The compound **1** is been described for the first time in literature.



Acknowledgements: IQ-UNESP-Araraquara, FAPESP, CAPES, and CNPq.

References

- [1] Lalitha, P.; Sripathi, S. K.; Jayanthi, P. **Natural Product Communications**, v. 7, n. 9, p.1249-1256, 2012.
- [2] Norman, E. O.; Lever, J.; Brkljaca, R.; Urban, S. **Natural Product Reports**, 2019, Advance Article.
- [3] DellaGreca, M.; Previtera, L.; Zarelli, A. **Tetrahedron**, v. 65, p. 8206-8208, 2009.
- [4] Holscher, D.; Schneider, B. **Phytochemistry**, v. 66, p. 59-64, 2005.

Área: ANA

Nº de Inscrição: 00567

Central Composite Rotatable Design Approach for the Optimization of Bromine and Iodine Determination by IC-MS

Priscila T. Scaglioni (PQ),¹ Diogo L. R. Novo (PG),¹ Rodrigo M. Pereira (PQ),¹ Paola A. Mello (PQ),² Juliana S. F. Pereira (PQ),³ Márcia F. Mesko (PQ),^{1*}

priscilascaglioni@gmail.com; *marcia.mesko@pq.cnpq.br

¹Centro de Ciências Químicas, Farmacêuticas e de Alimentos, Universidade Federal de Pelotas, Capão do Leão – RS, Brazil.

²Departamento de Química, Universidade Federal de Santa Maria, Santa Maria – RS, Brazil.

³Instituto de Química, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre – RS, Brazil.

Palavras Chave: IC-MS, Bromine, Iodine, CCRD, Experimental design, Ultratrace determination.

Highlights

Statistical model was predictive and significant.

The optimization (600 °C – probe temperature; 135 V – cone voltage; 4.2 kV – needle voltage) provided the highest signal intensity for Br and for I by IC-MS.

Abstract

Ion chromatography with mass spectrometry detection (IC-MS) is an interesting and promising alternative for routine analysis to ensure analytical confidence. The use of mass spectrometry detection coupled to the IC dramatically improves the selectivity, sensitivity and detection capability compared to the conductivity detection - the most common detection system used in IC. To assure accurate determination, appropriate chromatographic and spectrometric optimizations are critical to the success of the method. In this study, significant parameters for Br and I detection by IC-MS were optimized using a central composite rotatable design (CCRD) 2³ with six axial points and three replicates of the central point. Mass spectrometry detection was optimized by CCRD using five levels of cone voltage (20 to 160 V), needle voltage (1 to 5 kV) and probe temperature (300 to 600 °C). The goodness of fit of the model was evaluated by the determination coefficient (R²) and the models were validated by analysis of variance (ANOVA) at the 95% confidence level using the Statistica program (version 10.0, StatSoft, Inc., Tulsa, USA). In this optimization, a standard solution (5 mg L⁻¹ of Br⁻ and I⁻) was introduced to the mass spectrometer using an auxiliary pump (AXP-MS, Dionex/Thermo Fisher Scientific, USA) with a flow rate of 0.28 mL min⁻¹ and injection volume of 500 µL. High purity nitrogen was used as nebulizer gas in the electrospray ionization (ESI) source, at 5.5 bar. The signal intensities for Br (m/z = 79) in the range of 12 to 22 min and for I (m/z = 127) in the range of 30 to 35 min were monitored during the chromatographic run. Electrospray in negative ionization form selected ion monitoring (SIM) was used for all scans with a 0.2 m/z span and dwell time of 1.0 s scan⁻¹. According to the CCRD results, all variables were statistically significant (p < 0.05) for Br and I. The central points showed little variation (relative standard deviation - RSD ≤ 2%) for Br and I signal intensities, indicating good repeatability. The ANOVA of the model suggests that it is predictive (F_{cal} > F_{tab}) and significant (p < 0.05); R² values were 0.961 and 0.939 for Br and I, respectively, indicating that 96% and 94% of the intensities variation are attributed to the factors and that only 5% are by chance. The results obtained experimentally were compared with those obtained using the model, and the linear-correlation coefficient obtained for both analytes was higher than 0.85; thus, the models for the Br and I signal intensities were generated. The maximum signal intensities for Br and I were obtained when the maximum probe temperature (600 °C) was used in the mass spectrometer, and with values about 135 V of cone voltage and 4.2 kV of needle voltage. Thus, these conditions were chosen for Br and I determination by IC-MS. The use of this technique has the advantage of being enable the species-specific detection of Br and I when compared to plasma-based spectrometry techniques and can be applied for Br and I determination in different samples.

Acknowledgments

The authors are grateful to CNPq – Brazil (grant numbers 409357/2016- 2 and 496 309424/2016-0), CAPES – Brazil (finance code 001), and FAPERGS – Brazil (grant 497 number 16/2551-0000561-8).

Use of iron ore tailings from dams for the production of carbon nanomaterials and application in the adsorption of 17 α -Ethinylestradiol

Rayane C F Silva (PG),¹ Maria Helena de Araújo (PQ),¹ Ana P de C Teixeira (PQ)¹.

rayanec.ferreira@gmail.com

¹Departamento de Química, UFMG

Keywords: carbon nanotubes, iron ore tailings, 17 α -Ethinylestradiol, CVD, fluidized bed reactor.

Highlights

Iron ore tailings from dams to produce carbon nanomaterials. Carbon nanomaterials synthesis by CVD method in a fluidized bed reactor. Adsorption of the emerging contaminant 17 α -Ethinylestradiol.

Abstract

This study reports the use of iron ore tailings (IOT) as a catalyst for the production of carbon nanomaterial (CNM) and the application of these materials to the adsorption of 17 α -Ethinylestradiol (EE) hormone. The synthesis occurred by CVD (Chemical Vapor Deposition) in a fluidized bed reactor. Two carbon sources were used: ethylene at 500, 600, 700 ° C, and acetonitrile at 500, 600, 700, 800 and 900 ° C.¹

Transmission electronic microscopy (TEM) images (figure 1a) showed that the two highest temperatures (for each source) favored the formation of nanotubes (CNT). Ethylene formed long tubular nanostructures. And acetonitrile generated NTCs more defects called *bamboo likes*.² The Raman spectroscopy (figure 1b) confirmed that the ethylene materials formed more organized graphite structures, because they presented higher intensities for the G band in relation to D. In the hormone removal tests, the adsorption capacity of the materials varied from 16 to 31%, for the time of 24 hours (figure 1c). The kinetic study indicated that all systems present pseudo-second order behavior. The adsorption isotherms indicated Freundlich behavior.³ Finally, concluded that it is possible to use IOT as a catalyst for the synthesis of NMCs by CVD. The materials were also good for adsorption of EE. Thus, this study proposes solutions to two environmental problems: application to IOT of dams and removal of an emerging contaminant.

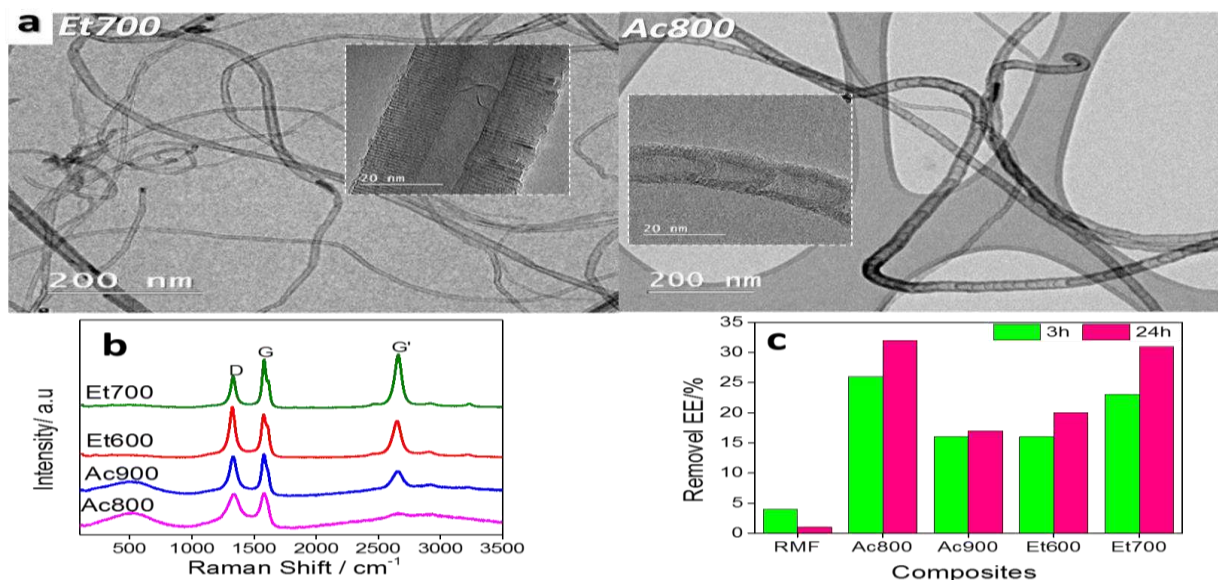


Figura 1: (a) Transmission micrographs; (b) Raman spectrum; (c) removal percentage EE.

References

- TESSONNIER, J. P.; SU DANG, S. *ChemSusChem*, v. 4, n. 7, p. 824-847, 2011.
- AYALA, P. et al. *Carbon*, v. 48, n. 3, p. 575-586, 2010.
- AL-KHATEEB, L. A. et al. *Journal of Industrial and Engineering Chemistry*, v. 20, n. 3, p. 916-924, 2014.

Acknowledgments

CNPq, Capes, Fapemig, Center of microscopy – UFMG and INCT Midas

42ª Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química: Eixos Mobilizadores em Química

Área: MAT

(Inserir a sigla da seção científica para qual o resumo será submetido. Ex: ORG, BEA, CAT)

Nº de Inscrição: 00569

(Inserir o número de inscrição do autor que fez a submissão)

Synthesis, characterization and biological assay of superparamagnetic iron oxide nanoparticles covered with methylene blue molecule.

Victor H. Toledo (IC),^{1*} Martha S. Ribeiro (PQ),² Tania M. Yoshimura (PG),² Saulo P. Toledo (PG),² Carlos E. Castro (PQ),³ Paula S. Haddad (PQ),¹

victorhlatoledo@gmail.com

¹Departamento de Química, UNIFESP; ² Centro de Lasers e Aplicações, IPEN-CNEN/SP; ³ Centro de Ciências Naturais e Humanas, UFABC.

Palavras Chave: Nanoparticles, Superparamagnetism, Singlet Oxygen, Methylene blue, Photodynamic therapy, Silica.

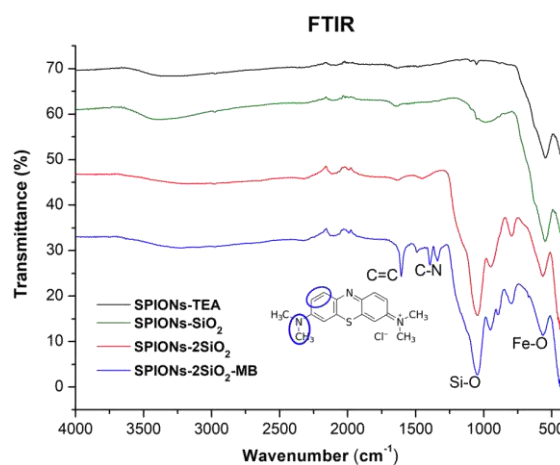
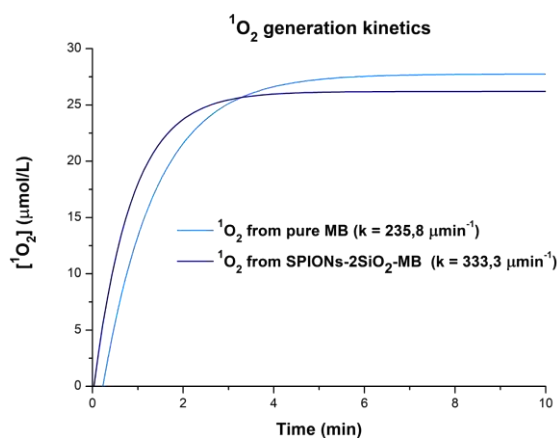
Highlights

Synthesis of Fe₃O₄ nanoparticles. Surface functionalization with methylene blue molecule. Structural and spectroscopic characterizations. Photodynamic therapy. Biological assay on E. coli bacteria.

Resumo/Abstract

The present study is focused on the synthesis and characterization of methylene blue (MB)-containing silica-coated superparamagnetic nanoparticles with great potential for photodynamic therapy (PDT). Methylene blue when exposed to light reacts with molecular oxygen and generates singlet oxygen (¹O₂) which is cytotoxic. These superparamagnetic iron oxide nanoparticles (SPIONs) were prepared by co-precipitation of iron (II) and (III) chlorides in the presence of a weak base. The surface of nanoparticles was covered with a double layer of silica, tetraethylortosilicate and sodium silicate, leading to the SPIONs-2SiO₂-MB compound.

Nanoparticles were characterized by Fourier transform infrared spectroscopy, X-ray diffraction, transmission electron microscopy, energy dispersive spectroscopy and magnetic measurements. X-ray powder diffraction technique confirmed the formation of the magnetite. The average crystallite size obtained from Scherer equation was 10 nm. By infrared spectroscopy, it was possible to note characteristic bands associated to iron-oxygen, carbon-nitrogen and silicon-oxygen bonds. The nanocomposites presented magnetic behavior at room temperature due to the presence of magnetite (Fe₃O₄) core. Indirect measurements of ¹O₂ release were performed using a red light (660 nm, P=100 mW) and reagent, 1,3-Diphenylisobenzophuran, with SPIONs-2SiO₂-MB and pure MB, observing the absorption decay in UV-vis. ¹O₂ is spontaneously released in aqueous solution at levels required for biomedical applications and tests with bacteria show promising nanoparticles applications.



Agradecimentos/Acknowledgments

This work was supported by the São Paulo Research Foundation – FAPESP [grant numbers 2017/15061-6 and 16/22482-5]. Thanks to FAPESP, UFABC, IPEN / USP, CAPES, CNPq, UNIFESP and my research group.

Influência do pH nas Isotermas de Adsorção do Corante Básico Azul com Resíduo da Clarificação de Óleos Vegetais, Como Adsorvente

Tainan Miguel (IC), Ivonete O. Barcellos (PQ)*.

E-mail: tainan_miguel@hotmail.com; *job@furb.br.

¹Departamento de Química. CCEN/FURB. Rua Antônio da Veiga, 140, CEP 89012-900 Blumenau, SC.

Palavras Chave: Isotermas de adsorção, Adsorvente, Resíduo de clarificação de óleo vegetal, Corante Básico, Parâmetros Termodinâmicos.

Highlights

Influence of pH on the adsorption Isotherms from the Basic Blue Dye employing residue from the clarification of vegetable oils as adsorbent.

Resumo/Abstract

O objetivo principal deste trabalho foi investigar o uso potencial do resíduo de clarificação de óleos vegetais (RC) na remoção do Corante Básico Astrazon Azul FGGL 300 % de solução aquosa, através dos métodos de adsorção. Foi utilizado 50 mL de solução de corante nas concentrações de 3,4,6,8,10,11,12 e 13 mg.L⁻¹ empregando 0,50g de adsorvente nas granulometrias de 63 e 90µm, em 3 pHs (3,70; 7,0 e 10,0) a 35°C. Os estudos foram conduzidos em um banho termostático sob agitação constante de 130 rpm. O RC apresentou boas propriedades de adsorção onde a maior eficiência do adsorvente foi de 94,81 % em pH ácido, na granulometria de 63 µm e concentração de 10 mg L⁻¹ de corante (Figura1 e 2). Varias isotermas foram testadas (Langmuir, Freundlich e Flory-Hugging) no equilíbrio termodinâmico, os resultados mostraram melhor ajuste dos dados pela equação de Langmuir (Figura3 e 4). Os parâmetros termodinâmicos de adsorção, segundo Equação de Vant' Hoff, demonstram valores negativos para ΔG° (-7,41; -7,66; -7,78; -7,91 kJ mol⁻¹) e para ΔS° (-25,31 J mol⁻¹ K⁻¹) o que mostra uma adsorção favorável e espontânea nas temperaturas (20,30,35 e 40 °C) nos pHs estudados, devido ao valor baixo e negativo de ΔH° (-10,87 kJ mol⁻¹), indica um processo exotérmico e de natureza física, confirmando a diminuição da aleatoriedade na interface sólido-solução durante adsorção, pelos parâmetros de Freundlich.

Figura1: Variação de eficiência (%) 63µm

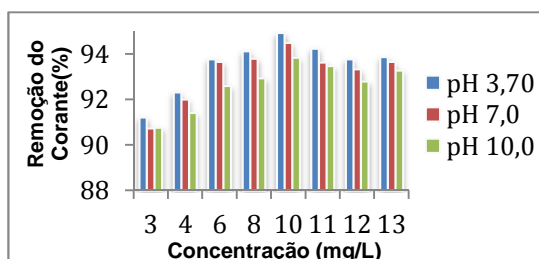


Figura2: Espectro UV-visível

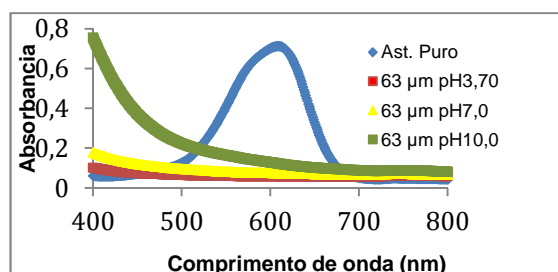


Figura3: Isoterma de adsorção 63 µm

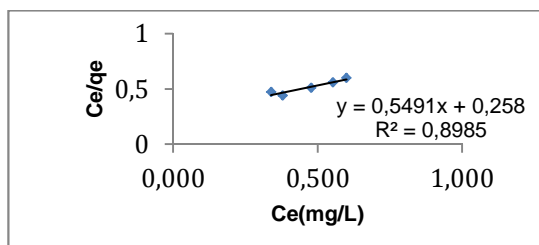
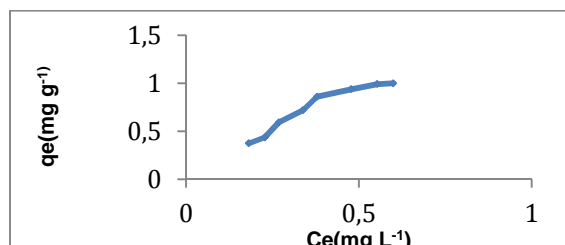


Figura4: Adequação ao modelo de Langmuir 63 µm



OZCAN, A. S.; OZCAN, A. *Journal of Colloid and Interface Science*, v. 276, n. 1, p. 39-46, 2004.

Agradecimentos/Acknowledgments



Área: INO Nº de Inscrição: 571

 α -Diimines complexes of ruthenium(II) containing ethylenediamine and ethylenediamine functionalized with norbornene¹Elizabeth A. Alves (PG),¹Carlos R. B. Tasso (PG),¹Benedito S. Lima-Neto* (PQ)

alvesselizabeth@usp.br; benedito@iqsc.usp.br

¹Instituto de Química de São Carlos, USP, São Carlos, SP – Brasil.

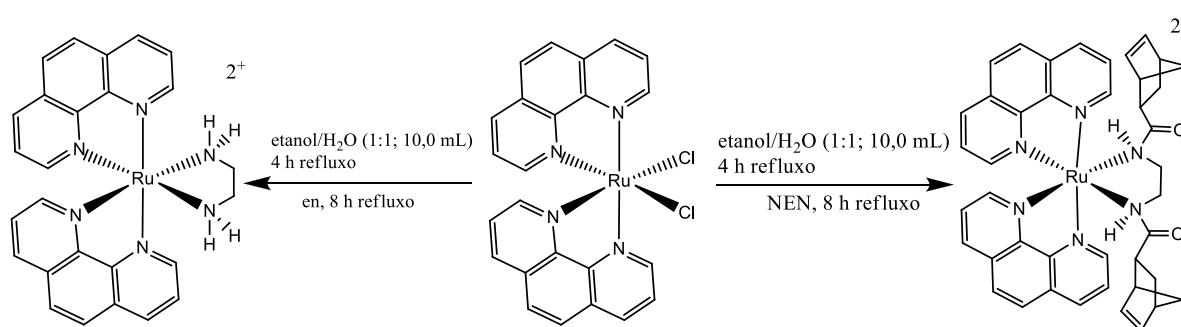
Keywords: Ruthenium(II), Ethylenediamine, norbornene, 1,10-phenanthroline and 2,2'-bipyridine.

Highlights

- New complexes of type Ru-diimines with ethylenediamine were obtained.
- Ethylenediamine derivatized with norbornene produced similar complexes and were inserted in polynorbornene.

Abstract

The aquo-complex from cis -[RuCl₂(L)₂].2H₂O, L = 1,10-phenanthroline (phen) or 2,2'-bipyridine (bpy), reacted with ethylenediamine (en) resulting in [Ru(L)₂(en)](PF₆)₂ type complexes. The FTIR spectra and CHN-elemental analyses characterized the complexes. The electronic spectra in methanol exhibited absorption bands shifted to lower wavelength, when compared to the corresponding dichloro precursors. This is consistent when replacing chlorides ions that are π donors by pure σ -donor ligand. Typical absorptions of α -diimines in 440-550 nm did not shifted for 4 hours at 25 °C. The ¹H-NMR (CD₃OD) spectrum of cis -[Ru(phen)₂(en)]²⁺ ion presented characteristic hydrogen atoms of the phenanthroline ring in the region between 7.7 and 10.0 ppm, being slightly shifted in relation to pure phenanthroline. The hydrogen atoms referring to the –NH₂ group appeared in 4.1 ppm, while the methylene hydrogens in the region of 2.9 ppm, being slightly shifted in relation to pure ethylenediamine. For the cis -[Ru(bpy)₂(en)]²⁺ ion the aromatic hydrogen atoms appeared in the region between 7.0 a 9.5 ppm. The hydrogen atoms of the –NH₂ group appeared in 3.9 ppm, while the methylene hydrogens appeared in 2.8 ppm. The cyclic voltammetry of the complexes with ethylenediamine exhibit high oxidation potential values (0.73 - 0.74 V vs Ag/AgCl). Ethylenediamine reacted with norbornene-carboxylic acid to result in (*bis*-norbornene)ethylenediamine (NEN) that reacted with cis -[Ru(H₂O)₂(L)₂]⁺² ions. The resulting complexes exhibited similar spectroscopic properties relative to complexes with en. The NEN-based complexes were polymerized in presence of pure norbornene via ROMP.



Scheme 1: Illustration of synthesis with ethylenediamine and with NEN.

Acknowledgments

CNPQ, FAPESP, CAPES.

Remoção de Corantes em Sistema Aquoso Binário Utilizando Biossorvente obtido a partir da *Salvinia sp.*

Carlos V.O. Silva (IC),¹ Danielle M.A. Stapelfeldt (PQ).^{1*}

carlos.silva21@live.com; daniara2@yahoo.com.br

¹Departamento de Química, UFRJ

Palavras Chave: Adsorção, Corantes, Biossorvente.

Highlights

Adsorption study of methylene blue and crystal violet dyes present in an aqueous system using biosorbent obtained from *Salvinia sp.* Modification made through the organosolv method.

Resumo/Abstract

O objetivo deste estudo é demonstrar a potencialidade da aplicação do biossorvente obtido a partir da *Salvinia sp.* para remoção dos corantes azul de metileno e violeta cristal presente em um sistema aquoso. A *Salvinia sp.* foi coletada na Lagoa do Iriry, em Rio das Ostras, RJ. O tratamento inicial incluiu lavagem, secagem e trituração, após estes procedimentos, a biomassa foi então submetida ao método organosolve, a qual teve como finalidade modificar a superfície da biomassa potencializando o processo de adsorção. Após o tratamento, o biossorvente foi caracterizado por infravermelho, microscopia eletrônica de varredura e área superficial pelo método BET. Após a caracterização, foram realizados os testes de adsorção em batelada, foi utilizada uma solução contendo os corantes azul de metileno e violeta cristal; os parâmetros utilizados foram variação da concentração inicial, temperatura e tempo. Os resultados da caracterização mostraram que o método organosolve modificou a estrutura da biomassa, em comparação com a biomassa sem tratamento, apenas seca e moída. Os testes de adsorção mostraram que o biossorvente quimicamente modificado foi mais eficiente que o biossorvente sem tratamento. A Figura 1 (a) mostra os resultados do violeta cristal e a Figura 1 (b), os resultados do azul de metileno. A capacidade máxima foi de 164 mg.g^{-1} para o corante violeta cristal, e 130 mg.g^{-1} para o azul de metileno.

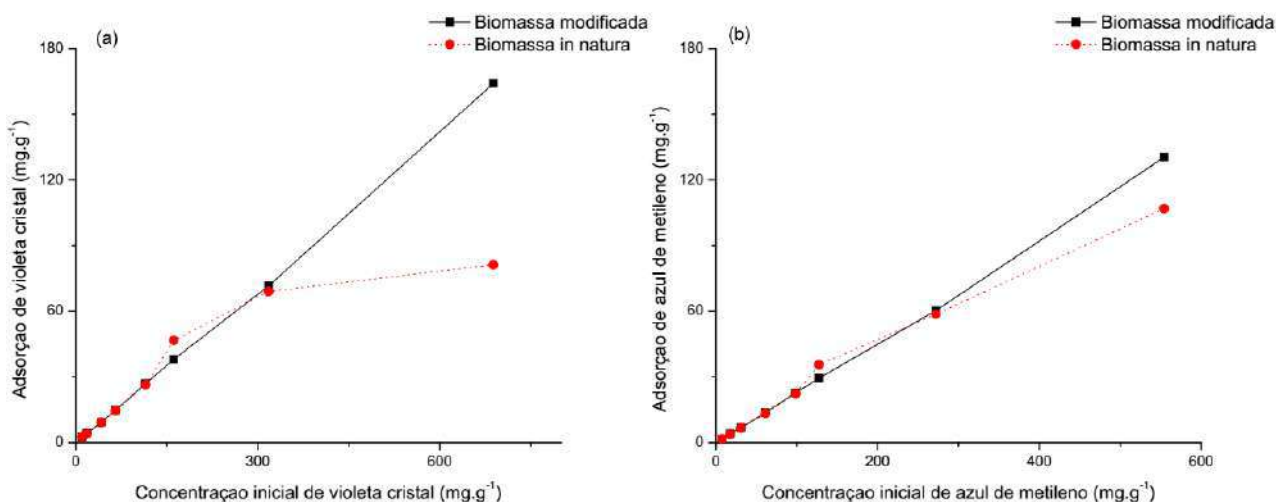


Figura 1: Adsorção dos corantes violeta cristal (a) e azul de metileno (b) em função da variação da concentração inicial dos corantes. Condições experimentais: 100 mg de biossorvente, 25 mL de solução, tempo de contato de 2 h à temperatura ambiente.

Multicomponent reactions towards synthesis of pyrroles fused to chromene ring

Andreza M. Moraes¹ (PG), Silmara L.G. Alves¹ (PQ), Simone C. Silva¹ (PQ); José A.F.P. Villar^{1*} (PQ),
 andrezamaringhomoraes@gmail.com; zevillar@ufsj.edu.br

¹Laboratório de Síntese Orgânica e Nanoestruturas - Universidade Federal de São João Del-Rei, Avenida Sebastião Gonçalves Coelho, 400, Bairro Chanadour, 35.501-296, Divinópolis, MG, Brasil.

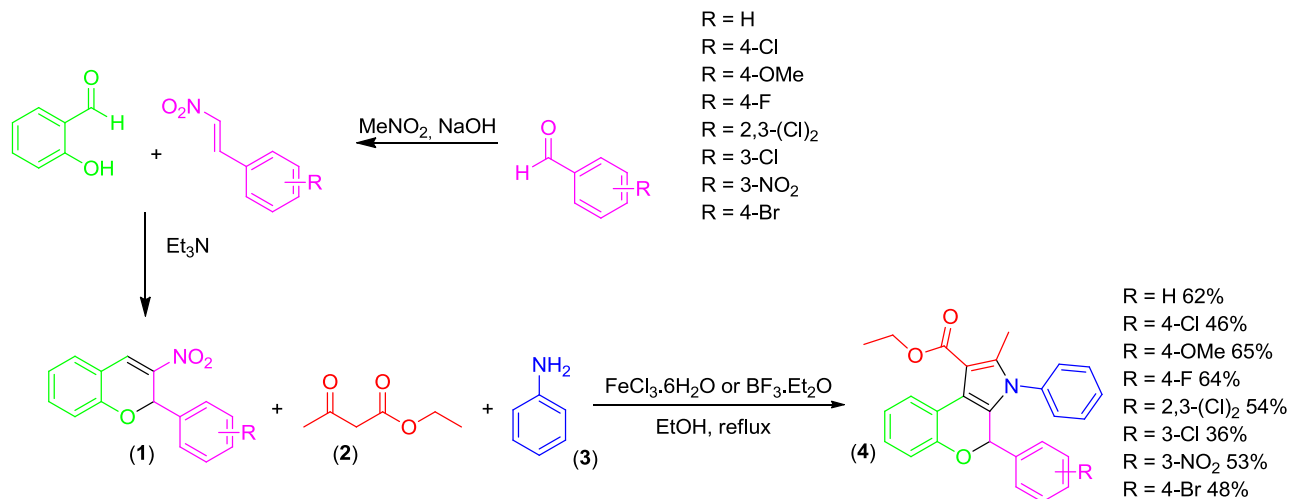
Palavras Chave: Multicomponent reaction, Nitrochromene, Pyrrole.

Highlights

Synthesis of fused pyrrole-chromene derivatives were developed by multicomponent reaction. New compounds with more structural complexity were prepared employing simple starting materials.

Resumo/Abstract

Pyrrole group is a nitrogen-containing heterocyclic ring employed as a building block for several compounds with different therapeutic properties. Chromenes are important constituents of natural active compounds, and these structures displayed a broad spectrum of biological activities¹. In view of these two pharmacophore groups, we obtain the fused pyrrole-chromene compounds by multicomponent reactions between nitrochromenes (1), ethyl acetoacetate (2) and aniline (3). Multicomponent reactions are reactions that arouse interest in modern organic synthesis, due the greater structural complexity in less of number of stages and formations of residues². Reactions between substituted nitrostyrenes and salicylaldehyde generated the racemic nitrochromenes (1). The yields of the compounds obtained in multicomponent reactions were evaluated according to the different Lewis acids employed.



Scheme 1. Synthesis proposal for fused pyrrole-chromene from multicomponent reactions.

All compounds were characterized by NMR, FT-IR and HRMS. Some interesting properties were observed in the ¹H-NMR and will be discussed later.

¹Pratap R. and Ram V. J. *Chem. Rev.*, **2014**, *114*, 10476-10526.

²Cioc R.C.; Ruijter E. and Orru R. V. *Green Chemistry*. **2014**, *16* (6): 2958-75.

Agradecimentos/Acknowledgments

UFSJ, UFPR, CNPq, CAPES

Área: MAT

Nº de Inscrição: 00574

Uptake study of luminescent silica particles by living cells

Alessandra M. G. Mutti (PG),¹ João A. O. Santos (PG),¹ Ana M. Pires (PQ),¹ Sergio A. M. Lima (PQ)¹sergio.lima@unesp.br; alegarbosamutti@gmail.com¹Departamento de Química e Bioquímica, FCT – UNESP, Presidente Prudente – São Paulo, Brasil.Palavras Chave: *nanoparticles, europium, terbium, biomarker, CHO-k1*

Highlights

Uptake study of luminescent silica particles by living cells; Luminescent silica with Eu³⁺ and Tb³⁺-complexes obtained via sol-gel; Intense Eu³⁺ and Tb³⁺ emission; Endocytosis of particles uptake process by CHO-k1 cells

Resumo/Abstract

Due to their adjustable surface characteristics, biodegradability and easily surface modification, amorphous silica nanoparticles (SiNPs) have been intensively investigated for use in biomedical applications, including drug delivery and cell imaging.¹ Such use of SiNPs requires speciation to reach sites within the body through ingestion, inhalation or intravenous injection. Therefore, the investigation and understanding of the uptake of SiNPs, retention, cytotoxic potential and cellular interactions are critically important. In this sense the use of SiNPs containing luminescent properties becomes very suitable for this type of investigation. Besides being interesting and versatile materials that attend specific tasks,² they can be applied as biomarkers³. In this work, luminescent hybrids based on SiNPs decorated with Eu³⁺ and Tb³⁺ complexes were developed and could be used in exploratory tests as biomarkers in the visualization of CHO-k1 cells. Thus, spherical/spheroidal (~120 nm) silica particles were prepared by the sol-gel method and had their surface functionalized covalently with Schiff base ligands where Eu³⁺ (red emitter) and Tb³⁺ (green emitter) complexes were coordinated. The cell viability of CHO-k1 cells was evaluated by the MTT method in the presence of the hybrids, and high biocompatibility was observed. The particles uptake process by the cells was investigated by MET, in two different concentrations: 20 and 100 µg/mL, showing a mechanism of endocytosis as an internalization process. In both concentrations the particles were uptake, but only at high concentration it was possible to detect the presence of the particles inside the cells by EDS. The cells in presence of the particles were also investigated via fluorescence microscopy, and confocal microscopy. In summary the particles did not lose their luminescence after the internalization process and demonstrated a preferential distribution around the nuclei, what makes them a promising candidate for application as an intracellular marker and for bioimaging⁴.

Agradecimentos/Acknowledgments

CAPES, CNPq and FAPESP for financial research support; Scanning; LabMMEV/ Prof. Dr. Neri Alves, Department of Physics, FCT-UNESP); LEMAF, Prof. Dr. Andréa Simone Stucchi de Camargo Alvarez Bernardes, Physics Institute of São Carlos-USP); LabMic/Dr. Tatiane Oliveira dos Santos, Institute of Physics-UFMG) and LME/Technical responsible - Ana Curro, USP/IQSC).

¹ L. PASQUA, et al., *Curr. Med. Chem.*, 16 (2009) 3054-63.

² C. B. AZEVEDO, et al., *J. Fluoresc.*, 25 (2015) 433-440.

³ L. ARMELAO. *Coord. Chem. Rev.*, 254 (2010) 487-505.

⁴ A.M.G. MUTTI, et al., *Opt. Mat.*, (2019) in press.

Design and synthesis of new antimicrobial compounds based on morpholine pharmacophore group.

Amanda A. de Assis¹ (PG), **Felipe R. S. Santos**² (PG), **Jéssica T. Andrade**² (PG), **Jaqueline M. S. Ferreira**² (PQ), **José A.F.P. Villar**^{1*} (PQ)

amanda.araujodea@gmail.com; zevillar@ufsj.edu.br

¹Laboratório de Síntese Orgânica e Nanoestruturas - Universidade Federal de São João Del-Rei, Campus Centro-Oeste Dona Lindu, Divinópolis, MG; ²Laboratório de Microbiologia - Universidade Federal de São João Del-Rei, Campus Centro-Oeste Dona Lindu, Divinópolis, MG.

Palavras Chave: Antimicrobianos, Chalcona, Morfolina.

Highlights

New molecules with morpholine pharmacophore group were proposed and synthesized as antimicrobial agents based on structure-activity relationship.

Resumo/Abstract

Recently, we synthesized and evaluated a series of chalcones linked with triazole, thiosemicarbazone and morpholine groups. Structure-activity relationship study was revealed that compounds containing free phenol group at position C4 and morpholine group increase the antibacterial activity. Preliminary results showed fungistatic activity [*Candida tropicalis* (ATCC 28707)] to compounds **1**, **2** and **3** (**Figure 1**) with 15.60, 1.056 and 31.25 µg/mL respectively. Based in these results we proposed the synthesis of two new molecules (**8** and **9**) exchanging the position of morpholine group to hydroxyl group at C2 (**Scheme 1**).

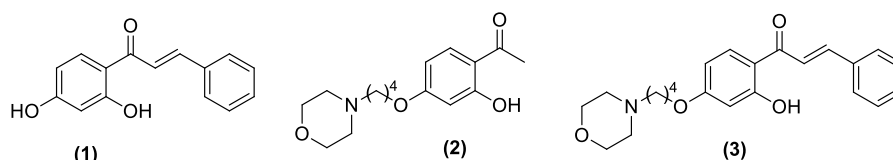
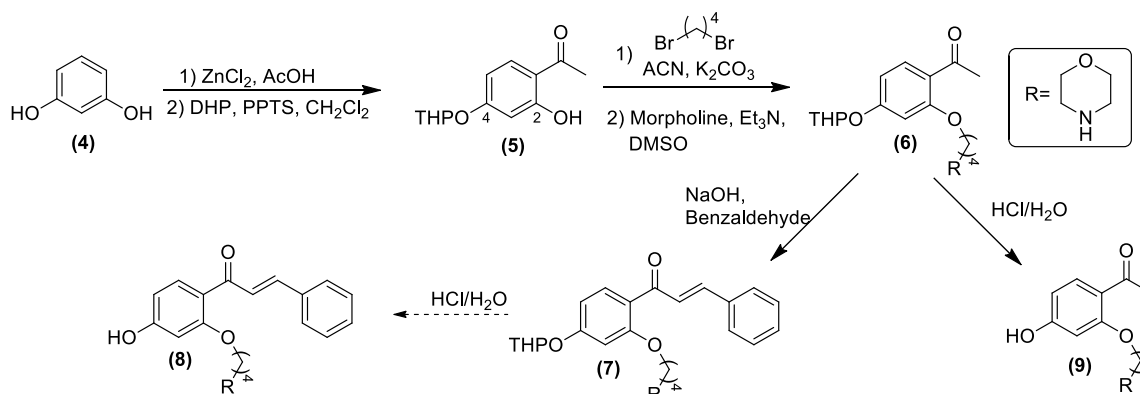


Figure 1: Chemical structures of chalcones hybrid

Compound **5** was synthesized from resorcinol **4** after acylation and selective protection of phenolic group at C4 with DHP. After reaction with dibromide and N-alkylation with morpholine desire key intermediate **6** was prepared in good yields. At this point deprotection furnished compound **9** and condensation reaction with benzaldehyde furnished chalcone **7**. Last step to produce desired chalcone **8** will be performed through the deprotection at C4.



Scheme 1: Route to the synthesis of compounds **8** and **9**.

Agradecimentos/Acknowledgments

UFSJ, UFPR, CNPq e FAPEMIG.

Microwave-Enhanced Advanced Oxidation Processes: A Different Proposal to Evaluate the Microwave Radiation Effect

Pedro I. I. Barrenha (PG)^{1*}, Eduardo Bessa Azevedo (PQ)¹.

pbarrenha@gmail.com

¹Instituto de Química de São Carlos, Departamento de Química e Física Molecular, USP

Keywords: Advanced Oxidative Processes, Microwaves, Bisphenol-A, Degradation, Radiation, Experimental Design

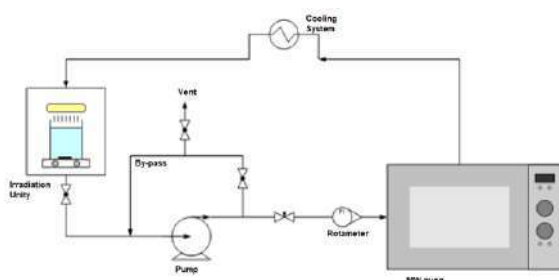
Highlights

New reactor scheme for MW-enhanced AOPs. Higher degradation achieved with UV/H₂O₂/MW than with UV/H₂O₂. Experimental design confirmed the MW influence.

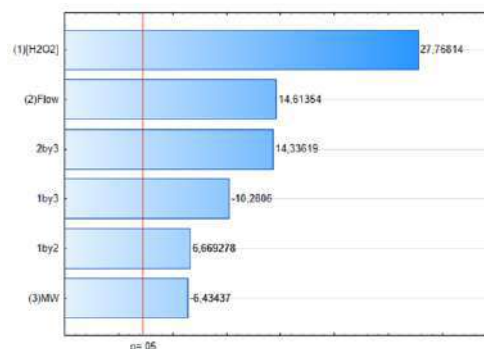
Resumo/Abstract

Advanced Oxidation Processes (AOPs) are capable of decomposing several molecules through the reaction with [•]OH radicals. High concentrations of organic matter severely impairs degradation, significantly increasing the time needed to achieve mineralization. One of the many options to tackle this issue is the use of microwave (MW) radiation. The simultaneous effect of MW and UV radiation on AOPs shows better results than the use of these radiations alone. However, the explanation of that effect on the reactional system is still unknown.

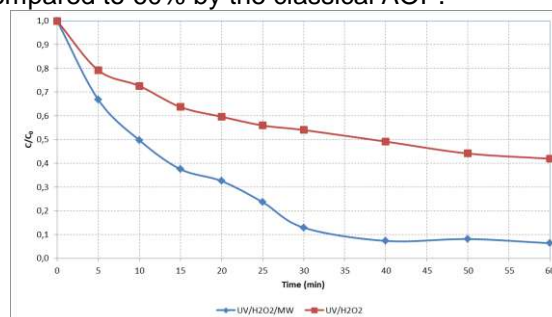
This work aims at presenting a different reactor scheme for MW-enhanced AOPs. Instead of using both radiations simultaneously, they were placed sequentially, using a high-pressure Hg lamp as the UV source and H₂O₂ as the [•]OH one. The system was temperature-controlled in order to dampen any thermal effect. Bisphenol-A was chosen as the model-pollutant, due to its high recalcitrance and endocrinal disrupting characteristics.



A 2³ factorial design was performed to check the significance of the factors: [H₂O₂], MW power, and flow rate on the system. The Pareto chart shows that all factors were statistically significant.



As an example, the system with and without MW-radiation, at one of the tested conditions, was compared. Within 30 min, approximately 90% of Bisphenol-A was removed by the AOP-MW system, compared to 60% by the classical AOP.



These results show that MW-radiation had a positive effect on the tested AOP. Further studies are necessary to clarify whether these effects are due to thermal or non-thermal effects.

References:

- Andreozzi, Caprio, Insola, Marota. *Catal. Today*, 53 (1999) 51-59.
 Nascimento, Azevedo. *Environ. Technol.*, 48 (2013) 1056-1072.

Área: AMB

(Inserir a sigla da seção científica para qual o resumo será submetido. Ex: ORG, BEA, CAT)

Nº de Inscrição: 00578

(Inserir o número de inscrição do autor que fez a submissão)

Estudo da poluição aquáticas em área de floresta inundável próximo ao perímetro urbano: uso de diferentes indicadores de poluição

Nívea C. G Munin (PQ),^{1*} Fábio B. Leonel (IC),¹ Kessia R. B. Sales (IC),¹ Alex M. Ramos (PQ),¹niveacrisg@gmail.com¹Instituto de Ciências Exatas e Tecnologia, UFAM

Palavras Chave: Poluição Aquática, Indicadores de Poluição, Florestas Inundáveis, Itacoatiara-AM.

Highlights

“Study of water pollution in flooded forest area near urban perimeter: use of different pollution indicators”. The relationship between pollution indicators (physical-chemical, microbiological and emerging contaminants or persistent organic substances) made it possible to confirm water pollution in the areas of flooded forests, at all study points and in different seasonal periods in Amazonia-Brazil.

Resumo/Abstract

Corpos d'água sofrem todos os impactos das atividades antropogênicas ao longo de bacias hidrográficas, chegando cada vez mais em regiões remotas ou de difícil acesso. O objetivo deste trabalho foi avaliar a qualidade dos corpos aquáticos em áreas de florestas inundáveis, usando traçadores de poluição química e biológica, com o intuito de entender as dinâmicas das qualidades físicas, químicas e biológicas naturais dessas áreas. A área de estudo compreendeu aproximadamente 2.110.256 m², no município de Itacoatiara-AM, onde parte são comunidades de agricultores ou pequenos criadores de gado e parte compreende área de floresta, porém toda a área é suscetível a inundações no período de cheias dos rios amazônicos. Os pontos de coletas foram dois no Igarapé de Serpa (Pontos A e B), Igarapé do Venturinha (Ponto C) e Igarapé Eliana (Ponto D). As campanhas amostrais abrangeram os períodos de vazante e cheia dos rios, em 2017 e 2018. Foram avaliados indicadores de poluição: a) físico-químicos (pH, turbidez, temperatura, salinidade, oxigênio dissolvido (OD), condutividade elétrica (CE) e sólidos em suspensão totais (SST)); b) microbiológicos (coliformes termotolerantes e *E. coli* pela técnica de fermentação de tubos múltiplos); c) Substância orgânicas emergentes/persistentes (Carbendazim, 2-Hydroxy Atrazine, Cafeína, DIA, Imidacloprido, DEA, Simazina, Ametrina, Carbofurano, Hexazinona, Tebutiuron, Atrazina, Diuron, Clomazona, Azoxistrobina, Malation, Testosterona, Tebuconazole e Progesterona) pela técnica SPE e LC-MS-MS. Pode-se verificar que a qualidade das águas na área estudada apresentou um determinado níveis de degradação, baseado em alguns parâmetros físico-químico como (OD, CE, SST e Turbidez) apenas na época de vazante, pois nas época da cheia, com a floresta inunda, estes parâmetros ficam todos próximos aos valores do Rio Amazonas. Já, o indicador microbiológico torna mais claro uma possível contaminação por esgoto doméstico no período de vazante, pois em alguns pontos (B e C) obteve-se resultados positivos, com valores acima 1600 NMP/100 mL de amostra, não sendo possível a determinação de limites inferiores e superiores dentro da técnica aplicada. No período de cheia, a variação ocorreu na forma de uma possível diluição nos valores de *E. Coli*, nos pontos A e D, de 14 NMP/100 mL aproximadamente, e os ponto B e C de 130 e 80 NMP/100 mL, respectivamente. Das 19 substâncias orgânicas estudadas, dentre as quais, fármacos, pesticidas, hormônios e cafeína, destaca-se a cafeína, pois esta esteve presente em todas as amostra e nos 2 períodos sazonais (com valores de $3,32 \pm 0,19 \text{ ug.L}^{-1}$ no Ponto C/vazante e $4,04 \pm 0,28 \text{ ug.L}^{-1}$ no Ponto A/cheia), confirmando a influência de esgoto doméstico nestes região, além de uma correlação com o indicador microbiológico. O Carbendazim, Atrazina e Malation também foram detectadas abaixo no LD do método, mas identificados nos cromatogramas, o que pode ser inferido seus usos pelos produtores, no entanto serão necessários mais estudos para confirmação destes dados. Assim, o trabalho corrobora para o entendimento das características físico-químicas naturais de regiões de florestas inundáveis, que não são alteradas significativamente para uma percepção de indicador de poluição aquática. Somando aos parâmetros microbiológicos e determinação de substâncias orgânicas emergentes/persistentes, puderam indicar que esta área estar sob influência da falta de saneamento básico no interior do Amazonas com indícios de contaminação por esgoto doméstico.

Agradecimentos/Acknowledgments

UFAM, FAPEAM e LQA-Laboratório de Química Ambiental da UNICAMP.

Área: ANA

Nº de Inscrição: 00580

Graphene oxide application in dispersive microextraction in solid phase objectifying the preconcentration of metals in liquid samples

João Manoel de Lima Júnior (PG),^{1*} Mónica Benicia Mamián López (PQ),¹ Sergio Humberto Domingues (PQ),² Ivanise Gaubeur (PQ).¹

joao.manoel@ufabc.edu.br; ivanise.gaubeur@ufabc.edu.br

¹Centro de Ciências Naturais e Humanas, UFABC; ²Mackgraphe - Graphene and Nanomaterials Research Center - UPM

Palavras Chave: Preparo de amostra, Óxido de grafeno, Microextração em fase sólida, Metais, Análise direta de sólidos.

Highlights

Graphene oxide (GO) applied to DMSPE. Characterization of GO through thermal and spectroscopy techniques. Multivariate optimization of extraction conditions.

Abstract

Separation and preconcentration procedures are often required for the elimination of interferents, increased sensitivity and improved detection limits. One proposal for the simplification of the conventional solid phase extraction process is dispersive micro solid phase extraction (DMSPE), which is based on the efficient introduction of a reduced amount of solid phase to a liquid sample. Graphene oxide (GO) can be an ideal solid substrate to be used in DMSPE due to its high surface area, theoretical value of 2630 m²g⁻¹, availability of two "faces" for adsorption and many functional groups containing oxygen atoms, thus suggesting, high sorption capacity (SITKO et al, 2013).

The GO used in DMSPE was characterized by Raman spectroscopy, which presented bands D (1346 cm⁻¹), G (1597 cm⁻¹) and G' (2691 cm⁻¹) characteristic of carbonaceous materials. UV-Vis spectroscopy, which presented bands at 233 nm, related to the π - π^* transition of C-C bonds of the aromatic rings, and at approximately 300 nm related to the n- π^* transition of C=O bonds. And through thermogravimetric analysis (TGA), which shows mass loss events at approximately 170° C, related to the removal of oxygen groups, and at approximately 500° C, related to carbon oxidation.

In order to find the ideal extraction condition, a fractional factorial design with three center points was initially performed to estimate the important variables of the system. The design involved 11 experiments that evaluated the variables pH, volume of GO, volume of sample and time of contact, of these, pH, volume of GO and volume of sample were significant. Thus, a Central Composite Rotatable Design (CCRD) with three center points and star was then carried out, involving 17 experiments. Based on the results, the ideal extraction conditions for a multielement sample (Cu, Ca, Al, Zn, Fe, Mn, Cd, Cr, Ti, Ni) of concentration 500ppb is 40 mL of sample, pH = 8.0, 250 μ L of GO 0.5 mg mL⁻¹. Ultrasonic shaking was used for the extraction; the GO, after extraction, was separated from the sample solution via centrifugation. The detections, for determination of extraction percentage, were performed in ICP OES. The next step of this work will be to study possible solid phases for immobilization of GO, followed by direct analysis, through techniques that allow the direct analysis of solids, such as LIBS (laser induced breakdown spectroscopy) or EDXRF (energy dispersive x-ray fluorescence spectrometry).

SITKO, R.; ZAWISZA, B.; MALICKA, E. Graphene as a new sorbent in analytical chemistry. Trends in Analytical Chemistry, 51, 33-43, 2013.

Acknowledgments

grant #2018/10476-6 and #2016/23878-0, São Paulo Research Foundation (FAPESP). Coordination of Superior Level Staff Improvement (CAPES), National Research Council (CNPq) #403544/2016-5 and grant #309881/2015-3.

Área: MAT

Nº de Inscrição: 00581

SYNTHESIS AND CHARACTERIZATION OF NANOCOMPOSITES BETWEEN GRAPHENE AND ZINC OXIDE NANOPARTICLES

Pamela Busarello (IC), Gabriel Zeplin (PG), Samara de Quadros (PG), Lizandra M. Zimmermann (PQ), Eduardo G. C. Neiva (PQ)*.

E-mail: busarello.pamela@gmail.com; eneiva@furb.br

Departamento de Química. FURB.

Key words: *Quantum dots, Zinc oxide, Graphene oxide, Nanocomposites, Photocatalysis, Electrophotocatalysis.*

Highlights

ZnO-GO nanocomposites were prepared via a sol-gel method, resulting in nanomaterials with good optical properties. Moreover, they are expected as promising candidates for photocatalytic applications.

Abstract

Quantum dots (QDs) are a class of nanoparticles that have spectroscopic properties depending on the size, structure and surface characteristics, contributing to the development of new materials. Among them, the zinc oxide (ZnO) QDs presents great relevance, exhibiting excellent optical, electronic, photocatalytic and electrocatalytic properties.^[1] Another nanomaterial that deserves to be highlighted is graphene, exhibiting exceptional properties, such as high electronic mobility and thermal conductivity. The combination of these materials, besides presenting the properties of their isolated constituents, may present synergistic properties. Among the graphene species, graphene oxide (GO) is very interesting for the synthesis of nanocomposites, since its functional groups can act as nucleating points for the nanoparticles. Considering those facts, this work aims to synthesize ZnO-GO nanocomposites, to characterize their morphology and optical properties and to study their potential applications as photocatalyst. The syntheses were prepared via sol-gel method using isopropanol as solvent, in the absence and with addition of ultrapure water or GO aqueous dispersion. They had their kinetics growth followed by optical measurement, such as absorbance and fluorescence, and were analyzed by scanning electron microscopy (SEM) and X-ray spectroscopy (EDS). The additions of water and GO in the syntheses led to very similar behaviors, increasing the intensity of fluorescence and contributing to the agglomeration of the particles and their subsequent precipitation. Moreover, these additions resulted in agglomerates of 65 to 80 nm constituted of nanoparticles with a size of 10 to 15 nm. As potential applications, it is possible to mention the photocatalysis and the photoelectrocatalysis in the degradation of organic dyes. From this, the photocatalysis tests were initiated with ZnO QDs without addition of water or GO in the degradation of methylene blue in alcoholic medium under the action of fluorescent light, resulting in excellent results and reaching approximately 90 % and 98 % band reduction of blue methylene at 655 nm after 20 minutes and 4 hours, respectively. Therefore, the syntheses with the addition of 50 µL of water and GO, due to their higher fluorescence intensities, are favorable candidates for photocatalysis and photoelectrocatalysis applications.

[1] Crislaine Sandri, Maria Victória Krieger, Wallison Chaves Costab, Arleide Rosa da Silva, Ivan Helmuth Bechtold, Lizandra Maria Zimmermann, Pontos quânticos ambientalmente amigáveis: destaque para o óxido de zinco. *Química Nova*, 2017.

Acknowledgments

The authors acknowledge the Government of the State of Santa Catarina/PIPe - Article 170 for a research fellowship, FAPESC and ACAFE for the financial support and the Materials Chemistry Group (GQM- Grupo de Química dos Materiais) from UFPR for SEM and EDS characterization.

Tetrahydrofuran lignans from leaves of *Aristolochia warmingii* Mast.

Camila Luiza Cunha (PG),¹ Paulo Vinícius G. de Antonio (IC),¹ Isabelle R. Nascimento (PQ).^{1*}

camila.cunha@iq.unesp.br; isabele.nascimento@unesp.br

¹Institute of Chemistry, São Paulo State University, UNESP, Araraquara, SP, Brazil;

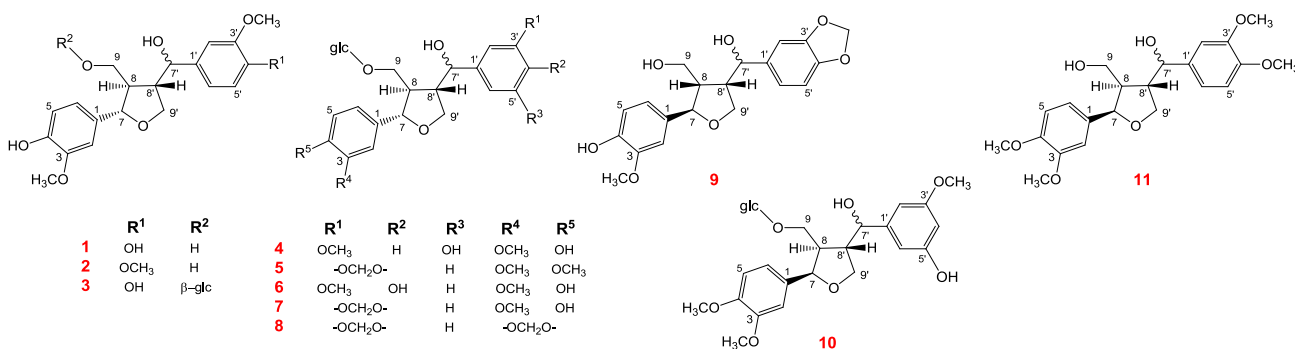
Keywords: *Aristolochiaceae*; *Aristolochia warmingii*; Tetrahydrofuran Lignans

Highlights

- Phytochemical study of leaves of *Aristolochia warmingii* Mast.;
- Isolation and structural elucidation of eleven tetrahydrofuran lignans.

Abstract

The *Aristolochia* L. genus presents 92 species distributed in Brazilian lands [1]. These species are known in the popular medicine for being abortifacients, antiophidics, stomachics, anti-inflammatories, antiasthmatics, antiseptics, expectorants, sedatives, and, recently, in slimming therapies [2, 3]. In this work, we report the isolation and structural elucidation of 11 tetrahydrofuran lignans from *A. warmingii*, which were divided into five different groups according to their relative configuration. The leaves were dried, ground and extracted successively at room temperature with hexanes, acetone and ethanol. The acetone extract was subjected to different chromatographic procedures such as CC (silica gel, hexanes-EtOAc-MeOH gradient), and semipreparative HPLC-DAD (C18, H₂O-MeOH gradient) to give 11 compounds. The structures of the compounds **1-11** were determined based on spectroscopic and spectrometric methods, mainly using ¹H and ¹³C NMR, MS, UV, IR, and CD.



Acknowledgements: IQ-UNESP-Araraquara, FAPESP, CAPES, and CNPq.

References

- [1] BARROS, F. D.; ARAÚJO, A. A. M.; FREITAS, J. 2015. **Aristolochiaceae** in **Lista de Espécies da Flora do Brasil**. Jardim Botânico do Rio de Janeiro. Available on: <<http://floradobrasil.jbrj.gov.br/jabot/floradobrasil/FB54>>. Accessed in January 2019.
- [2] FRANCISCO, C. S. et al. Classification of *Aristolochia* species based on GC–MS and chemometric analyses of essential oils. **Phytochemistry**, v. 69, n. 1, p. 168-175, 2008.
- [3] LOPES, L. M. X.; NASCIMENTO, I. R.; SILVA, T. Phytochemistry of the Aristolochiaceae family. **Research Advances in Phytochemistry**, v. 2, p. 19-108, 2001.

Structural Properties of Porous Materials by Small Angle X-ray Scattering: The Case of Covalent Organic Frameworks

Jhonny M. C. Cifuentes (PG),¹ Renata A. Maia (PG),² Leonardo A. Carneiro (PG),¹ Pierre M. Esteves (PQ),² Camilla D. Buarque (PQ)¹ and Ana M. Percebom (PQ).^{1*}

maoceron@outlook.com; apercebom@puc-rio.com

¹Chemistry Department, PUC-Rio; ²Chemistry Institute, UFRJ

Keywords: SAXS, Covalent Organic Frameworks, Characterization, Crystalline Materials.

Highlights

- Surface fractal (D_s) values for microporous COFs materials in the low- and high- q regions showed that these materials have a smooth surface.
- Mesoporous COFs materials mass and surface fractal behavior for the high- q and low- q region respectively.
- Scale-up or incorporation of a metal molecule in the pores cavities have a direct impact in the surface structure of the material according to the SAXS results.

Abstract

Covalent organic frameworks (COFs) are unique crystalline porous materials designed from organic building blocks. Their tunable functionality, high surface area, regular pore structure and chemical stability make these materials interesting candidates for potential applications in catalysis, optoelectronics, gas storage, etc.¹ Due to its complex structure, COFs require for more extensive characterization techniques, mainly electron diffraction techniques, than the usual small organic molecules. ¹³C-NMR, FTIR, BET isotherms, TGA and PXRD are usually characterization techniques that helps to elucidate COFs structure but in some cases they are not enough to fully describe the material characteristics.² Therefore, in this work we study the implementation of SAXS as a complementary technique with the aim to provide relevant information for a further detailed characterization of COFs. We found that almost all the microporous COFs samples showed surface fractals scales (D_s) of 2.1 meaning that these materials have a smooth surface while the mesoporous COFs presented mostly mass fractal behavior for the high- q region and surface fractal behavior for the low- q region showing in some cases that the incorporation of a metal molecule in the pores or the scale-up in the synthesis procedure make these materials turn from a rougher surface to a smoother one (figure 1).

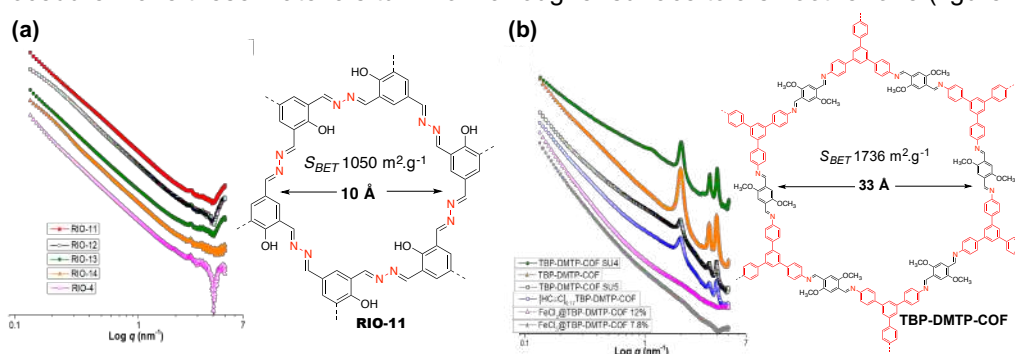


Fig. 1 SAXS of (a) Microporous COFs (b) Mesoporous COFs

Acknowledgments

The authors would like to thank to CNPq, CAPES and FAPERJ for financial support and to the national laboratory of synchrotron light (LNLS) for facilitating its facilities to carry out the SAXS experiments.

1. Côté, A. P.; El-Kaderi, H. M.; Furukawa, H.; Hunt, J. R.; Yaghi, O. M., Reticular Synthesis of Microporous and Mesoporous 2D Covalent Organic Frameworks. *J. Am. Chem. Soc.* **2007**, *129* (43), 12914-12915.

2. Howarth, A. J.; Peters, A. W.; Vermeulen, N. A.; Wang, T. C.; Hupp, J. T.; Farha, O. K., Best Practices for the Synthesis, Activation, and Characterization of Metal–Organic Frameworks. *Chemistry of Materials* **2017**, *29* (1), 26-39.

Determination of the chemical composition and its distribution according to the particle sizes in particulate matter samples.

Maria F.C. Quijano (PG),^{1*} Elizanne P.S. Justo (PG),¹ Karmel B.O. da Silva (PG),¹ Enrique R.D. Calderon (PQ),¹ Adriana Gioda (PQ),¹

mfcq890322@gmail.com; mfcq890322@gmail.com

¹Departamento de Química, PUC-Rio

Keywords: MOUDI, IC, ICP-MS, metals, water soluble ions.

Highlights

- Na, Mg, Al, Si, K, Ca and Fe were present in higher concentration in particles with a size above 1 μm .
- NH_4^+ was only detected on particles smaller than 560 nm.
- SO_4^{2-} , $\text{C}_2\text{O}_4^{2-}$, V and Ni were only detected on nanometer-scale particles.
- The organic ions, $\text{C}_2\text{H}_3\text{O}_2^-$ and CHOO^- , did not show a trend between particle size and analyte concentrations.

Resumo/Abstract

Particles present in the air could be found in solid or liquid state suspended in the atmosphere and may have sizes that vary from a few nanometers to micrometers^[1]. These particles can be classified in three modes according to particle diameter: nucleation ($<0.1 \mu\text{m}$), accumulation ($0 - 2.5 \mu\text{m}$) and coarse ($2.5 - 10 \mu\text{m}$)^[2]. For this work, the particles were collected in an 11-stage MOUDITM (0.056, 0.1, 0.18, 0.32, 0.56, 1.0, 1.8, 3.2, 5.6, 10, 18 μm) using polytetrafluoroethylene (PTFE) filters (Millipore, diameter 47 mm and pore size 0.2 μm). The samples were collected in periods of 55 h to 96 h. For the determination of the chemical composition, acid and/or aqueous extracts were analyzed for ion and metal determination using an ion chromatography (IC) (Dionex ICS 5000 Thermo Scientific, Brazil) and inductively coupled plasma mass spectrometry (ICP-MS) (Nexlon 300X PerkinElmer, USA), respectively. Chromatographic analysis showed that concentrations of CHOO^- , Cl^- , SO_4^{2-} , $\text{C}_2\text{O}_4^{2-}$ and K^+ ions were present in all particle sizes. Fig. 1 shows the distribution of ions in each of the collected particles sizes. The ICP-MS analysis showed that elements such as Na, Al, Si, K, Ti, V, Mn, Ni, Cu, Zn, Sr, Sn, Sb, Ba, and Pb presented concentration in all particles sizes. Ca was only detected in particle sizes above 1 μm .

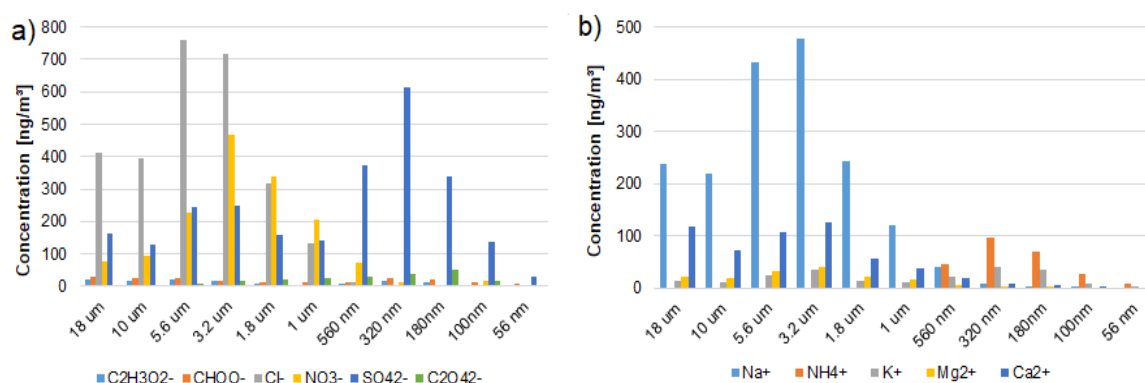


Fig. 1 Distribution of ions according to particle sizes. a) Anions detected in the samples; b) Cations detected in the samples

[1] J.H. Seinfeld, Tropospheric Chemistry and Composition: Aerosols/Particles, Second Ed, Elsevier, 2014. doi:10.1016/B978-0-12-382225-3.00438-2.

[2] A.M. Taiwo, D.C.S. Beddows, Z. Shi, R.M. Harrison, Mass and number size distributions of particulate matter components: Comparison of an industrial site and an urban background site, Sci. Total Environ. 475 (2014) 29–38. doi:10.1016/j.scitotenv.2013.12.076.

Atividade antimicrobiana de ftalidas produzidas pelo fungo endofítico *Glomerella cingulata* associado a *Virola surinamensis*

Manoel L. Lopes Júnior (PQ), Williams S. Ribeiro (PG), Steven S. Paes (PG), Fabiane T. Pinto (PG), Marivaldo J.C. Corrêa (PQ), Railda Neyva M. Araújo (PG), Luely O. Silva (PG), Giselle Maria S.P. Guilhon (PQ), Lourivaldo S. Santos (PQ).*

manoellealopes@gmail.com; lsslouri@gmail.com

¹Programa de Pós-Graduação em Química, Universidade Federal do Pará – UFPA. Belém – PA

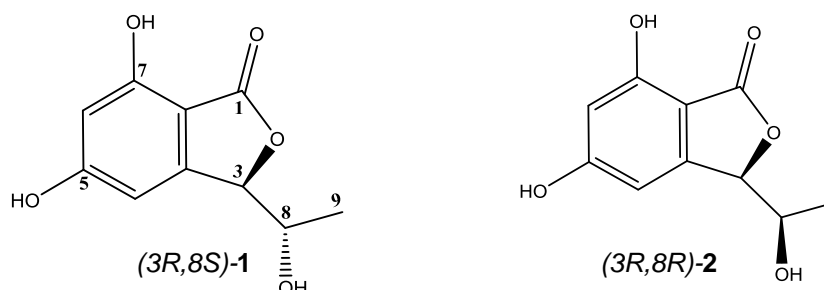
Palavras Chave: *Glomerella cingulata*, *Virola surinamensis*, Ftalidas, Fungo endofítico, Atividade antimicrobiana.

Highlights

Antimicrobial activity of phthalides produced by the endophytic fungus *Glomerella cingulata* associated with *Virola surinamensis*. Phthalides were isolated from rice cultivation of the endophytic fungus *Glomerella cingulata*. The endophytic fungus was isolated from the leaves of *Virola surinamensis* (Myristicaceae). The isolated substances were submitted to the antimicrobial tests.

Resumo

Virola surinamensis (Myristicaceae) é uma planta medicinal da Amazônia utilizada no tratamento de reumatismo, doenças de pele, asma, erisipela, câncer, gastrites e úlceras (PAIXÃO e HIRUMA-LIMA, 2000). Das folhas de *V. surinamensis* foi isolado o fungo endofítico *Glomerella cingulata*, o qual foi cultivado em arroz durante 30 dias, e a partir da biomassa foram obtidos os extratos hexânico, acetato de etila, metanol-1 e metanol-2. O extrato acetato de etila foi fracionado por cromatografia de coluna (CC) produzindo diversas frações, das quais a fração Hexano/AcOEt 60% foi submetida a Cromatografia Líquida de Alta Eficiência (CLAE) levando ao isolamento e identificação das ftalidas (3*R*,8*S*)-5,7-diidroxi-3-(1-hidroxietil)-ftalida (**1**) 12mg e (3*R*,8*R*)-5,7-diidroxi-3-(1-hidroxietil)-ftalida (**2**) 70mg. Os compostos foram identificados pela análise dos dados de RMN de ¹H e ¹³C uni e bidimensionais e comparação com dados da literatura (HEMPHILL et al, 2016). As configurações relativas entre os carbonos C3 e C8 foram determinadas pelos valores das constantes de acoplamento J_{3,8} para **1** (4,5 Hz) e para **2** (3,3 Hz) (HEMPHILL et al, 2016). Os metabólitos isolados foram submetidos aos ensaios antimicrobianos frente às cepas de *Escherichia coli* (ATCC 8739), *Staphylococcus aureus* (ATCC 25923), *Enterococcus faecalis* (ATCC 29212) e *Klebsiella pneumoniae* (ATCC 70063). A substância **1** apresentou atividade bactericida para *E. coli* (250 µg/mL) e *S. aureus* (500 µg/mL), e bacteriostática para *E. coli* (62,50 µg/mL) e para *E. faecalis* (31,25 µg/mL), enquanto que a substância **2** não apresentou atividade antimicrobiana frente as bactérias testadas.



Referencias:

HEMPHILL, C.F.P. et al. Tetrahedron Letters, 57(19), 2078-2083 (2016)

PAIXÃO, L. B.; HIRUMA-LIMA, A. C. Anais do XIV Simpósio de Plantas Medicinais do Brasil, p. 109, 2000.

Agradecimentos

CAPES, CNPQ, UFPA, PPGQ

42ª Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química: Eixos Mobilizadores em Química

Lipid binding interactions of chitosan: parameters modulating the maximum insertion pressure in lipid monolayers

Rafael de Oliveira Pedro (PQ),¹ Paulo Barbeitas Miranda (PQ),^{1*}

raolipe@usp.br; miranda@ifsc.usp.br

¹São Carlos Physics Institute (IFSC), University of São Paulo (USP), São Carlos-SP, Brazil

Keywords: Chitosan, Langmuir monolayer, SFG spectroscopy, Phospholipids, DPPC, DPPG.

Highlights

The binding of chitosan derivatives to phospholipid monolayers depends on the type of lipid headgroup.

Abstract

Chitosan is one of the most widely used biopolymers in biological applications such as drug delivery, gene therapy, tissue engineering and antimicrobial systems, and it is known that chitosan interacts with biological membranes. However, the interaction of chitosan with membrane phospholipids is not fully understood at the molecular level. Information on the parameters responsible for chitosan binding to phospholipids is still largely lacking. Langmuir monolayers at the air/water interface are useful model membrane systems for studying the molecular level interactions and parameters responsible for membrane binding. Therefore, the binding parameters to monolayers (maximum insertion pressure (MIP) and synergy) for unmodified chitosan (CH) and the more positively charged and hydrophilic chitosan functionalized with quaternary amino groups (CH-P40) were analyzed in the presence of phospholipids. The saturated anionic (DPPG) and zwitterionic (DPPC) lipids were spread on saline phosphate buffer (PBS) and used as membrane models. The interactions at the air-water interface were assessed by surface pressure-area isotherms, Brewster angle microscopy (BAM) and sum-frequency generation (SFG) spectroscopy. The parameter synergy indicates how much the adsorption of a soluble component is affected by increasing the initial surface pressure of the lipid film. Negative/positive values suggest an unfavorable/favorable binding. According to MIP and synergy parameters (Table 1), the interactions of chitosan samples with DPPC film depend on the physical state of the monolayer. The fluid liquid-expanded (LE) phase of DPPC monolayer provides enough space and exposes the lipid tails to the subphase, inducing the adsorption of both chitosan samples into the monolayer due to hydrophobic interactions. However, they are gradually expelled as the lipid film gets organized at increasing pressures, with a more pronounced effect for the more hydrophobic CH derivative (Fig. 1). For DPPC monolayers in the liquid-condensed (LC) phase, chitosan binding occurs independently of its surface pressure for both chitosan samples (synergy $\cong 1$). They also interact synergistically with DPPG and there are no differences between the LE and LC phases. SFG spectroscopy shows that chitosan samples do not significantly change the packaging of DPPC film in the LC phase, probably due to the absence of electrostatic interactions between the polymer and the zwitterionic polar region of the lipid. On the other hand, the DPPG monolayer is more disorganized by chitosan samples, possibly due to the electrostatic interactions that occur between negative charges of the lipid and positive charges of chitosan. Therefore, the results show that the insertion of chitosan into biological membranes depends on the type of phospholipid headgroup.

| Sample | Lipid | Physical state | MIP | Synergy |
|--------|-------|----------------|----------------|-----------------|
| CH | DPPC | LE | 7.6 ± 0.4 | -1.5 ± 0.5 |
| CH | DPPC | LC | - | 0.96 ± 0.04 |
| CH-P40 | DPPC | LE | 8.2 ± 0.2 | 0.37 ± 0.05 |
| CH-P40 | DPPC | LC | - | 0.99 ± 0.02 |
| CH | DPPG | Independent | 24.1 ± 0.8 | 0.47 ± 0.03 |
| CH-P40 | DPPG | Independent | 29.9 ± 0.7 | 0.54 ± 0.01 |

Table 1: Summary of the values of MIP and synergy of chitosan samples in the presence of DPPC and DPPG at 21° C.

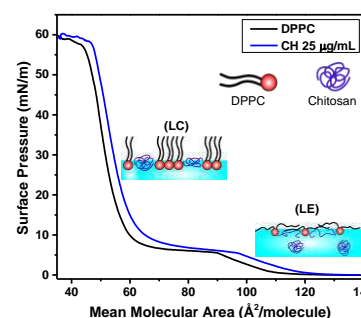


Fig. 1: Surface pressure-area isotherms of chitosan with DPPC.

Acknowledgments

FAPESP (2017/03503-4, 2018/02819-0), IFSC/USP, Grupo de Polímeros “Bernhard Gross”.

Comparison of biomimetic oxidation of isorientin and orientin using Jacobsen's catalyst and [Mn (3MeOSalen)Cl] as a novel catalyst.

Mariane B. Chagas (PG),¹ Emanuel J. Ferreira (PG),¹ Jovelina S.F. Alves (PG),¹ Anallicy S. Paiva (PG),² Daniel L. Pontes (PQ),² Silvana M.Z. Langassner (PQ),¹ Leandro S. Ferreira (PQ).^{1*}

lean_sf@yahoo.com.br; lean_sf@yahoo.com.br

¹Departamento de Farmácia, UFRN; ²Departamento de Química UFRN

Keywords: orientin, isorientin, Salen complexes, Jacobsen's catalyst, [Mn (3MeOSalen)Cl], biomimetic reactions.

Highlights

The biomimetic reactions using Jacobsen's catalyst and [Mn(3MeOSalen)Cl] as a novel catalyst revealed that the isomers, orientin and isorientin, had formed different products for the same catalyst.

Abstract

Introduction: Orientin and isorientin are C-glycosidic flavonoids widespread in many plant species and are considered markers of *Passiflora edulis* var. *flavicarpa* Degener¹. These isomers was reported also in the literature for their various pharmacological properties as antioxidant, anti-Alzheimer's disease and anti-diabetic². In this way, the evaluation and characterization of the *in vitro* metabolism of these flavonoids are important to guarantee the security in the use of pharmaceutical preparations containing these compounds. The phase I biotransformation reactions were simulated using a Jacobsen's catalyst and [Mn(3MeOSalen)Cl] that had not yet been used in biomimetic reactions.

Results and discussion: Orientin and isorientin were isolated from the hydroethanolic extract of *P. edulis*. These flavonoids were oxidated separately in biomimetic reaction in different proportions containing one oxidant, *m*-CPBA or PhIO, and one catalyst, Jacobsen's catalyst (Mn (Salen)) or [Mn (3MeOSalen) Cl]. The [Mn (3MeOSalen) Cl] was synthesized and characterized by spectroscopic techniques for this study. The reactions were monitored by UPLC-DAD after 3h, 4,5 h and 24 h. The best performance was optimized showing by UPLC-DAD and HPLC-MS/MS (ESI-TOF/TOF) that the isomers has different reactivity forming up to 3 products for orientin and up to 5 for isorientin. For both flavonoids, the catalyst [Mn (3MeOSalen) Cl] formed a greater number of compounds and with an addition of one or two atoms of oxygen, while the Jacobsen's catalyst just formed compounds with an addition of only one oxygen atom. This could be explained by the higher oxidation potential of [Mn (3MeOSalen) Cl] demonstrated by the electrochemical oxidation study performed after its synthesis. The products with addition of one oxygen had the formation of epoxides in C-ring. The products with two oxygens addition had, besides the formation of epoxide in C-ring, the incorporation of the second oxygen in the glycosidic part. The formation of epoxides are common in biomimetic reactions and may represent a risk for safety if they are found in *in vivo* studies due to its high reactivity.

Conclusion: The reactions of isorientin and orientin revealed that the isomers have different reactivity. The flavonoid isorientin has formed more products than orientin. Also the catalyst [Mn (3MeOSalen) Cl], that has higher oxidation potential, had formed products with addition of one or two oxygens while the Jacobsen's catalyst has showed only products with one oxygen. The products were characterized as epoxides which deserve concern due to its high reactivity. Thus, this study may serve as a basis for further pharmacological and toxicological studies that confirm the presence of this putative phase I metabolites and ensure safety in the use of plant products that have orientin and isorientin as markers.

References

1. Ayres, A.S.F.S.J. et al., Rev. Bras. Farmacog. v. 25, p. 499–505, 2015. DOI: 10.1016/j.bjp.2015.06.007.
2. Choi, J. S. et al, Arch. Pharm. Res. v. 37, p. 1354–1363, 2014. DOI:10.1007/s12272-014-0351-3

Acknowledgments

To CNPq, Capes and UFRN for supporting this work.

Área: QPN

Nº de Inscrição: 00588

Mycotoxins produced by *Aspergillus* sp. (Rr3C1) an endophytic fungus isolated from the leaves of *Paspalum maritimum*

Railda Neyva M. Araújo (FM),² Williams da Silva Ribeiro (PG),¹ Fabiane T. Pinto (PG),¹ Michel de M.M. dos Santos (IC),¹ Marivaldo José C. Corrêa (PQ),¹ Manoel Leão Lopes Junior (PQ),¹ Giselle Maria S. P. Guilhon (PQ),¹ Lourivaldo S. Santos (PQ).^{1*}

raildamoreira@hotmail.com; lsslouri@gmail.com

¹Program of Post-graduation in Chemistry, ICEN, Federal University of Pará, CEP 66075, Belém-PA, Brazil; ²E.E.M.M. Agostinho Moraes de Oliveira-Inhangapi-PA, SEDUC-PA.

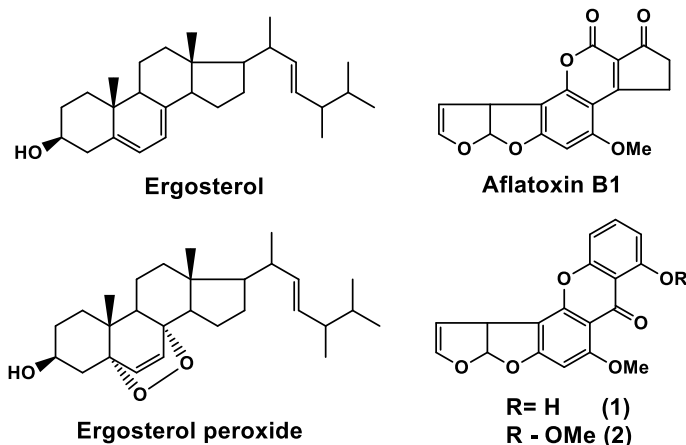
Keywords: Mycotoxins, *Aspergillus*, *Paspalum maritimum*, Sterigmatocystin, Aflatoxin B1, Endophytic fungus.

Highlights

The mycotoxins aflatoxin B1, sterigmatocystin and O-methyl-sterigmatocystin were isolated from the culture (rice) of the endophytic fungus *Aspergillus* sp. (Rr3C1). The endophytic fungus was isolated from the leaves of *Paspalum maritimum*.

Abstract

Mycotoxins (from the Greek words “mykes”: fungus and “toxicum”: poison) which mean fungus and poison are toxic secondary metabolites of low molecular weight produced by filamentous fungi. They contaminate various agricultural commodities either before harvest or under post-harvest conditions and cause a toxic response when are ingested, inhaled or absorbed through the skin by humans and animals (DÍAZ NIETO et al, 2018). Sterigmatocystin (1) is a mycotoxin of particular interest due to being a precursor of Aflatoxin B1, the most potent mycotoxin known. The mycotoxins can be produced by fungal species phylogenetically and phenotypically different such as *Aspergillus flavus*, *A. parasiticus*, *A. toxicarius*, *A. nomius*, *A. pseudotamarii*, *A. zhaoqingensis*, *A. bombycis*, among others. Recently, Díaz Nieto et al. (2019) developed a third-generation biosensor to determin sterigmatocystin. In this work, we isolated and identified the steroids ergosterol and ergosterol peroxide, and the mycotoxins aflatoxin B1, sterigmatocystin (1) and O-methyl-sterigmatocystin (2) from the culture of the fungus *Aspergillus* sp. (Rr3C1) in solid medium (rice), after 30 days. The fungus was isolated as endophytic from the leaves of *Paspalum maritimum*. The substances were identified by uni and bidimensional ¹H and ¹³C-NMR, and comparison with literature data (ASHLEY et al., 1987).



References

- Díaz Nieto, C. H. et al. *Food and Chem. Toxicol.*, 118, 460-470 (2018).
 Díaz Nieto, C. H. et al. *Talanta*, 194, 253-258 (2019).
 Ashley, D. L. et. al. *J. Agric. Food Chem.*, 35, 782-785 (1987).

Acknowledgments

CNPq, CAPES, UFPA

[Ln(18C6)(L'/L'')]Cl₃ and [Ln(18C6)(μ-L'')Ni(dbm)₂] complexes: synthesis and photoluminescent study.

Rodolpho A.N. Silva (PG),^{1*} Marian R. Davolos (PQ),¹ Sergio A.M. Lima (PQ),² Karina P.M. Frim (PQ),³ Ana M. Pires (PQ),^{1,2}

Ronesta13.rn@gmail.com;

¹Departamento de Química Geral e Inorgânica, IQ-UNESP; ²Departamento de Química e Bioquímica, FCT-UNESP;

³Centro de Ciências Naturais e Humanas, UFABC.

Keywords: europium(III), gadolinium(III), nickel(II), luminescence spectroscopy, rare-earth ions, bimetallic.

Highlights

Synthesis and luminescent properties of homonuclear lanthanoid ether-crown complexes as precursors for novel heteronuclear/bimetallic compounds based on the lanthanoid complex coordinated to nickel(II) diketonate.

Abstract

Trivalent lanthanoid ions (Ln) have been used in the design of optical devices due to their narrow f-f emission bands, that are prohibited by some selection rules. A way to relax these rules is to coordinate these ions with organic ligands [1] and/or metal complexes of *d* block, which can contribute to *J*-values mixing through the spin-orbital coupling, allowing an increase in the compounds emission. In this study, the ether-crown ligand 18C6(1,4,7,10,13,16-hexaoxacyclooctadecane) was firstly coordinated with Eu(III) or Gd(III) ions, yielding [Ln(18C6)(H₂O)_{*n*}]Cl₃, and then water molecules in the coordination sphere were replaced by bpy(2,2'-bipyridine) or bpm(2,2'-bipyrimidine) ligands, Fig.1. The Eu(III) or Gd(III) complexes containing bpm were reacted with [Ni(dbm)₂] in order to yield bimetallic compounds. FTIR results support the effective coordination of the ligands to the metals and the increase of the molar absorptivities in the UV-Vis spectra when comparing free ligands and complexes also reinforces the obtaining of the desired compounds. Gd(III) complexes emission spectra allowed the triplet state evaluation in each case, and the different emission spectra profile of the Eu(III) complexes, Fig.2, suggest a significant variation of the symmetries of the systems studied. The bpy ligand transfers energy more effectively than bpm, since the ligand emission is still observed in the complex spectrum with bpm. Finally, simulations using semi-empirical methods suggest a significant increase in quantum efficiency values for all complexes when compared to the precursor [Eu(18C6)(H₂O)_{*n*}]Cl₃, although a relative decrease after the coordination of Ni(II) in the bimetallic one is observed.

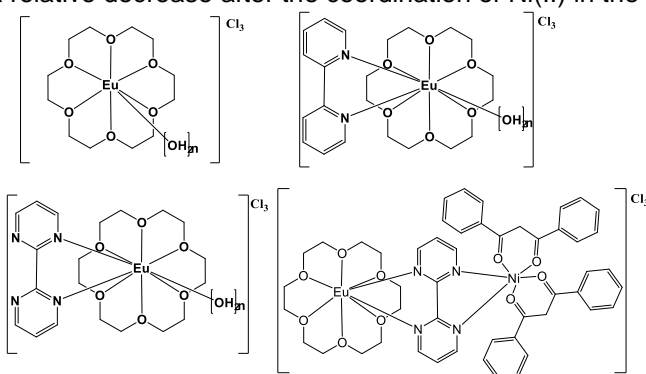


Fig. 1: Suggested structure of the synthesized complexes.

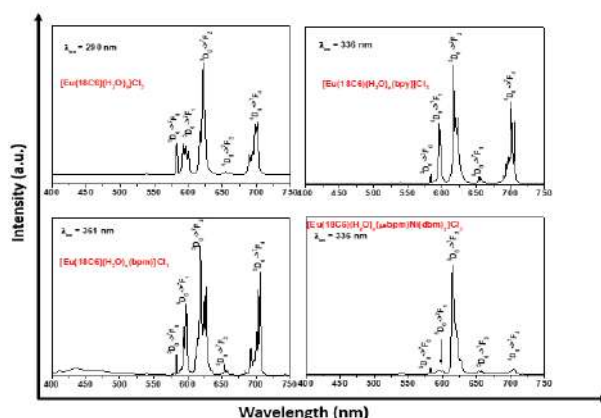


Fig. 2: Emission spectra of the Eu(III) complexes.

Acknowledgments

FAPESP (2018/08978-3); LML (IQ-UNESP); CNPQ (307385/2015-9); CAPES.

References

[1] Mônica F. Belian et al. J. of Coord. Chem. Vol. 60, Nº. 2, 2007, 173–183.

42ª Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química: Eixos Mobilizadores em Química

Continuous methylene blue biosorption onto *Fucus vesiculosus*

Yuri A. R. Lebron (IC)¹, Victor R. Moreira (IC)¹, Bernardo L. Patto (IC)¹, Thiago N. Carvalho (IC)¹, Lucilaine V. S. Santos (PQ)^{1,2}

yuri.lebron@outlook.com; luclainevaleria@yahoo.com.br

¹Department of Chemical Engineering, Pontifical Catholic University of Minas Gerais, P.O. Box 1686, 30535-901 Belo Horizonte, MG, Brazil

²Department of Sanitary and Environmental Engineering, UFMG, 6627 Antônio Carlos Avenue, School of Engineering, room 4544 – Belo Horizonte – Brazil

Keywords: Column biosorption, brown algae, methylene blue, scale up.

Highlights

Fucus vesiculosus was used as an effective biosorbent in continuous mode. Thomas and Yan models were appropriate for data analysis. The process was scaled up using the Thomas model parameters.

Abstract

It is estimated that over 10,000 different dyes and pigments are used industrially, and over 7×10^5 tons of synthetic dyes are annually produced worldwide [1]. Thus, a huge amount of effluent containing these compounds is produced. Biosorbents are considered low cost and have advantages like greater selectivity when compared to ion exchange and activated carbons. Thus, the study aimed at the use of a column biosorption process using *Fucus vesiculosus* (algae) for methylene blue remediation. Thomas ($R^2 = 0.996$) and Yan ($R^2 = 0.998$) models were fitted (Figure 1) and the results obtained are presented in Table 1. The maximum biosorption capacity calculated was 1.33 and 1.32 $\text{kg}_{\text{methylene blue}}/\text{kg}_{\text{algae}}$ for Thomas and Yan's model respectively. From Thomas parameters, the process was scaled up aiming at the treatment of 1 m^3 of effluent per day. The algae mass required was obtained using the Thomas model considering the breakthrough volume corresponding to 5% of the initial concentration (C_0) and parameters presented in Table 1. Given a diameter, the height was calculated considering the material apparent density ($203.61 \text{ kg}/\text{m}^3$). The final operating conditions of the scaled up biosorption column were obtained and presented in the Table 1. These conditions guarantee a final effluent with maximum methylene blue concentration of 1.5 mg/L.

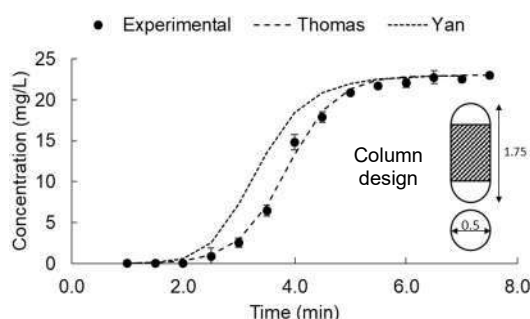


Figure 1: Biosorption breakthrough curve.

From Thomas parameters, the process was scaled up aiming at the treatment of 1 m^3 of effluent per day. The algae mass required was obtained using the Thomas model considering the breakthrough volume corresponding to 5% of the initial concentration (C_0) and parameters presented in Table 1. Given a diameter, the height was calculated considering the material apparent density ($203.61 \text{ kg}/\text{m}^3$). The final operating conditions of the scaled up biosorption column were obtained and presented in the Table 1. These conditions guarantee a final effluent with maximum methylene blue concentration of 1.5 mg/L.

| Thomas' model | | | Yan's model | | |
|--|------------------|----------|----------------------------------|---------------|----------|
| K_{th} ($\text{m}^3/\text{kg}\cdot\text{day}$) | q_{th} (kg/kg) | R^2 | α_y | q_y (kg/kg) | R^2 |
| 82.01 | 1.33 | 0.996 | 8.56 | 1.32 | 0.998 |
| Column operational conditions | | | | | |
| | Pilot | Scale up | | Pilot | Scale up |
| Load (kg) | 0.002 | 22.819 | Height (m) | 0.039 | 1.752 |
| Volume (m^3) | 9.823E-06 | 0.112 | Flow (m^3/day) | 0.043 | 10.000 |
| Diameter (m) | 0.018 | 0.500 | C_0 (mg/L) | 23 | 30 |

Table 1: Fitted model's parameters and operating conditions of the pilot and stepped column.

Acknowledgments

This research was funded by Coordination of Superior Level Staff Improvement (CAPES); National Council for Scientific and Technological Development (CNPq); Foundation for Research Support of the State of Minas Gerais (FAPEMIG); and the Pontifical Catholic University of Minas Gerais (PUC Minas).

References

[1] Y.A.R. Lebron, V.R. Moreira, L.V.S. Santos, R.S. Jacob, Remediation of methylene blue from aqueous solution by *Chlorella pyrenoidosa* and *Spirulina maxima* biosorption: Equilibrium, kinetics, thermodynamics and optimization studies, J. Environ. Chem. Eng. 6 (2018) 6680–6690. <https://doi.org/10.1016/j.jece.2018.10.025>.

Área: AMB

Nº de Inscrição: 00591

Determination of metal species in *Hoplias intermedius* fish tissues by inductively coupled plasma atomic emission spectrometry (ICP OES)

Lúrian A.D.D. Cruz (IC)^{1*}, Danielle C. Schnitzler (PQ)²

lurian.2016@alunos.utfpr.edu.br; daniellec@utfpr.edu.br

^{1,2}Academic Department of Chemistry and Biology, UTFPR

Keywords: *Aquatic Environment, Metallic Species, Hoplias Intermedius*

Highlights

Aquatic organisms are capable of concentrating metal species above the concentrations found in the water column. Humans, who make up the top of the food chain, are most affected. In this context, the work aims to extract and determine the metals (Al, Pb and Ti) in liver and muscle samples of the *Hoplias intermedius* fish laboratory. Known concentrations of the metals in the fish habitat were added. After 70 days, the fish was desiccated and conditioned at -80°C. The extraction procedure was done based on the EPA 3050B protocol. The digestion was done in two ways for level of comparison, one in hot plate and one in the aid of microwaves, both in triplicate and with addition of known concentrations to verify the % recovery. The recovery results were below expected in both forms of digestion, showing a somewhat better result for aluminum in general microwave digestion. Thus, it was noted the need to adapt both methods and then obtain more satisfactory results for all metals analyzed.

Abstract

Aquatic organisms are capable of concentrating metal species above the concentrations found in the water column. Humans, who make up the top of the food chain, are most affected. In this context, the work aims to extract and determine the metals (Al, Pb and Ti) in three muscle samples of the *Hoplias intermedius* fish laboratory. Known concentrations of the metals in the fish habitat were added. After 70 days, the fish was desiccated and conditioned at -80°C. The extraction procedure was done based on the EPA 3050B protocol. The digestion was done in two ways: (i) in conventional hot plate and (ii) microwave aid. The two methodologies were developed in triplicate and with a new addition of standard to verify the % recovery. For the recovery study the addition of metal standard was performed in the fish habitat as well as in the sample preparation process. The analytical curve was performed in the range of 0 to 10 mg L⁻¹, obtaining $y = 10,781.3 + 96,395.3x$ for Al; $y = 1,194.2 + 4,000.7x$ for Pb and $y = 147,381.2 + 352,693.3x$ for Ti. Obtaining the following recoveries:

| | Concentration added ($\mu\text{g g}^{-1}$) | Heating plate | Concentration added ($\mu\text{g g}^{-1}$) | Microwave |
|----|--|---------------|--|---------------|
| Ti | 54.84 at 170.45 | -4.8% at 3.7% | 66.08 at 194.38 | -26% at 6.8% |
| Al | 54.84 at 170.45 | 49.4% at 117% | 66.08 at 194.38 | 65.4% at 132% |
| Pb | 109.68 at 340.91 | 67% at 74% | 132.16 at 388.77 | 62% at 71.8% |

The unsatisfactory and different results between the metals in both forms of digestion are due to the different properties of each metal and the behavior against biological matrices. Thus, it was noted the need to adapt both methods and then obtain more satisfactory results for all metals analyzed.

References

SHAW, B. J. A simplified method for determining titanium from TiO₂ nanoparticles in fish tissue with a concomitant multi-element analysis. *Chemosphere*, 2013.

Acknowledgments

Ministério público do Trabalho do Estado do Paraná; Universidade Federal do Paraná; a Universidade Federal de Santa Catarina; a Universidade Tecnologia Federal do Paraná; LEMASSA.

Área: EDU

Nº de Inscrição: 00592

As mulheres no Ensino Superior de Química: um estudo sobre a representação feminina no cargo docente de uma Universidade Pública

Gabriela Ferreira (IC)^{1*}, Alicia A. Souza (IC)¹, Iolanda P. Araújo (IC)¹, Camila Silveira (PQ)¹

*gabriela.f@ufpr.br

¹Departamento de Química, UFPR

Palavras-chave: *Feminismo, Sexismo, Desigualdade, Gênero, Docentes, Carreira.*

Highlights

Women in Chemistry Higher Education: a study about the female representation in teaching positions at a Public University. Gender inequality is a huge barrier in public universities and in STEM. This work, through dialogue and theoretical background, points out the necessity of immediate change about this question.

Resumo/Abstract

A desigualdade de gênero é um problema a ser enfrentado nas diferentes esferas da sociedade¹. A Universidade Pública está inserida neste contexto de divisão sociocultural dos gêneros, que é resultado da construção histórica, onde o masculino está no topo da hierarquia em detrimento do feminino². Sendo assim, o sexismo se apresenta de diferentes formas, em especial, dentro das instituições de ensino. Quanto às Ciências Exatas, existe uma sub-representação feminina causada pela presença de obstáculos na trajetória acadêmica e científica das mulheres constituindo um fenômeno chamado "labirinto de cristal"², que representa as complexas problemáticas que impedem a ascensão, ritmo e permanência na carreira. Diante do exposto, esta pesquisa possui o intuito de investigar a presença – ou ausência – das mulheres como professoras no Ensino Superior de Química. Para tal, foram constituídos dados por meio da página virtual do Departamento de Química de uma Universidade Pública Federal, referentes ao ano de 2018, sobre o corpo docente que o compõe. A análise comparativa destes dados se encontra na Tabela 1, sendo o gênero feminino representado pela letra F e o masculino pela letra M. A organização das informações também está disposta de modo que as Áreas da Química pudessem ser analisadas quanto à distribuição pelos gêneros.

Tabela 1: Docentes do Departamento de Química por Área e por gênero.

| Ensino de Química | | Físico-Química | | Química Orgânica | | Química Inorgânica | | Química Analítica | |
|-------------------|---|----------------|---|------------------|----|--------------------|---|-------------------|----|
| F | M | F | M | F | M | F | M | F | M |
| 3 (75%) | 1 | 5 (50%) | 5 | 6 (35%) | 11 | 4 (33%) | 8 | 4 (29%) | 10 |

Fonte: Autoras, 2019

As mulheres representam aproximadamente 38% do total de docentes. Observando-se as áreas isoladamente, somente no Ensino de Química elas se apresentam como maioria, mas conforme valor absoluto, ainda são poucas, sendo a área com menor número de mulheres e de docentes, no geral. Já nas áreas de Química Orgânica, Química Inorgânica e Química Analítica, as professoras são minoria. E somente na área de Físico-Química pode ser observada uma igualdade. Assumindo-se que a ocupação do cargo de docente em uma universidade pública é uma forma de ascensão na carreira e um espaço de poder, "o sexismo [...] reflete, também, uma estrutura de poder, cuja distribuição é muito desigual, em detrimento das mulheres" (p. 35)¹. O motivo deste fenômeno pode ser explicado pelo preconceito existente contra o gênero feminino, muitas vezes predominando afirmações machistas de que as mulheres não possuem as mesmas capacidades de aprendizagem que os homens³, e, além disso, ainda são feitas atribuições de características específicas ao gênero feminino que não correspondem àquelas que seriam necessárias para seguir a carreira científica, naturalizada como masculina. Reflexões como esta possibilitam a ampliação do diálogo e aprofundamento teórico que poderão subsidiar ações futuras (e urgentes) para a superação das desigualdades de gênero nas Ciências.

Agradecimentos/Acknowledgments

Fundação Araucária, PIBIS, PRAE, UFPR, pela Bolsa e apoio financeiro.

¹SAFFIOTI, H. I. B. *Gênero, patriarcado, violência*. 1 ed. São Paulo: Perseu Abramo, 2004.

²LIMA, B. S. *Estudos Feministas* 21 (3), 2013.

³LAZZARINI, A. B. *et al. Ciência em Extensão* 14 (2), 2018.

Síntese e caracterização de um composto de coordenação de cobre(II) que atue como eletrocatalisador em reações de redução de oxigênio

Thaís P. Dionízio (PG),^{1*} Felipe P. Silva (IC),¹ Fagner S. Moura (PG),¹ Matheus M. Diniz (IC),¹ Marta E. Medeiros (PQ),¹ Annelise Casellato (PQ).¹

thais_dionizio@yahoo.com.br

¹Universidade Federal do Rio de Janeiro

Palavras Chave: Complexo de Cobre(II), Eletrocatalisador, Pilhas a Combustível.

Highlights

Synthesis and characterization of a copper (II) coordination compound that acts as an electrocatalyst in oxygen reduction reactions.

A Cu²⁺ complex was synthesized and characterized by IR, UV-Vis and cyclic voltammetry. Through this compound a modified electrode was obtained and tested as an electrocatalyst in RRO.

Resumo/Abstract

O desenvolvimento tecnológico requer grande demanda de energia, acarretando na liberação de quantidades substanciais de poluentes. O uso de soluções limpas como fontes renováveis no lugar dos combustíveis fósseis pode diminuir o impacto ambiental. As Pilhas a Combustível são dispositivos que utilizam reações de oxirredução espontâneas convertendo a energia química liberada em eletricidade, apresentando como principal produto de reação a água. Entretanto, o uso da platina para catalisar reações que possuem uma cinética muito lenta, como a reação catódica de redução de oxigênio (RRO), tornam alto o preço deste dispositivo. Isto posto, a finalidade deste trabalho foi sintetizar e caracterizar um complexo de cobre(II) com ligante N, O - doador e avaliar sua atividade eletrocatalítica em RRO em meio básico, através da obtenção de eletrodo de grafite modificado (EGM). O ligante foi sintetizado a partir da reação entre 5-metoxi-salicilaldeído e a etanolamina e, em seguida, coordenado a um íon cobre (II). O complexo foi caracterizado por espectroscopia no IV, UV-Vis e voltametria cíclica (VC), técnicas que apresentaram bandas características dos grupos funcionais, indicaram a coordenação com o metal e apresentaram picos redox característicos do cobre (Figura 1), respectivamente. O EGM foi preparado misturando-se grafite e complexo (50% em massa) e teve sua reatividade medida por VC. Através dos resultados, verificou-se que o EGM teve uma boa atividade, com um considerável aumento do valor de densidade de corrente (-13,0303 mA.cm⁻²) e potencial (-0,5964 V) sendo, portanto, um eletrodo promissor à RRO.

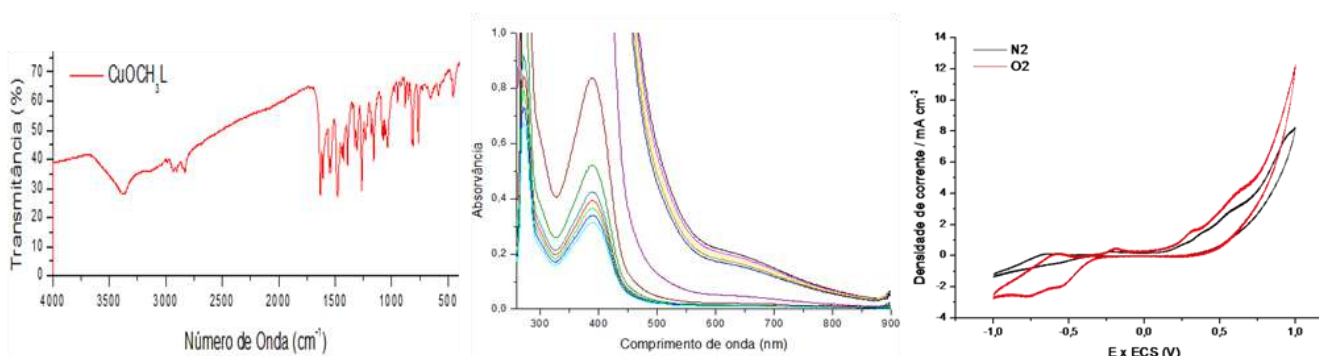


Figura 1. a) Espectro na região do IV, b) espectro na região do UV-vis e c) Voltamograma cíclico.

Pentacyclic triterpenes and the *in vitro* leishmanicidal of *Vochysia divergens* Pohl stem extract

Letícia P. Pimenta (PG),^{1*} Rita C. N. Pedroso (PG),¹ William P. Souza (PG),² Alexander B. Valerino-Diaz (PG),³ Lourdes C. dos Santos (PQ),³ Marcos A. Soares (PQ),² Lizandra G. Magalhães (PQ),¹ Márcio L. A. Silva (PQ),¹ Wilson R. Cunha (PQ),¹ Patrícia M. Pauletti (PQ),¹ Ana H. Januário (PQ),¹

leticia_pimenta94@hotmail.com

¹Natural Products Research Group, University of Franca, Franca, SP, 14404-600, Brazil; ²Department of Botany and Ecology, University Federal of Mato Grosso, Cuiabá, MT, 78060-900, Brazil; ³UNESP-São Paulo State University, Chemistry Institute-Araraquara, SP, 14800-901, Brazil

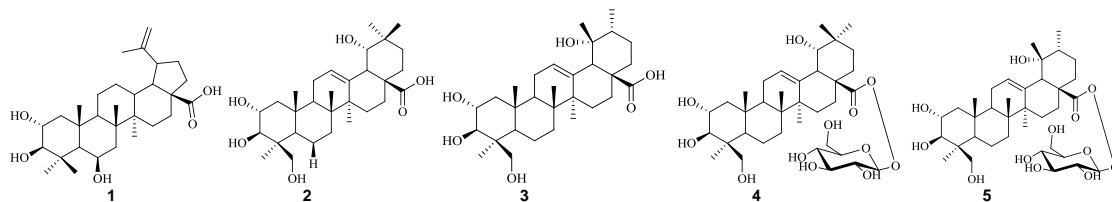
Keywords: HPLC-RI, Leishmanicidal activity, Pentacyclic triterpene, Vochysiaceae.

Highlights

The ethanolic extract of *Vochysia divergens* stem was evaluated for leishmanicidal activity against the promastigote forms of *Leishmania amazonenses*.

Abstract

Vochysia divergens Pohl is used in folk medicine for the treatment of respiratory gastrointestinal diseases, this species occurs in the Pantanal biome. Literature data have revealed the presence of the triterpenes oleanane, ursane, and lupan in the stem of this species¹. In a previous study, our research group showed that the leaves ethanolic extract of this species reduces the motor activity of *Schistosoma mansoni* adult worms in 100% within 24 h at 100 µg/mL². Continuing our investigation on the antiparasitic potential of *V. divergens*, this work aimed to isolate the triterpenes by HPLC-RI and to evaluate the leishmanicidal activity of the ethanolic extract from *V. divergens* stem (VC). The triterpenes divergioic acid (**1**) and sericic acid (**2**) and a mixture containing 24-hydroxytormentic acid (**3**), 4-*epi*-sericoside (**4**), and 4-*epi*-niga-ichigoside F1 (**5**) were obtained from a VC fraction after it was submitted to sephadex column and HPLC-RI. The triterpene structures were determined by NMR experiments (1D and 2D). The leishmanicidal activity against *Leishmania amazonensis* promastigote forms was evaluated for the VC extract at concentrations of 3.12 to 50 µM in 24 hours. The assay showed that VC extract has a leishmanicidal potential for parasite death with IC₅₀ values of 12.32 µg/mL. In the cytotoxic assay the IC₅₀ with normal line of human lung fibroblast cells, GM0792A was higher than 1,250 µg/mL. The results obtained demonstrate that VC extract caused parasite death, studies to evaluate the leishmanicidal potential of VC compounds are underway.



¹ *Phytochem Rev.*, 10, 413-429, 2011.

² *Adv Pharmacoepidemiol Drug Saf*, 4, 2015.

Acknowledgments

CAPES, CNPq, FAPESP.

Área: INO Nº de Inscrição: 00595

Complexo de paládio(II) derivado do acetato de paládio, *p*-dimetilaminobenzaldeído e *N,N*-dietil-*p*-fenilenodiamina

Wladimir P. Duarte Badaró (IC),^{1*} Luís Eduardo Sarto (PQ),² Eduardo Tonon de Almeida (PQ),¹
(wladimirbadaro@hotmail.com; luis.sarto@ifsuldeminas.edu.br)

¹Instituto de Química – UNIFAL-MG; ²IFSULDEMINAS – Campus Machado

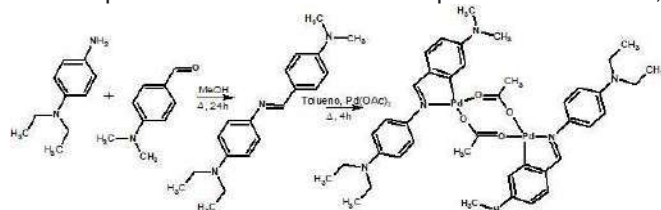
Palavras Chave: Complexo de paládio(II), Bases de Schiff, RMN, Infravermelho e Termogravimetria.

Highlights

Palladium (II) complex derived from palladium acetate, *p*-dimethylaminobenzaldehyde and *N,N*-diethyl-*p*-phenylenediamine: A new palladium(II) complex, containing a Schiff's base ligand was synthesized. This complex was characterized by IR, NMR, elemental analysis (CHN) and thermal analysis (TG-DTA).

Resumo

A Química Bioinorgânica de compostos contendo paládio(II) avançou significativamente nos últimos anos, principalmente pela semelhança química estrutural entre o íon Pd (II) e o Pt (II), sendo o último a base de vários complexos utilizados na Química Medicinal. Embora ambos compartilhem uma configuração d^8 , sua reatividade é bem diferente, sendo os complexos de paládio mais lábeis que os da platina, com um taxa de câmbio cerca de 10^5 vezes maior. Para minimizar os efeitos dessa labilidade, ligantes fortemente quelantes têm sido explorados de modo a obter complexos de maior estabilidade cinética. Nesse contexto, as bases de Schiff ganham destaque por serem uma importante classe de ligantes quelantes. Nesse trabalho foi obtido um novo complexo ciclometalado de paládio(II) contendo bases de Schiff derivada de *N,N*-dietil-*p*-fenilenodiamina e *p*-dimetilamino-benzaldeído. A metodologia sintética é mostrada na figura abaixo. O ligante e o complexo foram caracterizados por técnicas de IV, RMN e TG-DTA. Os principais resultados estão nas tabelas abaixo. A análise espectroscópica do infravermelho do ligante mostrou que as bandas referentes aos estiraamentos de N-H da amina e de C=O do aldeído haviam desaparecido e surgiu um novo sinal referente à imina, indicando a formação deste ligante. Ao utilizar essa base de Schiff para realizar a complexação com o acetato de paládio observou-se o deslocamento da banda da imina e na carbonila do acetato, indicando a ligação em ponte. A análise de RMN indica que houve também o deslocamento dos sinais referentes à imina em ^1H e ^{13}C , indicando a coordenação pelo nitrogênio. Observa-se também um desdobramento dos sinais referentes aos anéis aromáticos, tanto no ^{13}C



| Composto | Paládio (%) | | IV (cm^{-1}) | | |
|---|-------------|-------|-------------------------|-------------------|-------------------|
| | Teo | Exp | $\nu(\text{N-H})$ | $\nu(\text{C=O})$ | $\nu(\text{C=N})$ |
| <i>N,N</i> -dietil- <i>p</i> -fenilenodiamina | - | - | 3338 | - | - |
| <i>p</i> -dimetilamino-benzaldeído | - | - | - | 1662 ¹ | - |
| Ligante BC | 0 | 0,16 | - | - | 1604 |
| Acetato de paládio (II) | 47,40 | 48,60 | - | 1607 ² | - |
| $[\text{Pd}(\text{BC})(\eta\text{-AcO})_2]$ | 23,14 | 24,42 | - | 1594 ² | 1606 |

¹= Aldeído ²= Acetato

quanto no ^1H (que também apresenta mudança no valor das integrais), o que indica a ligação do paládio com o anel aromático, formando um complexo ciclometalado. A análise das curvas TG mostra a total decomposição do ligante e a formação de um resíduo de Pd^0 na decomposição do complexo cuja massa concorda com o teor de paládio da estrutura proposta.

| Composto | RMN (ppm) | | | |
|---|---------------|---|-----------------|--|
| | ^1H | | ^{13}C | |
| | -HC=N- | Aromático | -HC=N- | Aromático |
| Ligante BC | 8.38 (s, 1 H) | 6.72 (t, 4 H) 7.20 (d, 2 H) 7.75 (d, 2 H) | 152.01 | 111.73, 112.56, 122.21, 125.30, 129.87, 141.18, 146.18, 156.08 |
| $[\text{Pd}(\text{BC})(\eta\text{-AcO})_2]$ | 7.32 (s, 2 H) | 5.89 (s, 2 H) 6.27 (d, 2 H) 6.34 (d, 4 H) 6.69 (d, 4 H) 7.02 (d, 2 H) | 167.60 | 106.48, 110.62, 115.13, 123.90, 127.84, 134.34, 137.84, 146.01, 149.53, 156.55 |

Agradecimentos

CNPq, FINEP, CAPES e FAPEMIG

Referências:

1. Trudu F, Amato F, Vañhara P, Pivetta T, Peña-Méndez EM, Havel J. Coordination compounds in cancer: Past, present and perspectives. *J Appl Biomed*. 2015;13:79-103.
2. Caires ACF, de Almeida ET, Mauro AE, Hemery JP, Valentini SR. Síntese e atividade citotóxica de alguns azido-ciclopaladados estabilizados com ligantes bifosfínicos. *Quim Nova*. 1999;22:329-34.

Sugar Decoration of Polyplexes: A Nonviral Vector Alternative for Gene Delivery

Morgana S. Zilse (IC),¹ Maitê T. Barth (IC),¹ Lindomar J. C. Albuquerque (PG),² Alex C. Alavarse (PG),² Maria C. Carlan da Silva (PQ),² Ismael C. Bellettini (PQ),^{1*} Fernando C. Giacomelli (PQ).^{2*}

morgee.sofia@gmail.com; ismael.bellettini@ufsc.br; fernando.giacomelli@ufabc.edu.br

¹Departamento de Ciências Exatas e Educação, Campus de Blumenau; ²Centro de Ciências Naturais e Humanas, UFABC.

Key-words: *gene delivery, lactose, sugar functionalization, sweet polyplexes.*

Highlights

Sugar-functionalized polyplexes as a nonviral gene delivery vector
Reduction of cytotoxicity of polymeric carrier branched polyethyleneimine (BPEI)

Abstract

The molecular therapy is an encouraging strategy for the treatment of human diseases. Particularly, gene therapies towards directing the expression of therapeutic genes to target cells are outstandingly attractive in cancer treatments. In this framework, we investigated the use of sugar-functionalized polyplexes as a nonviral gene delivery vector aiming reduction of cytotoxicity of the well-known polymeric carrier branched polyethyleneimine (BPEI). The substitution of primary amine groups by lactose residues in the BPEI chains leads to roughly twice larger polyplexes, presumably due to the large size of lactose residues (342.3 g mol⁻¹). The electrophoresis data evidence that the complete DNA condensation requires higher amounts of BPEI-Lac as compared to BPEI. Nevertheless, the sugar functionalization reduces substantially the cytotoxicity of the assemblies. Interestingly, the investigations pointed out that sugar-functionalized polyplexes are uptaken to higher extent regardless the probed cell lines. However, the levels of gene expression are maintained as compared to BPEI which is known for its golden transfection efficiency (Figure 1). We accordingly demonstrate the preparation of less cytotoxicity nanocomplexes while maintaining the gene expression as compared to BPEI. We consider these findings of due relevance to the field.

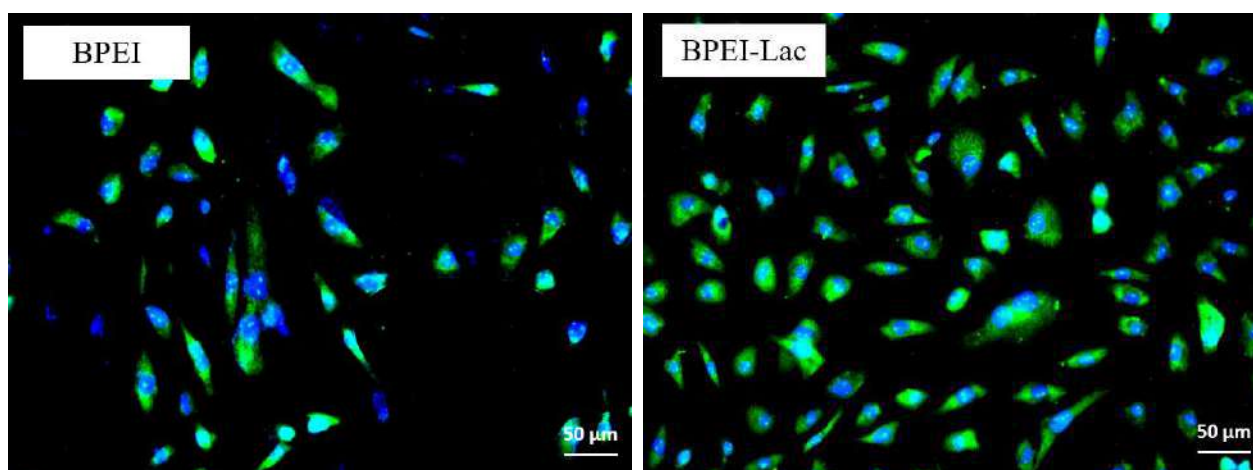


Figure 1. Fluorescence microscopy images of Telo-RF cells incubated with polyplexes at N/P 10 (produced using YOYO-1 labeled DNA).

Acknowledgments

TO FAPESP, CNPq, CEM, UFABC and UFSC.

Production of nanofibers by electrospinning using modified ethyl (hydroxyethyl) cellulose (EHEC)

Luiza G. Schluter (IC),¹ Morgana S. Zilse (IC),¹ Maitê T. Barth (IC),¹ Estela M. D. Ferreira (IC),¹ Juliana P. Dreyer (PG),² Leandro G. Nandi (PQ),² Ismael C. Bellettini (PQ),^{1*}

schluter.luiza@gmail.com; ismael.bellettini@ufsc.br;

¹Departamento de Ciências Exatas e Educação, Campus Blumenau, UFSC; ²Departamento de Química, Campus Florianópolis, UFSC

Palavras Chave: *electrospinning, nanofiber, ethyl (hydroxyethyl) cellulose*

Highlights

Production of nanofibers by electrospinning using modified ethyl (hydroxyethyl) cellulose (EHEC)
Ethyl (hydroxyethyl) cellulose was hydrophobically modified and characterized.
Higher definition and smaller diameter in nanofibers.

Abstract

Ethyl (hydroxyethyl) cellulose (EHEC) is a cellulose-derived polymer that has ethyl and hydroxyethyl groups. In this work, the EHEC was hydrophobically modified through an esterification with the dodecanoic acid (Figure 1). The product was characterized by Infrared Spectroscopy with Attenuated Total Reflectance (IR/ATR) spectra and Nuclear Magnetic Resonance (¹H NMR) that the structure of the polymer was confirmed and the degree substitution could be estimated in 8.0%. Surface tension measurements showed that the values for pure EHEC in the range of the studied concentration remained permanently constant at 55.0 mN m⁻¹, whereas the modified EHEC exhibited higher surface activity, since the surface tension decreased to 45.0 mN m⁻¹. The intrinsic viscosity was determined to be 0.37 mL mg⁻¹ and 0.39 mL mg⁻¹ for EHEC and modified EHEC, respectively. As consequence, the overlap concentration values were 2.70 mg mL⁻¹ for EHEC and 2.56 mg mL⁻¹ for modified EHEC. The nanofibers were produced with the blend of polyethylene oxide (PEO) and EHEC pure and modified EHEC. Solutions were prepared with modified EHEC (0.5%) and PEO (4.0%) and pure EHEC (0.5%) and PEO (4.0%). It was observed that the fibers obtained from the modified EHEC/PEO blend were more defined and absence of coalescence, in addition, the fibers had a mean diameter smaller than the fibers obtained from the EHEC/PEO blend (Figure 2).

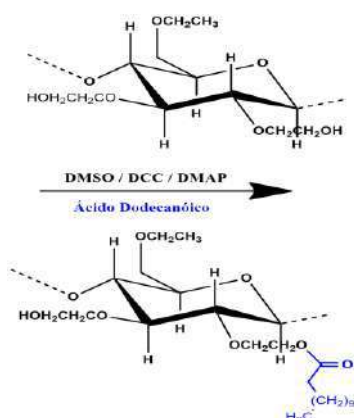


Figure 1. Synthesis of the modified EHEC.

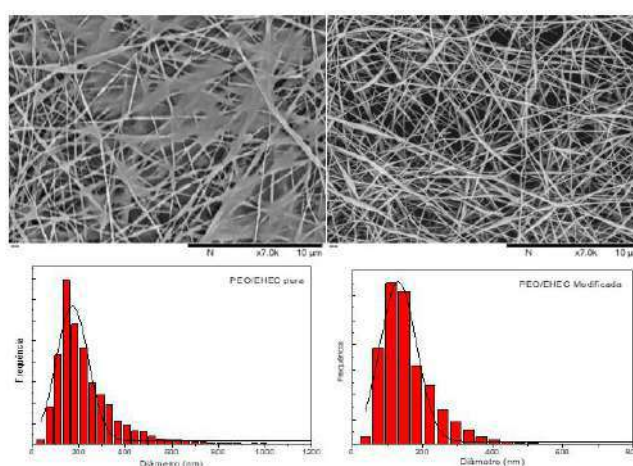


Figure 2. SEM micrograph and diameter distribution.

Acknowledgments

Ao CNPq, ao LCME e a UFSC.

Área: ANA

Nº de Inscrição: 00600

Avaliação da alteração molecular na composição química de petróleo nos estágios iniciais de contato com ambientes terrestres e aquáticos

Jandyson M. Santos (PQ),^{1,2} Julián Eduardo B. Castiblanco (PG),² Jhonattas de C. Carregosa (PG),² Alberto Wisniewski Jr. (PQ),²

jandyson.machado@ufrpe.br; albertowj@ufs.br

¹Departamento de Química, UFRPE; ²Departamento de Química, UFS

Palavras Chave: Derrames de petróleo, Óleo bruto, Espectrometria de Massas, Resinas, Impacto ambiental.

Highlights

Evaluation of the changes in the molecular composition of crude oil in the initial stages of contact with aquatic and terrestrial environments

- Study of chemical changes in resins of crude oils after a simulation of oil spills;
- We were able to identify important changes in the molecular composition of resins by FT-MS.

Resumo/Abstract

A produção e a comercialização de petróleo é um macro processo que abrange múltiplas etapas, como: exploração, refino e transporte. Nessas etapas a probabilidade de contaminação do solo e da água por petróleo é alta, sendo reconhecida como um problema global, colocando em risco a saúde humana e dos ecossistemas. Assim, a avaliação da toxicidade por derrames de petróleo no solo é de grande preocupação para a comunidade científica, cujo foco é investigar seus efeitos negativos e propor métodos viáveis de remediação ambiental. Esse estudo tem como objetivo avaliar as variações na composição molecular de óleos brutos expostos a processos de simulação de derrames em ambientes terrestres e aquáticos, durante as primeiras 72 horas de exposição, a partir da análise da fração de resinas por espectrometria de massas de ultra-alta resolução (FT-MS, *Fourier transform mass spectrometry*). Para simular os derrames, a amostra de petróleo foi misturada com solo ou areia da praia 1:40 (*m/m*), em outros experimentos, com água do mar ou água de rio 1:40 (*m/v*), sendo o sistema exposto a incidência de luz (lâmpada incandescente de 60 W), onde alíquotas do óleo foram retiradas em 1, 12, 24, 48 e 72 horas. As alíquotas foram fracionadas pelo método SARA para a obtenção da fração de resinas, que foram analisadas em um sistema de FT-MS (Exactive HCD Plus, Thermo Scientific) com analisador de massas Orbitrap, por infusão direta de uma solução de 400 ppm das resinas em tolueno:metanol (1:1 *v/v*) utilizando fonte de ionização por *electrospray* nos modos de aquisição positivo (ESI+) e negativo (ESI-). Os dados foram processados pelo software PetroMS, onde é considerado uma correspondência entre o valor de *m/z* experimental e o de *m/z* teórico da biblioteca presente quando o erro menor que 3 ppm. Então, os dados são apresentados na forma de fórmulas moleculares como $C_cH_hN_nO_oS_s$ (com $c=1-100$, $h=1-1000$, $n=1-3$, $o=1-5$ e $s=1-3$), onde por exemplo, as fórmulas com $C_cH_hN_n$ se enquadram na classe N_1 , e assim sucessivamente. Para os experimentos envolvendo derrame de óleo em solo ou areia da praia, foram encontradas para 72 h de exposição a luz, mudanças moleculares dos heteroátomos presentes nas resinas dos óleos, sendo evidenciadas tendências de aumento ou decréscimo na abundância das classes N_1 , O_1 , O_3 e NO_2 por ESI(+)-FT-MS e, as classes O_2 , N_1 , O_1 , O_3 e O_4 por ESI(-)-FT-MS. Para os experimentos envolvendo derrame de óleo em água do mar ou de rio, foi observado um aumento da oxigenação dos óleos nos dados de ESI(-)-FT-MS, devido ao aumento na abundância da classe O_2 , ou seja, aumento dos ácidos naftênicos, de modo geral, aqueles com mais de 5 anéis condensados em sua composição. Esse comportamento ocorre devido a oxigenação natural no ambiente para as classes de álcoois e aldeídos (classe O_1), que pôde ser confirmado pelo histograma de classe a partir da diminuição da classe O_1 e o aumento da classe O_2 . Foi observado ainda, que a classe de nitrogênio básico (classe N_1), constituída de cadeias carbônicas maiores que C_{50} e alta aromaticidade (DBE maior que 15), é provavelmente, mais susceptível à processos foto-oxidativos, e por essa razão, a diminuição na abundância desses compostos foi detectada. Assim, este trabalho pode servir como guia para novos estudos que visem avaliar de forma mais aprofundada os riscos para a saúde dos humanos e a natureza dos ecossistemas devido as mudanças composicionais do petróleo na condição de derrames, visando assim, bases para propor métodos de remediação rápidos e efetivos.

Agradecimentos/Acknowledgments

CNPq, CAPES, CLQM/UFS, LABMAQ/UFRPE, PETRORAS, PRPPG/UFRPE

Synthesis of new Cu(II) and Co(II) metaloligands with the oxamate derived from 3,6-Diaminoacridine

Maria Clara O. E. Souza (IC),¹ Lucas H. G. Kalinke (PQ),² Danielle C. C. Gomes (PQ).^{1*}

mclara_orioli@hotmail.com; danielle_cangussu@ufg.br

¹Instituto de Química, Universidade Federal de Goiás, UFG

Palavras Chave: oxamate, Cu(II), Co(II)

Highlights

Synthesis and characterization of the dinuclear metaloligands synthesized with Cu(II) and Co(II) metals ions, named $\text{Na}_4[\text{Cu}_2\text{L}_2]$ and $\text{Na}_8[\text{Co}_2\text{L}_3]$, respectively, from the oxamate derived from 3,6-Diaminoacridine.

Resumo/Abstract

Os ligantes do tipo oxamato são usados para promover interações metal e ligante formando metaloligantes precursores de polímeros de coordenação. Com o objetivo de sintetizar metaloligantes dinucleares de Cu(II) e Co(II), sintetizou-se primeiramente o ligante oxamato denominado L [L= 3,6-bis(oxamato)acridina] usando a 3,6-diaminoacridina e obteve-se o ligante com 42,7% de rendimento. Por ressonância magnética nuclear de hidrogênio (RMN) concluiu que praticamente toda a amina inicial foi convertida ao ligante L (FIG. 1). O espectro obtido é característico do ligante puro (500 MHz, DMSO) δ 11.20 (s, 1H), 8.94 (s, 1H), 8.64 (s, 2H), 8.12 (d, J = 9.1 Hz, 2H), 7.88 (dd, J = 9.1, 1.9 Hz, 2H), 4.36 (q, J = 7.1 Hz, 2H), 1.35 (t, J = 7.1 Hz, 3H). Na segunda etapa os complexos inéditos precursores foram sintetizados usando um meio básico. O metaloligante de Co(II) de fórmula $\text{Na}_8[\text{Co}_2\text{L}_3]$ foi sintetizado em uma estequiometria de 3:2 (L:M) e o rendimento foi de 44,28%, para o metaloligante de Cu(II) de fórmula $\text{Na}_4[\text{Cu}_2\text{L}_2]$ a estequiometria utilizada foi de 1:1 (L:M) e o rendimento foi de 54,25%. Os metaloligantes foram caracterizados por espectroscopia na região do infravermelho e análise elementar. Como perspectivas os produtos obtidos serão utilizados na obtenção de polímeros de coordenação e serão estudadas suas propriedades magnéticas correlacionadas com suas estruturas.

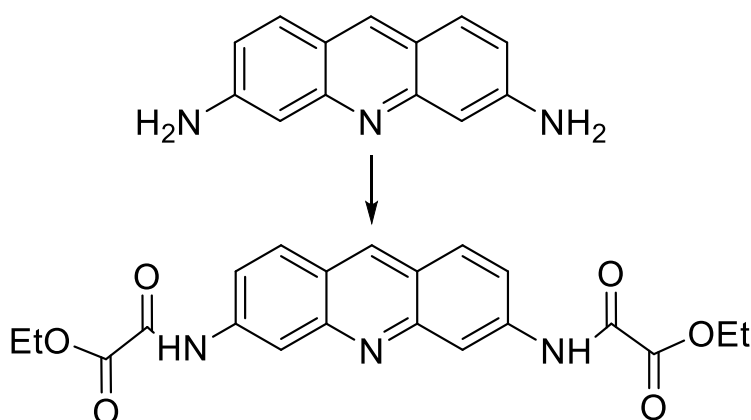


Fig.1 – Esquema da conversão da 3,6-diaminoacridina para ligante do tipo oxamato L.

Agradecimentos/Acknowledgments

CNPQ, CAPES, FAPEG e UFG.

Synthesis and study of the anti-inflammatory activity of amides derived from NSAIDs and their derived S-Nitrosothiols.

Daniel de Carvalho Santos* (PG)¹, Hugo Pequeno Monteiro (PQ)², Adriana Karla C. A. Reis (PQ).¹

carvalho.daniel@gmail.com; adrianakarla.amorim@gmail.com

¹Departamento de Química, Universidade Federal de São Paulo, Diadema, SP, Brasil.

²Departamento de Bioquímica, Universidade Federal de São Paulo, Diadema, SP, Brasil.

Palavras Chave: *Nonsteroidal anti-inflammatory drugs, Amides, S-Nitrosothiols, Medicinal chemistry, Prodrugs, Coupling reactions.*

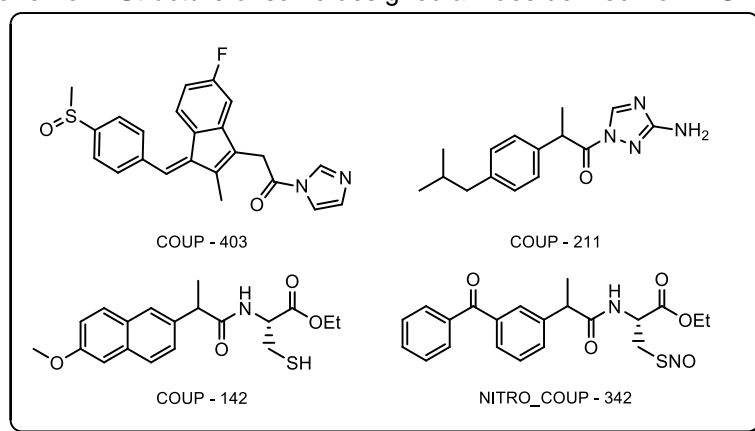
Highlights

In this study we synthesized amides derived from nonsteroidal anti-inflammatory drugs (NSAIDs), aiming to obtain a series of new prodrugs, since similar compounds derived from other anti-inflammatory drugs (both amides and substituted products) have anti-inflammatory activities and there are indications that they may be used as anticancer compounds.^[1-2] This motivated us to prepare the compounds and perform biological assays with them.

Abstract

This project aims to the synthesis of amides derived from classical nonsteroidal anti-inflammatory drugs (NSAIDs) from the arylacetate acid derivatives or propionic acid derivatives and their derived S-Nitrosothiols – SNO-NSAIDS [Scheme 1]. These compounds will be evaluated for their anti-inflammatory and anti-tumoral activities by determining their inhibitory actions on cyclooxygenase-2 activity, and their cytotoxic effects on human colon cancer cell lines SW480 (primary site) and SW620 (metastasis), respectively. The amides of interest were prepared reacting the NSAIDs with heterocyclic aromatic amines (imidazole or 3-amino-1,2,4-triazole) or with L-cysteine ethyl ester hydrochloride by classical methods using coupling reagents such as DIC, DCC, EDC and CDI, in different solvents: ethanol, dichlorometane and chiefly dimethyl carbonate (green condition). Computational studies involving theoretical calculations and molecular docking have being carried out to investigate other properties of these compounds. The results obtained for the coupling reactions with L-cysteine ethyl ester hydrochloride were shown to be the most efficient route and those reactions via CDI and EDC enabled a vaste field of synthesis to be explored. For the reactions performed with the classical coupling reagents a lower yield due to the formation of by-products was observed. These reactions were very efficient in environmentally friendly conditions. Therefore, these conditions may be a relevant alternative for the preparation of the compounds.

Scheme 1. Structure of some designed amides derived from NSAIDs.



References

- [1]. Chen, Z.; Li, M.; Wang, Z.; Wieand, H. S.; *Clin. Cancer Res.*, **2004**, 10, 5930-5939.
 [2]. Mocellin, S.; *Current Cancer Drugs Targets*, **2009**, 9, 214-236.

Geração voltamétrica do nitro radical aniônico em meio aquoso a partir de novos análogos do nitrofural com potencial atividade antichagásica

Lígia Scandoglieri de Almeida (IC),*¹ Luísa D. Chiavassa(PG),¹ Fernando M. Gatti (PG),² Gustavo H. G. Trossini (PQ),² Mauro Aquiles La Scalea (PQ),¹

ligia.scan.7@gmail.com; malscalea@gmail.com

¹Departamento de Química, UNIFESP - Diadema; ²Departamento de Farmácia, FCF - USP – São Paulo

Palavras chave: Nitroheterocíclico, Nitro radical aniônico, Nitrofural, Doença de Chagas, Voltametria cíclica

Highlights

Voltammetric generation of the nitro anion radical in aqueous media from new analogs of nitrofural with potential antichagasic activity. The reduction mechanism of this nitro-heterocyclic derivatives was studied by cyclic voltammetry in aqueous medium for being an antichagasic candidate, aiming the generation of nitro anion radical.

Resumo

Sabe-se da efetiva necessidade de novos fármacos para tratamento de doenças negligenciadas, em especial a doença de Chagas, uma vez que a quimioterapia atual é tida como ultrapassada e muito tóxica e, atualmente, há milhões de pessoas infectadas por essa doença. Nesse sentido, compostos nitroheterocíclicos apresentam potencial atividade antichagásica, sendo considerados os derivados hidroxilamínico e o nitro radical aniônico os principais responsáveis por essa atividade. Dois novos análogos do nitrofural foram estudados eletroquimicamente com objetivo de demonstrar a geração do nitro radical em meio aquoso. Realizou-se estudo por voltametria cíclica em meio aquoso de dois novos nitro-heterocíclicos: NTBS (4-metil-N-[(Z)-(5-nitro-2-tienil)metilenoamino]benzenosulfonamida) e NFBS (4-metil-N-[(Z)-(5-nitro-2-furil)metilenoamino]benzenosulfonamida), tendo carbono vítreo como eletrodo de trabalho (ECV), Ag/AgCl como referência e platina como eletrodo auxiliar. Ambos derivados, em meio ácido, apresentaram principal pico catódico irreversível e controlado por difusão (com $E_{c_{p1}} = -0,396$ V para o NTBS e $E_{c_{p1}} = -0,355$ V para o NFBS), correspondente à redução do grupo nitro ao derivado hidroxilamínico com o envolvimento de quatro elétrons. Este pico desloca-se linearmente com a variação do pH, $E_p = -0,21 - 0,045$ pH para o NTBS e $E_p = -0,155 - 0,0532$ pH para o NFBS, indicando protonação antes de processo de transferência de carga. Em meio alcalino o comportamento se altera, a partir do pH 9 o pico catódico original ($E_{c_{p1}}$) em meio ácido é desdobrado em dois, de modo similar ao nitrofural, sendo que é atribuída ao primeiro pico a formação do nitro radical aniônico, com o envolvimento de um elétron, e a posterior redução deste radical gera o derivado hidroxilamínico. Dessa maneira, avaliou-se a formação do nitro radical aniônico, em ambos os compostos, e observa-se o registro isolado da formação do par reversível $R-NO_2/R-NO_2^{\bullet-}$, (Fig. 1A, $E_{c_{p1}} = -0,577$ V e $E_{a_{p1}} = -0,468$ V, NTBS; Fig. 1B, $E_{c_{p1}} = -0,553$ V e $E_{a_{p1}} = -0,460$ V, NFBS) indicando a formação do nitro ânion radical, também de forma análoga ao nitrofural. Não há deslocamento significativo dos valores de potencial de pico de redução e de oxidação com a variação da velocidade de varredura, corroborando com a reversibilidade do sistema.

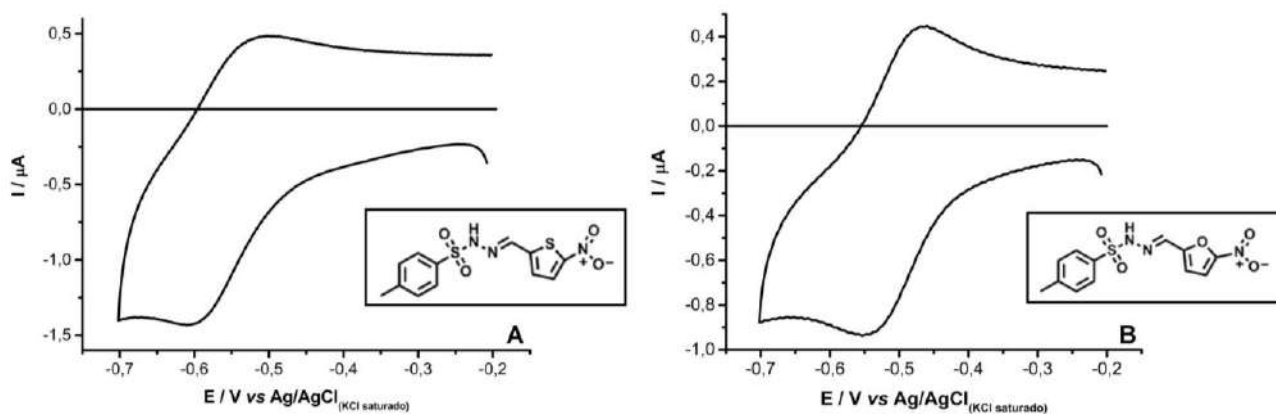


Figura 1. Voltamogramas cíclicos a 0,1 V/s em pH 12, $E_{inicial} = 0,2$ V e $E_{final} = -0,7$ V; (A) [NTBS] = $1,0 \times 10^{-4}$ mol/L; (B) [NFBS] = $1,0 \times 10^{-4}$ mol/L.

Raman spectroscopic study of ionic liquids derived from glycerol and amino acids

Beatriz R. de Moraes (PG)*, Mathias P. Pereira (PG), Fernanda I. Bombonato (PQ), Celly M. S. Izumi (PQ).

beatrizmoraes@ice.ufjf.br; celly.izumi@ufjf.edu.br

Departamento de Química, Universidade Federal de Juiz de Fora.

Palavras Chave: Raman, Ionic liquid, Amino acid, Glycerol.

Highlights

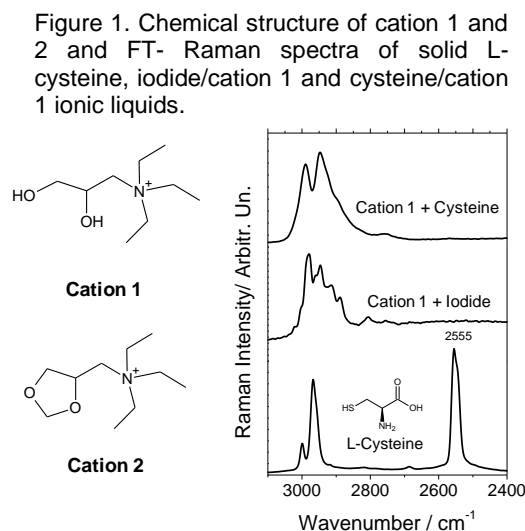
Raman spectroscopy was employed to investigate ionic liquids derived from glycerol and amino acids. *In situ* Raman spectra at different temperatures of these samples showed bands sensitive to the physical state.

Resumo/Abstract

Ionic liquids are ionic compounds with melting point less than 100 °C¹. Glycerol is a by-product of biodiesel production thus, it becomes an abundant and low-cost feedstock. Amino acids are inexpensive, biodegradable and usually chiral, which ensure their various applications in amino catalysis². Therefore, using both molecules, it is possible to create an ionic liquid with interesting applications. This abstract presents the Raman characterization with the excitation lines 785 nm and 1064 nm of ionic liquids derived from glycerol and amino acids. It was synthesized a set of ionic liquids using two glycerol derivatives cations: 3-(triethylammonio)propan-1,2-diol (cation 1) and *N*-((1,3-dioxolan-4-yl)methyl)-*N,N,N*-triethylammonium (cation 2) (Figure 1) with the following anions derived from amino acids: *L*-proline, *L*-leucine, *L*-tyrosine, *L*-cysteine, *L*-valine and *L*-histidine. It was observed that the Raman spectra of the ionic liquids exhibit bands that are mainly due to the cations 1 and 2 but it is possible to identify the bands characteristic of each amino acid in the anionic form. For example, the Raman spectra of solid cysteine (Figure 1) presents the strong bands at 2555 cm⁻¹ assigned to the νS-H is absent in the ionic liquid spectra and showing that an ionic pair was formed with thiolate form of cysteine.

It was noticed that a band at ca. 420 cm⁻¹ is common for all ionic liquids with amino acids, but it is absent in ionic liquids with iodide as anion. Ionic liquids with amino acids are liquid at room temperature while their iodide counterparts are solid suggesting that this band is related with physical state of the sample. This band at ca. 420 cm⁻¹ is also observed when the samples containing iodide were submitted to the melting temperature, confirming this assignment.

Therefore, the Raman technique was applied for characterizing ionic liquids derived from glycerol and amino acids probing both cation and anion structures and the physical state of these samples.



Agradecimentos/Acknowledgments

This study was financed in part by the Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior - Brasil (CAPES) - Finance Code 001. The authors also acknowledge UFJF, CNPq and FAPEMIG.

1 OLIVIER-BOURBIGOU, H.; MAGNA, L.; MORVAN, D. **Applied Catalysis A: General**, v. 373, n. 1–2, p. 1–56, 2010.

2 TAO, G. H.; HE, L.; SUN, N.; KOU, Y. **Chemical Communications**, n. 28, p. 3562–3564, 2005.

Synthesis of novel molecular hybrids of isocoumarins and 1,2,3-triazoles

Lucas da S. Santos (PG)*, Rossimiriam P. de Freitas (PQ), Rosemeire B. Alves (PQ)

lucas.ssmg@gmail.com

Departamento de Química, ICEx, UFMG;

Key words: Isocoumarins, 1,2,3-triazoles, biological activities.

Highlights

synthesis of hybrids of isocoumarins and 1,2,3-triazoles for their biological activities, synthesis of heterocyclic compounds.

Resumo/Abstract

Isocoumarins (1) and 1,2,3-triazoles (2) are classes of heterocyclic compounds that present innumerable biological activities, highlighting: anticancer, antimalarial, antifungal, anti-inflammatory, antimicrobial, among others. Isocoumarins are substances of natural origin while 1,2,3-triazoles are exclusively synthetic in its origin. In this work, the molecular hybridization strategy was used to obtain novel compounds of isocoumarins and 1,2,3-triazoles for the synthesis of pharmacologically active substances.^{1,2,3}

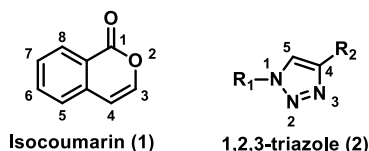


Figure 1. Chemical structure of the basic skeletons of isocoumarins (1) e 1,2,3-triazoles (2).

The synthetic route used for synthesis of 9a-c initially involved the synthesis of azide 7 in 3 steps. From the Castro-Stephens coupling between acid 3 and alkyne 4, isocoumarin 5 was mesylated to afford derivative 6. The reaction of 6 with sodium azide gave the organic azide 7. Another step in the route consisted in obtaining the alkynes 10a-c from the commercial benzyl alcohols 8a-c. Finally, the latter reaction involved the 1,3-dipolar cycloaddition between azide 7 and the alkynes 10a-c catalyzed by Cu(I) ("click" reaction). This reaction gave desired the products in yields between 70 to 75%. This route proved to be efficient to obtain the hybrids 11a-c that will be used too further biological evaluations.

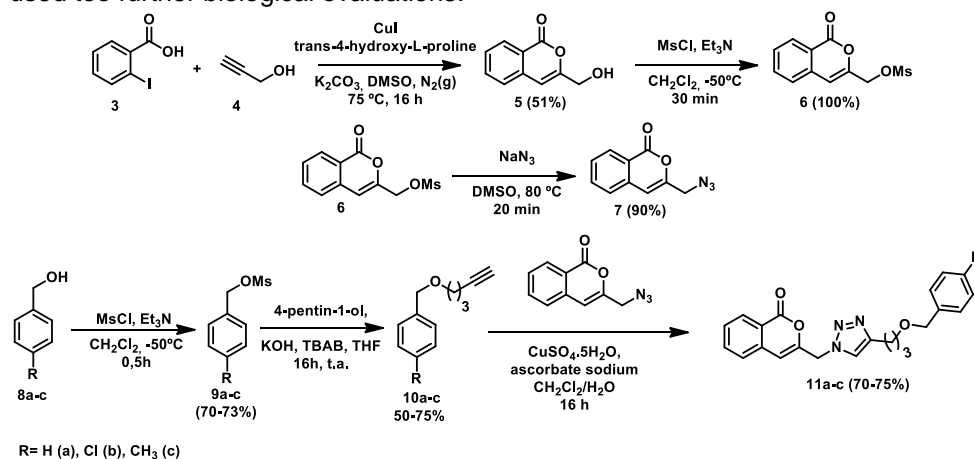


Figure 2. Synthetic route for the preparation of the hybrids of isocoumarinic and 1,2,3-triazoles.

- PAL, S.; CHATARE, V.; PAL, M. Isocoumarin and Its Derivatives: An Overview on their Synthesis and Applications. *Current Organic Chemistry*, v. 15, n. 5, p. 782-800, 2011.
- Dheer, D.; Singh, V.; Shankar, R.; Medicinal attributes of 1,2,3-triazoles: Current developments. *Bioorganic Chemistry*, v. 71, p. 30-54, 2017.

Acknowledgments

CAPES, FAPEMIG, CNPq

Chemical and electrochemical stability of black phosphorus through polyaniline protection

Jéssica E S Fonsaca (PG),¹ Sergio H Domingues (PQ),² Elisa S Orth (PQ),¹ Aldo J G Zarbin (PQ),^{1*}

je.fonsaca@gmail.com; aldozarbin@gmail.com*

¹Department of Chemistry, Federal University of Paraná (UFPR) – Curitiba - PR; ²Graphene and Nano-materials Research Center – Mackgraphpe – Mackenzie Presbyterian University – Sao Paulo – SP.

Keywords: Black phosphorus, polyaniline, thin film, battery.

Highlights

Thin films of black phosphorus and polyaniline were obtained through the interfacial method. The high stability of the nanocomposites enabled electrochemistry studies aiming at energy storage devices.

Abstract

The interest in exploring the promising properties of black phosphorus (BP) in energy storage and conversion has been growing as well as the concern with the energetic crisis expected with future lack of resources. BP is highly unstable under air/water exposure, which severely limits its application. Thus, we have protected BP with polyaniline (PANI), leading to a stable and reliable material targeted for energy storage devices. For this purpose, BP-polymeric nanocomposites were synthesized through the liquid/liquid interfacial method.¹ Aniline was polymerized in a deaerated dispersion of BP and, after the solvent exchange to a biphasic system, a self-standing film of BP covered by PANI was observed at the interface.² Three different systems of BP exfoliation were conducted: (i) 5h of dispersion in the presence or (ii) absence of aniline - added after exfoliation - and (iii) 10h in the presence of aniline, leading to three different nanocomposites, as summarized below (**Figure 1**). Scanning electron microscopy (SEM) images and Raman spectra indicated the beginning of degradation of the uncapped material (without PANI) with only 3 days of exposure, while BP/PANI nanocomposites have taken up to 60 days for the same process to begin, indicating a material 1500% more stable than the bare one.

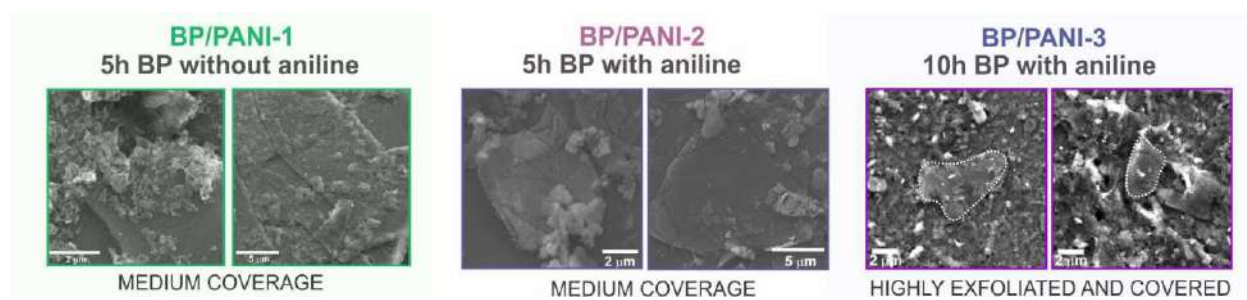


Figure 1 – SEM images of the obtained BP/PANI nanocomposites showing BP coverage by PANI.

Electrochemical response and stability of BP/PANI nanocomposites were performed through cyclic voltammetry (CV) in order to evaluate energy storage properties. CVs were conducted in NaCl 0.5 mol L⁻¹ pH 3, aiming at testing electrodes of aqueous batteries - under air and inert atm (N_{2(g)}). Films of BP/PANI were evaluated and compared to pure PANI and BP. Results have shown that all materials have the same behaviour after 200 cycles either with or without N_{2(g)} purge. BP is degraded right after the first cycle, evidencing the expected low chemical and electrochemical stability. BP/PANI, however, has evidenced the preservation of BP even after the 200 cycles, which was confirmed through Raman spectroscopy and SEM images. Overall, this work enlightens to new possibilities towards the development of electrodes for aqueous batteries based on stable BP thin films.

Acknowledgements: CNPq, CAPES, Fundação Araucária, INCT-Nanocarbon, PhosAgro/UNESCO/IUPAC, L'Oréal-UNESCO-ABC and FAPESP (SPEC project 2012/50259-8).

References: [1] Salvatierra, R. *et. al. Chem. Mat.* **2010**, 22, 5222. [2] Fonsaca, J. E. S. *et. al. Sci. Rep.* **2017**, 7, 10165.

Acid Black 210 dye adsorption by activated carbon from seed of Guava

João Harley Martins Luna (IC)¹, Lisiane dos Santos Freitas (PQ)¹, José Jailton Marques (PQ)²

harlleeymartins@hotmail.com;

¹ Chemistry Department, Federal University of Sergipe, Campus Prof. José Aloísio de Campos, Av. Marechal Rondon, s/n, Jardim Rosa Elze – CEP: 49100-000 – São Cristóvão/SE, Brazil

² Environmental Engineer Department, Federal University of Sergipe, Campus Prof. José Aloísio de Campos, Av. Marechal Rondon, s/n, Jardim Rosa Elze – CEP: 49100-000 – São Cristóvão/SE, Brazil

Palavras Chave: *Adsorption, Acid Black 210, Adsorption Isotherms, Kinetics, Activated Carbon*

Highlights

The greenest way to remove effluent dyes is activated carbon adsorption.

Activated charcoal produced by pyrolysis used for the adsorption of acid black 210.

Acid Black 210 is a synthetic dye from the azo group used for leather dyeing.

Resumo/Abstract

In this work the potential of the activated carbon produced by pyrolysis of the Guava seed was studied for adsorption of the dye Acid Black 210. The charcoal was activated with H₃PO₄ in the ratio 1:10 (coal mass: acid mass), in heating of 120°C, for 8 hours. The characterization (Table 1) was determined by moisture content, ash content, elemental analysis and FTIR. The bands found in the infrared analysis were: 3600-3400 cm⁻¹ (–OH), 1750-1735 cm⁻¹ (O=C=O) and 1750-1500 cm⁻¹ (C=O).

Table 1: Results of the characterization of activated carbon

| Material | Moisture (%) | Ashes (%) | C (%) | H (%) | N (%) | O (%) |
|------------------|--------------|-----------|-------|-------|-------|-------|
| Activated Carbon | 1.02 | 12.02 | 75.49 | 3.43 | 1.67 | 5.73 |

The kinetic tests were performed by contacting 0.5 g of the adsorbent and 150 mL of the dye solution (30 mg.L⁻¹ and pH 7). At pre-defined times (10, 30, 75, 145, 210, 330 and 450 min) aliquots were collected and analyzed in a spectrophotometer in the UV / Vis region to determine the new concentration. These results were applied to kinetic models of pseudo-first order and pseudo-second order. According to the analysis the best correlation index was found in the pseudo-second order model.

Table 2: Results of the application of kinetic models

| Material | Pseudo-first order | | | Pseudo-second order | | |
|------------------|----------------------------|-----------------------------|-------|--|-----------------------------|-------|
| | K_1 (min ⁻¹) | Q_e (mg.g ⁻¹) | R^2 | K_2 (g.mg ⁻¹ .min ⁻¹) | Q_e (mg.g ⁻¹) | R^2 |
| Activated Carbon | 0.002 | 0.338 | 0.941 | 0.067 | 0.515 | 0.999 |

The adsorption isotherms were determined after placing solutions of different concentrations (5, 10, 20, 30, 40 and 50 mg.L⁻¹) in contact with 0.5 g adsorbent for 75 minutes. After that time the resulting concentration and its data were verified in Langmuir and Freundlich models. In this work we can state that the adsorption occurred in multi layers due to the higher correlation index found in the Freundlich model. In addition, due to the fact that 1/n had a value lower than 1, it was concluded that the adsorption was favorable.

Table 3: Results of the application of models of adsorption isotherms

| Material | Langmuir | | | Freundlich | | |
|------------------|-----------------------------|---------------------------------|-------|-----------------------------|-------|-------|
| | K_L (L.mg ⁻¹) | Q_{max} (mg.g ⁻¹) | R^2 | K_F (mg.g ⁻¹) | 1/n | R^2 |
| Activated Carbon | 0.243 | 0.012 | 0.511 | 24.630 | 0.920 | 0.990 |

Agradecimentos/Acknowledgments

To the laboratory of chromatographic analysis (LAC) of the Federal University of Sergipe for having yielded the coal and all the necessary structure for the accomplishment of this work.

Área: TEO

Nº de Inscrição: 00611

Application of the multireference coupled-cluster method to the reaction $F + H_2O \rightarrow HF + OH$

Yuri Alexandre Aoto (PQ)^{1*}

yuri.aoto@ufabc.edu.br

¹Center for Mathematics, Computing and Cognition, Federal University of ABC (UFABC)

Multireference coupled-cluster, ab initio, fluorine, hydrogen abstraction.

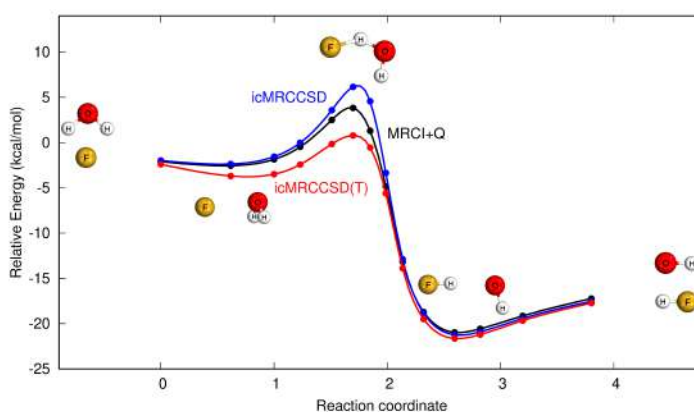
Highlights

Calculation of transition state and barrier height;
 Hydrogen abstraction by fluorine;
 Multireference Coupled-Cluster method (MRCC);
 Small active spaces.

Resumo/Abstract

Reactions of hydrogen abstraction by halogen atoms are key to organic chemistry, as they correspond to the propagation step in the radical chain reactions of halogenation of alkanes. The accurate computational description of the transition state of such reactions is not trivial, and traditional approaches of computational chemistry can give poor results.¹ In such situations, the internally contracted multireference coupled-cluster method (icMRCC²) has been successfully used to combine the accuracy of coupled-cluster theory with a multiconfigurational reference wave function.³

We present a computational study of the reaction path for the reaction $F + H_2O \rightarrow HF + OH$, using the icMRCC method.² Due to the high computational cost, we have first used the multireference configuration interaction method to generate the reaction path as previously described,⁵ and the icMRCCSD and icMRCCSD(T) methods were further used to calculate the energy. An active space of only 3 orbitals have been used in the MRCC calculations, in contrast to the large active space with 10 orbitals needed for MRCI calculations.⁴ With this procedure, we obtained a barrier height of 5.8 kcal/mol and 1.0 kcal/mol with the methods icMRCCSD and icMRCCSD(T), respectively. The later value is consistent with the accurate protocols HEAT and FPA.⁵ These results show that triple excitations are needed for the correct description of the transition state of this reaction.¹

¹Aoto, Y. A. *et al.*, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **18** (2016) 30241;²Hanauer, M. *et al.*, *J. Chem. Phys.* **134** (2011) 204111;³Lyakh, D. I. *et al.*, *Chem. Rev.* **112** (2012) 182;⁴Li, J. *et al.*, *J. Chem. Phys.* **137** (2012) 094304;⁵Nguyen, T. L. *et al.* *J. Phys. Chem. A* **117** (2013) 8864.

TINGIMENTO EM BICROMIA DE TECIDO ACRÍLICO COM ÁGUA TRATADA COM RESÍDUO DA INDÚSTRIA BUNGE COMO ADSORVENTE

Júlia Cassaniga Feller (IC);¹ Ivonete O. Barcellos (PQ)^{1*}.

E-mail: julia-ca@hotmail.com, iob@furb.br.

¹Departamento de Química. CCEN/FURB. Rua Antônio da Veiga, 140, CEP 89012-900 Blumenau, SC

Palavras Chave: Adsorvente, Bicromia, Resíduo industrial, Reuso de água.

Highlights

Bicromic dyeing in acrylic fabric with water treated with residue from BUNGE industry as adsorbent. Good removal of basic astrazon dye using adsorbent from industrial residue was observed. Showing be promising the reuse of the dyeing bath in knitted fabric acrylic considering the values dyeing parameters.

Resumo/Abstract

Foram realizadas três bicromias utilizando diferentes porcentagens de dois corantes básicos: astrazon azul FGGL 200% e astrazon vermelho FBL. Sendo nomeadas: Bicromia 30/70; Bicromia 50/50 e Bicromia 70/30 no qual os números apresentam a porcentagem de corante (azul/vermelho) utilizada em cada tingimento. A solução de corante tratada com resíduo industrial da BUNGE foi feita em agitação constante e temperatura de 40 °C utilizando o parâmetro de 1 g de resíduo para cada 100 ml de solução. Possuindo uma eficiência superior à 85%. O tingimento foi feito conforme sugerido pelo fabricante do corante introduzindo retardante e dispersante junto com o corante e água tratada no qual a solução final deve possuir pH de 4,5, utilizando a máquina *Mathis* ALT-1, chegando à 98°C. Após os tingimentos serem realizados os tecidos foram analisados no *Spectrophometer* CM-3610d determinando seus parâmetros colorísticos (K/S, DE e Fr%), tabela 1, possuindo um DE máximo de 0,57 referente ao padrão sendo que valores de DE ≤ 1,0 são liberados pelas indústrias. Os percentuais de esgotamento do tingimento estão na figura 1. Quanto aos ensaios de solidez à fricção (seco e úmido) e à lavagem (tabela 2) os resultados mostram também, que é possível a reutilização da água, pois os valores de solidez ficaram entre 4 e 5 tanto no padrão quanto em solução tratada, no qual 5 é a nota máxima considerando as normas: NBR ISO 105-C06, NBR ISO 105-X12 e NBR ISO-A03.

Figura 1- Porcentagem dos esgotamentos dos tingimentos

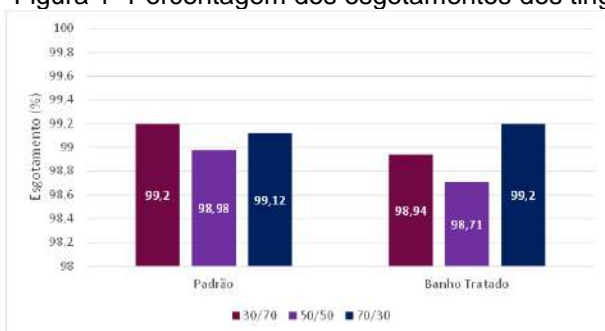


Tabela 1- Parâmetros colorimétricos

| % de corante | Tingimento | K/S ± dp* | ΔE | Fr% |
|--------------|---------------|---------------|------|--------|
| 30/70 | Padrão | 15,65 ± 0,075 | XXX | 100,00 |
| | Solu. Tratada | 15,54 ± 0,552 | 0,54 | 100,14 |
| 50/50 | Padrão | 12,98 ± 0,394 | XXX | 100,00 |
| | Solu. Tratada | 13,08 ± 0,246 | 0,27 | 101,94 |
| 70/30 | Padrão | 14,50 ± 0,366 | XXX | 100,00 |
| | Solu. Tratada | 14,35 ± 0,063 | 0,2 | 101,02 |

Fonte: Arquivo pessoal

Tabela 2- Ensaio de solidez à fricção e à lavagem

| | Fricção Seco | | Fricção Úmido | | À Lavagem | | | |
|-------|--------------|---------------|---------------|---------------|------------|---------------|-----------|---------------|
| | Padrão | Solu. Tratada | Padrão | Solu. Tratada | Testemunha | | Coloração | |
| | | | | | Padrão | Solu. Tratada | Padrão | Solu. Tratada |
| 30/70 | 4/5 - 5 | 4/5 | 4 - 4/5 | 4/5 | 4/5 | 4/5 | 5 | 4/5 |
| 50/50 | 4/5 | 4/5 | 4/5 | 4/5 | 4/5 | 4/5 | 5 | 5 |
| 70/30 | 4/5 | 4/5 | 4 - 4/5 | 4 - 4/5 | 5 | 4/5 | 5 | 4/5 - 5 |

Fonte: Arquivo pessoal

Agradecimentos/Acknowledgments

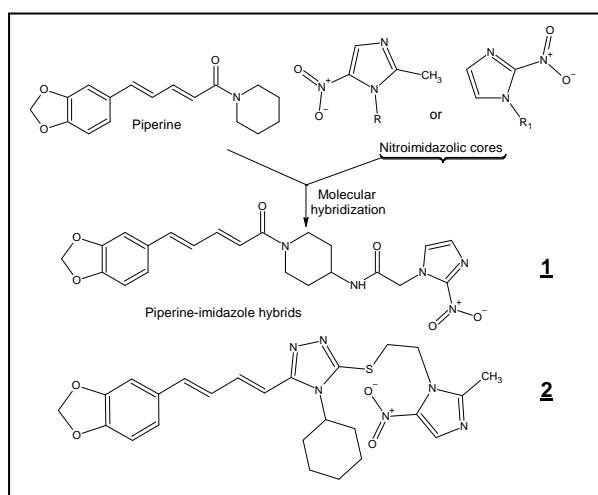
A FURB e ao governo de Santa Catarina/PiPe, artigo 170 pelo suporte financeiro.

Área: MED

(Inserir a sigla da seção científica para qual o resumo será submetido. Ex: ORG, BEA, CAT)

Nº de Inscrição: 00615

(Inserir o número de inscrição do autor que fez a submissão)

Design, Synthesis and Antiparasitic Effects of New Piperine-Nitroimidazole Hybrids**Afonso Santine M. Mesquita-Velez (IC)¹, Douglas Chaves Alcântara-Pinto (PG)¹, Paulo Pitasse-Santos (PG)¹, Idália Maria F. Santos (IC)¹, Débora Decoté-Ricardo (PQ)², Marco Edilson Freire de Lima (PQ)¹**
afonsosv30@gmail.com; marcoedilson@gmail.com¹ Dep. de Química Orgânica-IQ; ² Dep. de Microbiologia e Imunologia Veterinária-IV-Universidade Federal Rural do Rio de Janeiro, BR 465, Km 07-Seropédica, RJ.Palavras Chave: *Trypanosoma cruzi*, molecular hybridization, *Piper nigrum*, natural products**Highlights**Chagas' disease is recognized by WHO as one of the thirteen most neglected diseases in the World; In this work we report the synthesis and the biological evaluation of new hybrids prepared from piperine and nitroimidazolic cores present in anti-infective drugs benznidazole and nifurtimox; The new hybrid **1** showed IC₅₀ = 25.52 μM on *T. cruzi* amastigotes and IC₅₀ > 100 μM to the host cells (LLC-MK2).**Abstract**Chagas' disease (American Trypanosomiasis) is a zoonosis caused by the protozoan *Trypanosoma cruzi* (Kinetoplastida: Trypanosomatidae). This parasitic infection is recognized by WHO as one of the thirteen most neglected diseases in the World.¹ There are only two drugs for the treatment of chagasic patients: the nitro-heterocyclic derivatives benznidazole and nifurtimox.¹ However, none of them meets the criteria (i.e. parasitological cure both in acute as well as in chronic phase of the infection and reduced side effects) required to be an optimal drug to treat this illness. Our group reported the trypanocidal effects of natural amide piperine and its derivatives. Recently, piperine's heterocyclic derivatives bearing a triazolic ring were described as having important anti-*T. cruzi* effects.² In this work we report the molecular planning, synthesis and biological evaluation of new hybrid compounds prepared from piperine and nitroimidazole scaffolds present in the structure of the known anti-infective drugs, metronidazole and benznidazole (**Figure 1**).The new hybrids **1** and **2** were obtained in good yields from the natural piperine. Derivative **1**, as well the synthetic intermediates of its preparation were evaluated against *T. cruzi* amastigotes (Tulahuen strain C2C4 LacZ).³ The prototypes, piperine and benznidazole were used as positive controls. For hybrid **1**, selective inhibitory activity on parasite growth (IC₅₀ = 25.52 μM) relative to the host cell (LLC-MK2, IC₅₀ > 100 μM) was observed. Hybrid **2** was also synthesized and was recently sent to biological evaluation. The results obtained highlight piperine as a suitable starting material for the synthesis of new antiparasitic drugs.**Figure 1.** Molecular planning and structures of new hybrids prepared.**Acknowledgments**

CAPES, CNPq, FAPERJ

¹ WHO-World Health Organization (2012). Research priorities for Chagas disease, human African trypanosomiasis and leishmaniasis. Technical report series, nr. 975; ² Franklim, T.N. et al. **J. Braz. Chem. Soc.**, 2019 (in press); ³ Buckner F.S., et al. **Antimicrob. Agents Chemother.** 40:2592–2597, 1996.

Área: ANA**Nº de Inscrição: 00616***(Inserir o número de inscrição do autor que fez a submissão)*

Determination of Al, Ca, Cd, Cr, Cu, Fe, Hg, K, Mg, Na, Pb and Zn in chicken tissues by MIP OES and GF AAS

Ane Martiele T. P. Pinto (PG)*, Ana Carla S. Boeira (IC), Meibel T. Lisboa (PQ), Aline L. Medina (PQ), Anderson S. Ribeiro (PQ), Mariana A. Vieira (PQ)

marianavieira@pq.cnpq.br; anemartieletaborda@yahoo.com.br

Universidade Federal de Pelotas, Campus Capão do Leão, Laboratório de Metrologia Química. Capão do Leão, RS.

Keywords: *Chicken tissues, metals, MIP OES, GF AAS*

Highlights

Breast and liver from conventional chicken, country chicken, turkey and Chester were analyzed. The highest concentrations of Al, Ca, Cu, Fe, K, Mg, Na and Zn were found in conventional chicken.

Abstract

The chicken meat, besides being tasty, presents high nutritional value and becomes attractive to the consumer due to its affordable price.¹ Therefore, it is necessary to obtain accurate data on the composition of the food in order to evaluate the intake of essential elements and potentially toxic to health. According to the Brazilian Association of Animal Proteins (ABPA) report, the chicken meat per capita consumption in 2016 reached 41.1 kg a year. Due to the high consumption of chicken meat and also to the increase in exports, there is a requirement regarding the food security of chicken meat.

Considering the importance of food security of chicken meat, in this work is presented studies involving the determination of Al, Ca, Cd, Cr, Cu, Fe, Hg, K, Mg, Na, Pb and Zn in breast and liver of chicken meat samples by MIP OES and GF AAS techniques.

For sample preparation was employed a digester block with reflux system. The optimal decomposition conditions were obtained by central composite design (CCD): 2.0 g of sample, 7.5 mL HNO₃ 65.0% (v/v) during 180 min at 160 °C. The samples were: conventional chicken, country chicken, turkey and Chester. The metals Al, Ca, Cd, Cr, Cu, Fe, Hg, K, Mg, Na and Zn were determined by MIP OES and Pb by GF AAS. The accuracy was evaluated through analysis of certified reference material and also by addition and recovery tests, with recoveries ranged between 80 and 108 %. All values of the relative standard deviation were below 10%, confirming the good precision.

The highest concentrations of Al, Ca, Cu, Fe, K, Mg, Na and Zn were found in the conventional chicken sample. Probably, the concentration of these metals varies depending on the breed, rearing, diet, cut and carcass processing. However, the found concentrations were lower than the daily consumption limit established by supervisory agencies and reference limits from Brazilian legislation. For Fe in the liver sample, the found concentration was slightly above the maximum recommended limit for daily consumption that is 14 mg per day. For Cd, Hg and Pb, the found concentrations values were below the reference limit in muscle that is 0.05 mg kg⁻¹, 30 µg kg⁻¹ and 0.1 mg kg⁻¹, respectively.^{3,4} The Brazilian legislation does not established maximum levels for Cr. In this way, it is evident that chicken tissues should be consumed in a complementary way in a healthy diet.

Acknowledgments

CNPq and CAPES.

¹Pereira, T.E.J.; Ströher, G. R.; Turbiani, F.R.B. *Braz. J. Food Technol.* 2013, 16, 278-284.

²Ibanez, J.G.; Carreon-Alvarez, A.; Barcena-Soto, M.; Casillas, N. *J. Food Compost. and Anal.* 2008, 21, 672-683.

³Instrução Normativa (MAPA) Nº 9/2017 - Plano de Amostragem e Limites de Referência para o Plano Nacional de Controle de Resíduos e Contaminantes em Produtos de Origem Animal.

⁴MERCOSUL/GMC/RES. Nº 12/11 - Regulamento Técnico Mercosul sobre Limites Máximos de Contaminantes Inorgânicos em Alimentos

Asymmetric Transfer Hydrogenation of Ketones through Dynamic Kinetic Resolution: Synthesis of Homoisoflavanones

Juliana de O. C. Brum (PG),^{1,2} Guilherme S. Caleffi (PG),² Angela T. Costa (IC),² Tanos C. C. França (PQ),¹ Jorge L. O. Domingos (PQ),³ Paulo R. R. Costa (PQ)*².

jlo.domingos@gmail.com; prrcosta2011@gmail.com

¹Instituto Militar de Engenharia - RJ; ²Lab. Química Bio-orgânica - IPPN-UFRJ; ³Dep. Química Orgânica-IQ-UERJ.

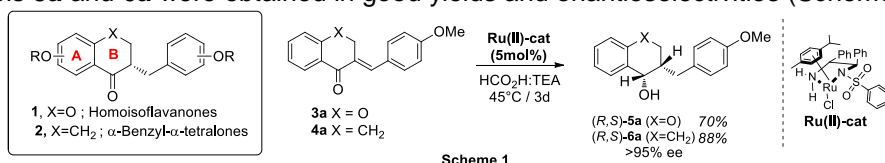
Palavras Chave: ATH, DKR, Enones, Ruthenium (II)-diamine complex, Homoisoflavanones.

Highlights

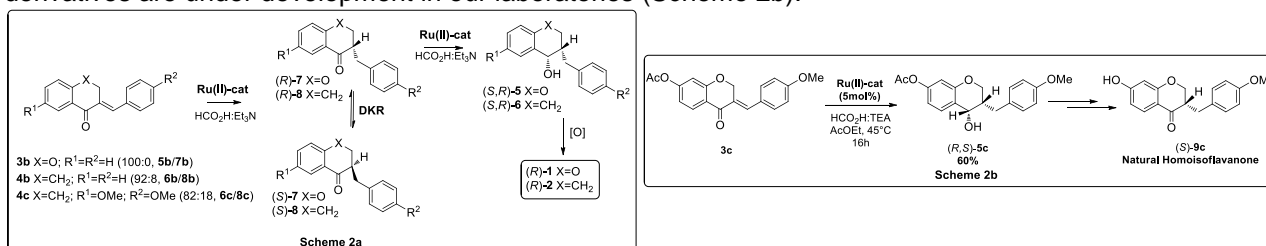
Unexpected double hydrogenation of 3-benzylidene-4-chromanones catalyzed by Ru(II) complexes via ATH-DKR. Enantioselective synthesis of Homoisoflavanones.

Abstract

Homoisoflavanones (**1**, Scheme 1) form an important subgroup of isoflavonoids, some of them with interesting biological activities.¹ Moreover, the carba derivatives (**2**), where the oxygen atom on the B ring is replaced by a CH₂ group, display a wide variety of activities.² Enones such as **3** and **4** have been used as intermediates to prepare **1** and **2**, through the selective reduction of double bond either by hydrogenation with expensive Iridium catalysts or with Ruthenium catalysts and high pressures of H₂. We decide to investigate the use of Ru(II)-diamine complexes to reduce these compounds under transfer hydrogenation conditions. Herein, enones **3** and **4** were prepared through aldol condensation and their reductions were optimized. The best conditions were achieved by using HCO₂H:Et₃N (2:1) in the absence of solvent. The saturated alcohols **5a** and **6a** were obtained in good yields and enantioselectivities (Scheme 1).



The reactions were followed by chiral HPLC. The first step was found to be the unexpected reduction of the double bond, leading to a racemic mixture of ketones **7/8**. Since only the ketone (*R*)-**7**/*R*-**8** is reduced by the catalyst into the alcohol (*S,R*)-**5**/*S,R*-**6**, its enantiomer (*S*)-**7**/*S*-**8** need to be interconverted via Dynamic Kinetic Resolution (DKR) (Scheme 2a). The results with other 3-benzylidene-4-chromanone (**3b**) and 2-benzylidene-1-tetralones (**4b-c**) were showed in Scheme 2. Compound **3b** was completely reduced to the alcohol **5b**. In the case of enones **4b-c**, the alcohols **6b-c** were the main products, but a small amount of the ketones **8b-c** were observed. The enantioselective synthesis of natural homoisoflavanones and its derivatives are under development in our laboratories (Scheme 2b).



It is worth to mention that both enantiomeric Ru(II)-diamine complexes are commercially available, giving access to homoisoflavanones and its derivatives in both enantiomeric forms.

References: 1- Lin, L.-G., *et al.*, *Planta Med.* **2014**, 80, 1053-66; 2- Yee, S.W., *et al.*, *J. Med. Chem.* **2005**, 48, 7123-31.

Acknowledgments

FAPERJ, CNPq, CAPES

Kinetics and energetic parameters of the process of formation of LF-Methyl violet 10B complex

Victoria V. P. Fonseca (IC),^{1*} Alan S. B. De Castro (PG),¹ Hauster M. C. De Paula (PG),¹ Ana Clarissa dos S. Pires (PQ),² Luis Henrique M. Da Silva (PQ).¹

vicvitoi@gmail.com;

¹Grupo de Química Verde Coloidal e Macromolecular - Departamento de Química; ²Grupo de Termodinâmica Molecular Aplicada – Departamento de Tecnologia de Alimentos; Universidade Federal de Viçosa – MG.

Keywords: Kinetic, Dye, Lactoferrin, Surface plasmon resonance.

Highlights

Hydrophobic and π - π stacking interactions determine the LF-MV10B complex stability.

Abstract

The complexes between Lactoferrin (LF) and dyes are of great relevance in food and medical applications of these nanostructures¹. In this work, we investigated the interaction between LF and the methyl violet 10B (MV10B) by the surface plasmon resonance technique, at different temperatures, and at pH 7.4. Figure 1 shows the sensorgrams (RU x t) resulting from LF-MV10B complex formation, at 25°C. The sensorgrams were fitted by the nonlinear method based on a pseudo-first-order model to obtain the kinetic constants (Eq. 1-2). Through the dependence of k_a and k_b with the temperature, we calculate the energetic parameters that determine the LF-MV10B transition complex formation processes (Eq. 3-5).

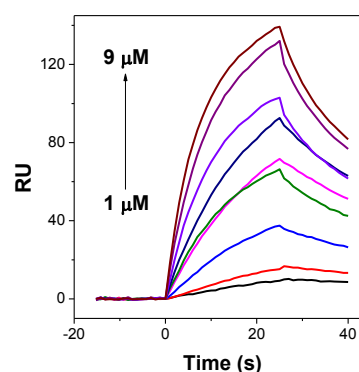


Figure 1. Sensorgrams for LF - MV10B (1-9 μ M) at 25°C and pH 7.4.

Table 1. Thermodynamic parameters for the formation of the LF-MV10B transition complex.

| T °C | Association phase (a) | | | | Dissociation phase (d) | | | |
|---------|---|---|---|--|-----------------------------------|---|---|--|
| | k_a $10^4 \text{ M}^{-1} \text{ s}^{-1}$ | ΔH^\ddagger kJ mol ⁻¹ | ΔG^\ddagger kJ mol ⁻¹ | $T\Delta S^\ddagger$ kJ mol ⁻¹ | k_d 10^{-2} s^{-1} | ΔH^\ddagger kJ mol ⁻¹ | ΔG^\ddagger kJ mol ⁻¹ | $T\Delta S^\ddagger$ kJ mol ⁻¹ |
| 12 | 0.68 | 56.08 | 48.81 | 7.27 | 2.24 | 1.99 | 78.73 | -76.75 |
| 16 | 0.96 | 56.04 | 48.71 | 7.33 | 2.30 | 1.95 | 79.84 | -77.88 |
| 20 | 1.35 | 56.01 | 48.57 | 7.44 | 2.36 | 1.92 | 80.88 | -78.96 |
| 24 | 1.84 | 55.98 | 48.50 | 7.47 | 2.41 | 1.89 | 81.97 | -80.08 |
| 25 | 2.00 | 55.97 | 48.47 | 7.50 | 2.43 | 1.88 | 82.23 | -80.35 |
| 28 | 2.51 | 55.94 | 48.41 | 7.53 | 2.47 | 1.85 | 83.04 | -81.19 |

Table 2. Thermodynamic parameters of LF-MV10B complex at six temperatures.

| T °C | K_b 10^5 L mol^{-1} | ΔH° kJ mol ⁻¹ | ΔG° kJ mol ⁻¹ | $T\Delta S^\circ$ kJ mol ⁻¹ |
|---------|------------------------------------|--|--|---|
| 12 | 3.04 | | -29.93 | 84.02 |
| 16 | 4.17 | | -31.12 | 85.21 |
| 20 | 5.72 | 54.09 | -32.31 | 86.40 |
| 24 | 7.63 | | -33.46 | 87.56 |
| 25 | 8.23 | | -33.76 | 87.85 |
| 28 | 10.16 | | -34.63 | 88.72 |

equilibrium favors the formation of the LF-MV10B complex ($\Delta G^\circ = -33.76 \text{ kJ mol}^{-1}$, at 25°C) and is entropically driven ($T\Delta S^\circ = 87.85 \text{ kJ mol}^{-1}$, at 25°C). The data demonstrate that hydrophobic interactions and π - π stacking interactions contributed to the LF-MV10B complex stability.

$$RU(t) = RU_{max}[1 - e^{-k_{obs}(t-t_0)}] \quad \text{Eq. 1} \quad E_{act} = \Delta H^\ddagger + R.T \quad \text{Eq. 5}$$

$$RU(t) = RU(t_f)e^{-k_d(t-t_f)} \quad \text{Eq. 2} \quad \Delta G^\circ = -RT \ln K_b \quad \text{Eq. 6}$$

$$\Delta G^\ddagger = -R.T. \ln \frac{k_a h}{K_b T} \quad \text{Eq. 3} \quad \ln \frac{K_{b2}}{K_{b1}} = -\frac{\Delta H}{R} \left(\frac{1}{T_2} - \frac{1}{T_1} \right) \quad \text{Eq. 7}$$

$$T\Delta S^\ddagger = \Delta H^\ddagger - \Delta G^\ddagger \quad \text{Eq. 4} \quad T\Delta S^\circ = \Delta H^\circ - \Delta G^\circ \quad \text{Eq. 8}$$

REFERENCE

¹Patel, B. R., & Kerman, K., Calorimetric and spectroscopic detection of the interaction between a diazo dye and human serum albumin. Analyst 2018, 143(16), 3890-3899.

Acknowledgments: FAPEMIG, CNPq, CAPES, and FINEP.

Área: ANA

Nº de Inscrição: 00619

Determination of Ba, Cu, Pb and Zn in instant soup by MIP OES after sample preparation in low pressure closed system

Ana Claudia B. Luckow (IC), Alexander O. de Souza (PG), Daisa H. Bonemann (PG),
Camila C. Pereira (PG), Adriane M. Nunes (PQ), Anderson S. Ribeiro (PQ)

andersonsch@hotmail.com; anaclaudialuckow@yahoo.com.br

Universidade Federal de Pelotas, Campus Capão do Leão, Laboratório de Metrologia Química. Capão do Leão, RS.
Keywords: Sample preparation, Low pressure closed system, Instant soups, MIP OES.

Highlights

The concentrations of Ba, Cu, Pb and Zn in instant soups were determined.
Sample decomposition was performed in a low pressure closed system.

Abstract

Instant soups are a semi-ready food alternative, easily found in the market, with an affordable price and nice taste. In addition, their preparation is easy, which reflects the considerable increase in consumption. They are constituted for the most part by starch and can be added in their composition various vegetables and different types of meats. The final product undergoes a lyophilization process to maintain the properties of the ingredients. Since these soups are often used to replace a meal, it is essential to know the concentration of the essential and potentially toxic elements present.¹ Thus it is necessary that the sample is in solution so that it can be inserted in the analytical instruments. In this way a good alternative is the decomposition in a closed system that allows exceeding the boiling temperature of the acids, for example, HNO₃ and there are no losses of the analyte by volatilization.

The objective of this work was to develop an acidic decomposition method using a low pressure closed system for subsequent determinations of Ba, Cu, Pb and Zn in instant soups by Microwave Induced Plasma Optical Emission Spectrometry (MIP OES). The sample preparation system was based on the conductively heated digestion system (CHDS) developed by Miranda et al. (2014)². An instant soup sample was purchased in the Pelotas-RS market and homogenized using a blender (non-contaminating kitchen mixer). For sample preparation, 200 mg were weighed directly into the borosilicate reaction tube, followed by the addition of 1.0 mL of HNO₃ 65% (v/v) and 1 mL of H₂O₂ 30% (v/v). The tubes were closed and after 10 min of pre-digestion, were placed in a digester block heated at 150 °C for 3 h. The tubes were arranged in a cabinet with a device designed for cold air entering under the top of the reaction bottles, promoting the regeneration/condensation of HNO₃ and the relief of pressure.² After cooling, the volume was filled up to 20 mL with deionized water and thus the final acidity was 2.3%. The decomposition efficiency was evaluated by determining the residual carbon content (4.0%). The values of acidity and residual carbon content obtained are in accordance with the parameters required for analysis by MIP OES.³

The limits of detection were 0.007; 0.003; 0.14 and 0.06 mg kg⁻¹ for Ba, Cu, Pb e Zn, respectively. The accuracy was evaluated through addition and recovery tests, with recoveries ranged between 86 and 120 %. The found concentrations for Ba, Cu, Pb and Zn were 1.29 ± 0.02; 1.71 ± 0.08; 5.0 ± 0.4 e 3.0 ± 0.1 mg kg⁻¹, respectively. Considering the recommended daily intake values for Ba (500 mg) and for Zn (9 mg), it is noted that the instant soup provides few amounts of these elements.^{4,5} Cu and Pb presented concentrations values higher than the recommended daily intake (0.036 mg for Cu and 0.9 mg for Pb). Thus, it is possible to conclude that instant soups do not substitute for safe meals, so it is not recommended to consume daily. The low pressure closed system showed simple, easy to use, safety and high sample throughput and allow using low amount of reagents and sampling.

Acknowledgments

CNPq, CAPES, FAPERGS.

¹Louzada, M. L. da C.; Martins, A. P. B.; Canella, D. S.; Baraldi, L. G.; Levy, R. B.; Claro, R. M.; Moubarac, J. C.; Cannon, G.; Monteiro, C. A. *Rev. Saúde Pub.*; p. 1-11, 2015;

²Miranda, K.; Pereira, E. R. F.; Neto, J. A. G. A. *The R. Soc. Of Chem.* p. 825-831, 2014;

³Agilent Technologies. p. 167, 2016.

⁴Institute Of Medicine, 2011. Dietary Reference Intakes (DRIs);

⁵Nielsen, E.; Ladefoged, O.; *The Env. Prot. Agen.* p. 1-42, 2013.

Síntese de derivados imidazólicos 2-substituídos da β -lapachona.

Leonardo A. Silva^{1,2} (FM)*, **Lorrainy S. da Silva**² (IC), **Ari M. da Silva**³ (TC), **Aurélio B.B. Ferreira**² (PQ),
leonardoaraujo1985@gmail.com

¹Colégio Estadual Missionário Mário Way; ²Departamento de Química da Universidade Federal Rural do Rio de Janeiro;

³Instituto de Pesquisas em Produtos Naturais da Universidade Federal do Rio de Janeiro

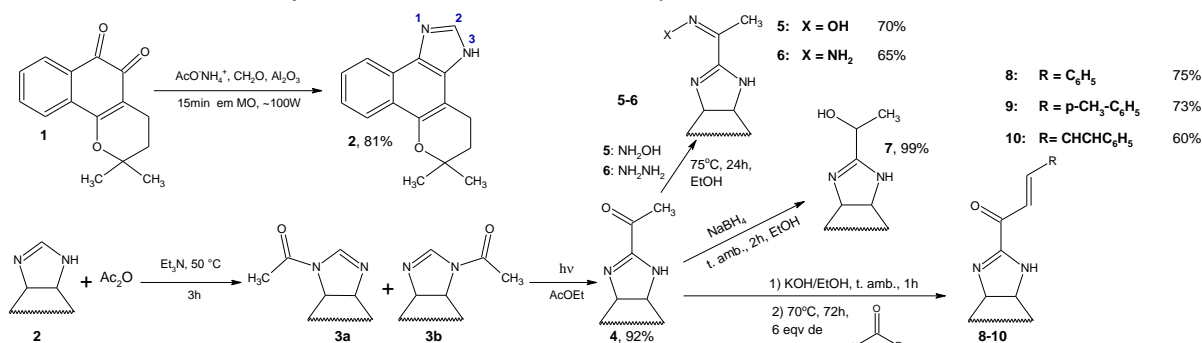
Palavras Chave: Naftoimidazóis, Foto-Fries β -lapachona, Chagas.

Highlights

Synthesis of β -lapachone 2-substituted imidazole derivatives. Motivated by the antichagasic activity of β -lapachone imidazole derivatives, this work is focused on the synthesis of different 2-substituted imidazoles from this quinone.

Resumo/Abstract

Os naftoimidazóis derivados da β -lapachona (**1**) compõem uma classe de moléculas que vêm mostrando o seu potencial antichagásico há mais de duas décadas.^{1,2} A síntese do derivado imidazólico (**2**) mais simples (por não apresentar substituintes nas posições 1, 2 e 3) da quinona³ abriu caminho para que novas moléculas com a subestrutura da β -lapachona pudessem ser obtidas, pois a reação de condensação que leva à formação desses imidazóis requer o uso de aldeídos aromáticos,¹ com exceção da síntese de **2**. Portanto, neste trabalho foram sintetizados naftoimidazóis a partir de **2**, com o interesse de avaliar posteriormente o seu potencial antichagásico. Para isto, foi utilizado um procedimento fotoquímico conhecido como rearranjo de Foto-Fries, fornecendo o produto **4**.



Esquema 1. Rota sintética para a síntese dos naftoimidazóis derivados da β -lapachona.

A partir do composto **4**, foram sintetizados seis novos naftoimidazóis, totalizando quatro grupos distintos na posição 2 do núcleo imidazólico: uma oxima (**5**), uma hidrazona (**6**), um álcool (**7**) e três chalconas (**8-10**). Estes compostos serão avaliados quanto as suas atividades contra o parasita transmissor da doença de Chagas, o *Trypanosoma cruzi*. Todos os produtos obtidos foram isolados em coluna cromatográfica com fase estacionária normal e caracterizados por RMN e por EM de alta resolução. Além da atividade antichagásica, a interferência na fluorescência do composto **5** pela complexação deste produto com alguns metais como cobre II e zinco também está sob investigação.

¹Menna-Barreto, R.F.S. et al, *J Proteomics* **2010**, 73, 2306-2315.

²Silva, A.M. et al. *Med Chem Commun* **2017**, 8, 952-959.

³Silva, A.R. et al, *J Braz Chem Soc* **2008**, 19, 1230-1233.

Agradecimentos/Acknowledgments

CAPES, Dra. Solange L. de Castro e Dr. Rubem F. S. Menna Barreto (ambos do IOC-FIOCRUZ/RJ).

Área: INO

Nº de Inscrição: 00621

Síntese e Caracterização de Complexos Binucleares de Cu(II)/Cu(II) e Ni(II)/Cu(II) Com Base de Schiff Derivada da 3,4-diaminotolueno

Igor Vinicius de França (IC),^{1*} Edward R. Dockal (PQ),² José Wilmo da Cruz Júnior (PQ).¹

igorviniciusdefranca@gmail.com; erdockal@gmail.com; jose.w.cruz@ufsc.br

¹Universidade Federal de Santa Catarina (UFSC), Departamento de Ciências Exatas e da Educação, Blumenau-SC;

²Universidade Federal de São Carlos, Departamento de Química, São Carlos-SP.

Palavras Chave: Bases de Schiff Tetradentadas; Complexos Binucleares.

Highlights

Synthesis and characterization of binuclear Cu(II)/Cu(II) e Ni(II)/Cu(II) with a Schiff Base derivated from 3,4-diaminotoluene: Schiff Base complexes of Cu(II) and Ni(II) were used as ligands to form binuclear Cu(II)/Cu(II) and Ni(II)/Cu(II) complexes. The characterization of the compounds was performed using five physical techniques.

Resumo/Abstract

Bases de Schiff do tipo salen são obtidas pela condensação entre diaminas e salicilaldeído ou derivados, originando grande variabilidade estrutural.¹ Tais compostos são capazes de formar complexos mononucleares com os mais diversos metais, e complexos bi, tri, ou polimetálicos, utilizando um ou ambos os átomos de oxigênio da estrutura do ligante.² Tais complexos polimetálicos podem ser empregados para diversas aplicações, como por exemplo, aplicações catalíticas.³ Dessa forma, dois complexos binucleares de Cu(II)/Cu(II) e Ni(II)/Cu(II) (Figura 1) foram sintetizados utilizando como ligantes complexos mononucleares de Cu(II) e de Ni(II), contendo a base de Schiff tetradentada derivada da 3,4-diaminotolueno e do 2,3-diidroxibenzaldeído, mediante procedimentos descritos na literatura^{4,5}. A caracterização foi realizada por medidas de ponto de fusão, testes qualitativos de solubilidade, medidas de condutividade e espectroscopias eletrônica e vibracional. Os dados gerais dos complexos se encontram na Tabela 1. Observou-se, nos testes de solubilidade, que ambos são solúveis em dimetilformamida e dimetilsulfóxido, e insolúveis em água e hexano. Observou-se que nas análises de ponto de fusão, os dois complexos degradaram ao invés de fundir, e que sua degradação ocorreu 30 °C abaixo das respectivas temperaturas de degradação dos mononucleares. Nas medidas de condutividade, realizadas em DMF, observou-se que ambos se mostraram não-eletrólitos. Os espectros eletrônicos apresentaram bandas de alta absorvidade, atribuídas às transições $\pi \rightarrow \pi^*$ na região entre 276 nm – 380 nm. Foram observadas bandas d-d para os metais tetracoordenados à base de Schiff em 600 nm para (A) e em 596 nm para (B), enquanto para os íons Cu(II) bicoordenados aos fenolatos, em 775 nm para (A) e em 710 nm para (B). Notou-se que as bandas relativas aos estiramentos C=N, C-N e C-O para o composto A apresentaram-se em 1614 cm^{-1} , 1446 cm^{-1} e 1313 cm^{-1} , e para o composto B em 1653 cm^{-1} , 1493 cm^{-1} e 1300 cm^{-1} , respectivamente. Mediante as técnicas de caracterização utilizadas conclui-se que os compostos obtidos provavelmente possuem as estruturas propostas. Análises elementares destes compostos estão sendo realizadas com o intuito de auxiliar na elucidação de suas estruturas e serão apresentadas no evento.

Figura 1: Estruturas propostas para os compostos binucleares obtidos: (A) M=Cu e (B) M=Ni.

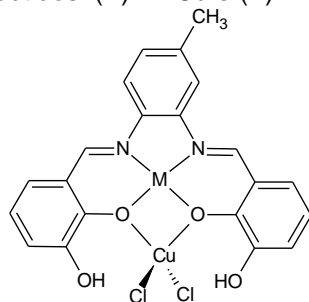


Tabela 1. Dados gerais de caracterização dos complexos obtidos.

| Complexo | M. M. (g mol ⁻¹) | Rend. (%) | P.F. (°C) | Cond. (μS cm ⁻¹) |
|----------|------------------------------|-----------|-----------|------------------------------|
| (A) | 558,44 | 39,50 | 264,0 | 9,70 |
| (B) | 543,53 | 92,20 | 126,7 | 7,42 |

¹ Larrow, J. F.; *et al. J. Org. Chem.* **1994**, 5, 1939.;

² Bear, C. A.; *et al. J. Chem. Soc., Dalton Trans.* **1974**, 1059.;

³ Achard T. R. J.; *et al. Tetrahedron* . **2011**, 68, 133.;

⁴ Cavalheiro, E. T. G.; *et al. Thermochem. Acta*, **2001**, 370, 129.;

⁵ Gruber, S. J.; *et al. J. Inorg. Nucl. Chem.*, **1968**, 30, 1805.

Non-symmetrical bent-core liquid crystals containing isoxazole and isoxazoline ring

Caroline Sabrina Batista Weber (PG),^{1*} Aloir Antonio Merlo (PQ).¹

caroline.weber@ufrgs.br

¹Chemistry Institute, Department of Organic Chemistry, UFRGS

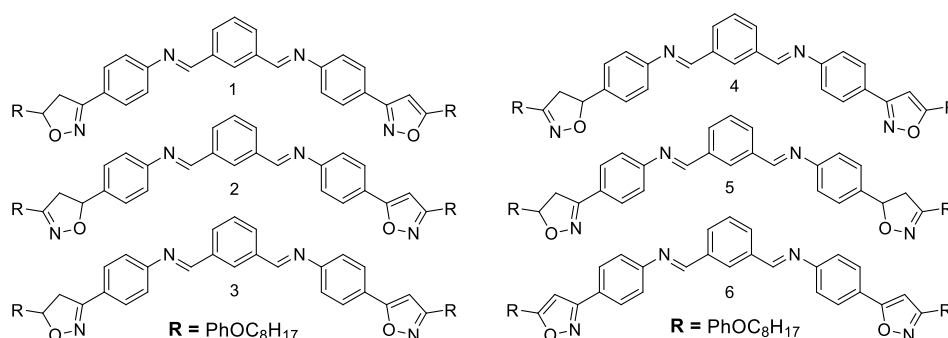
Keywords: *Isoxazole, Isoxazoline, Non-symmetrical imines, Bent-Core Liquid Crystals*

Highlights

This work describes the synthesis and characterization of six new non-symmetrical bent-shaped liquid crystalline compounds based on isoxazolines/isoxazoles. Structural and electro-optical parameters will be evaluated such the heterocycle nature and its dipole moment in relation central core.

Abstract

The preparation of new liquid crystalline materials is very important for the technological development, once that these materials can present fast electro-optical response. Banana liquid crystals are an interesting class of these materials because can show physics features as ferro and antiferroelectricity. These structures display excellent electro-optical response when compared to the others types of mesomorphic materials, once that the shape of those materials can induce polar mesophases and also quiral mesophases generated from molecules without asymmetric center.¹ In this communication we report the synthesis and characterization of six asymmetric molecules containing the isoxazole and isoxazoline ring that will likely show bent-core mesophase.²



Scheme I. Non-symmetrical imines containing the isoxazole and isoxazoline ring.

Classical synthetic methodologies were employed in the preparation of the target compounds and the [3+2] 1,3-dipolar cycloaddition was a key step of the synthetic route. Structural and thermal characterization of the synthesized compounds will be carried out by ¹H and ¹³C NMR, Polarized Optical Microscopy (POM), DSC, XRD and triangular voltage. Previous results by POM showed that the molecule **3** (Scheme I) has B7 mesophase, what will be investigated. All the others final compounds are in progress concerning to the synthesis and electro-optical characterization.

[1] Niori, T. *et. al.*, *J. Mater. Chem.* **6**, 1231-1233 (1996).

[2] da Rosa, Rafaela Raupp. *Isoxazolininas e isoxazóis como reais candidatos na preparação de cristais líquidos polares*. 2018. These (PhD in Chemistry) – Chemistry Institute, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre.

Acknowledgments

This work was supported by MCT/CNPq Ed Universal 01/2016 no. 403075 2016-5, FAPERGS and PPGQ-UFRGS. C. S. B. W. thanks Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior – Brazil (CAPES) - Finance Code 001, for her fellowship.

Área: MED

(Inserir a sigla da seção científica para qual o resumo será submetido. Ex: ORG, BEA, CAT)

Nº de Inscrição: 00624

(Inserir o número de inscrição do autor que fez a submissão)

Evaluation of the antiparasitic effects of the green propolis extract and its main prenylated compounds

Lucas de Oliveira Pires (PG)¹, Douglas C. Alcântara-Pinto (PG)¹, Paulo Pitasse-Santos (PG)¹; Débora Decoté-Ricardo (PQ)², Marco Edilson F. Lima (PQ)¹, Rosane N. Castro (PQ)¹
luucasoliv@outlook.com; noraufrrj@gmail.com

¹Instituto de Química – Departamento de Química Orgânica, UFRRJ. ²Instituto de Veterinária –DEMIV-UFRRJ

Palavras Chave: *Trypanosoma cruzi*, Artepillin C, Baccharin, HPLC-PDA

Highlights

Green propolis has biological properties, including antimicrobial, antiviral, anti-inflammatory, antitumor and antioxidant activity. In this study, the toxic effects against amastigote and trypomastigote forms of *Trypanosoma cruzi* of the green propolis extract and two of its main prenylated components, artepillin C and baccharin are described.

Abstract

Green propolis, found in Brazilian southeast, is a complex material made by honeybees. Several biological activities are attributed to green propolis, such as antimicrobial, antiviral, anti-inflammatory, antitumor and antioxidant activity¹. In this work the main components present in green propolis were isolated, identified and tested the toxic effects against amastigote and trypomastigote forms *T. cruzi*, the causative agent of Chagas' disease (CD) and host cells. CD is a serious illness that afflicts between 5.7 and 9.4 million people around the world. Furthermore, there are no effective drugs for the treatment of chagasic patients, which justifies the search for new therapeutic alternatives. The propolis extract was prepared using a Soxhlet extractor, from 3,00 g of propolis (Carmo, RJ) and 150 mL of *n*-hexane, for 6 hours. The crude extract (300 mg) was fractionated by open-column chromatography on silica gel using chloroform:acetone (0-20%) as the mobile phase. The major fraction (90 mg) was purified by semipreparative high performance liquid chromatography (C18, 25 cm x 10 mm x 5 µm) using MeOH:H₂O as eluent (75-100%), to give 25 mg of artepillin C and 14 mg of baccharin (both 98% purity). Identification of these components was performed by NMR (¹H and ¹³C), FTIR and MS. For the activity assays against *T. cruzi*, LLC-MK2 cells (ATTC) were seeded in a 96-well plate in DMEM-WPR + 5% SFB media. After cell incubation and cell adhesion, the wells were washed with phosphate buffer solution. Thereafter, fresh media was added containing or not the compounds serially diluted in 7 concentrations ranging from 100 – 0.41 µM in triplicates. The experiment was kept under incubation for 120 h before the indirect quantification of cell viability was done by the MTT method. The absorbance was measured using a plate reader (λ = 570 nm). For the antiparasitic assay, after cell adhesion, 1.0 x 10⁵ trypomastigote forms of *T. cruzi* strain Tulahuen C2C4 LacZ³ per well were added. The treatment with the compounds and incubation followed the same parameters previously described. The indirect quantification of the parasites was done by adding red chlorophenol β-galacto-pyranoside reagent (CPRG) followed by absorbance reading (λ = 570 nm) on a plate reader after incubation. Substances isolated as well as the crude extract had their activities evaluated against *T. cruzi*, with values of IC₅₀ = 28.7 µg·mL⁻¹ (95.7 µmol·L⁻¹) for artepillin C; IC₅₀ > 100 µg·mL⁻¹ (> 274 µmol·L⁻¹) for Baccharin; and IC₅₀ = 33.7 µg·mL⁻¹ for crude extract. benznidazole, IC₅₀ = 0.39 µg·mL⁻¹, 1.49 µmol·L⁻¹). The green propolis extract had higher index of selectivity in relation to the host cell (SI = 1.46), as well as artepillin C (SI = 0.44). On the other hand, baccharin, which is structurally close to artepillin C showed no activity at the test concentrations, due perhaps to the absence of a free phenolic hydroxyl on its structure. In addition to its greater abundance in the hexanic extract and moderate anti-*T. cruzi* activity observed for artepillin C make this compound a good prototype for molecular optimization.

Acknowledgments

CAPES, FAPERJ

¹ Salgueiro, F.B.; Castro, R.N. *Quim. Nova.* 10, 1192-1199, 2016. ² van Meerloo J., et al. *Methods Mol Biol.* 731, 237-45, 2011. ³ Buckner F.S., et al. *Antimicrob. Agents Chemother.* 40:2592–2597, 1996.

Área: EDU

Nº de Inscrição: 00626

CONTRIBUIÇÕES DA TEMÁTICA AUTOMEDICAÇÃO NO ENSINO DE QUÍMICA ORGÂNICA PARA O PROCESSO DE ACT NO ENSINO MÉDIO

Amanda Prestes Serpe* (IC),¹ **Renata Hellinger** (IC),¹ **Orlney Guimarães** (PQ)¹

mandaserpe@gmail.com

¹Departamento de Química UFPR

Palavras Chave: ACT; Automedicação, Química Orgânica, Ensino Médio.

Highlights

Contributions of the automedication theme in the teaching of organic chemistry for the process of ACT in high school. The process of ACT for the construction of the knowledge of organic chemistry. Self-medication as a socio-cultural and economic problem for the learning of scientific concepts.

Resumo

Promover a Alfabetização Científica (AC) dos estudantes é um dos objetivos do ensino de Química já apontado pela literatura da área¹, partindo do pressuposto de que esse processo é fundamental, pois vivemos em uma sociedade abarcada pela ciência e tecnologia. A AC apresenta diversas dimensões e nesse trabalho optamos por priorizar uma visão ampliada¹ da AC, partindo de alguns parâmetros discutidos por Pinho e colaboradores⁴: Alfabetização Científica Prática (AC-Prática), Alfabetização Científica Cívica (AC-Cívica), Alfabetização Científica Cultural (AC-Cultural) e Alfabetização Científica Profissional ou Econômica (AC-PE). Nesse contexto, esse trabalho teve como objetivo analisar as contribuições para o processo de AC de alunos do ensino médio a partir da temática Automedicação no Ensino de Química Orgânica. Essa temática foi escolhida uma vez que a Automedicação é um hábito cultural da sociedade e é um problema de saúde pública no Brasil, além de permitir a articulação com os conteúdos de Química Orgânica. Para tanto, foi desenvolvida e aplicada uma sequência didática de seis aulas em uma turma do 3º ano do curso técnico Petróleo e Gás integrado ao Ensino Médio (EM) do Instituto Federal do Paraná. A pesquisa foi de natureza qualitativa, os colaboradores foram 28 alunos do 3º. Ano do EM Integrado e teve como fontes de informação: 39 diários de bordo dos alunos referentes a cada uma das aulas, 41 questionários (iniciais e finais). A sequência didática desenvolvida abordou os seguintes conteúdos: Automedicação e seus riscos, diferença entre os medicamentos originais, genéricos e similares; Classificação e conceitos dos medicamentos analgésicos e antibióticos; Conceitos farmacológicos, composição química dos medicamentos e sua função no organismo, propriedades, aplicações, fórmula e nomenclatura das funções orgânicas ácido carboxílico e álcool; Propriedades, aplicações, fórmula e nomenclatura das funções orgânicas éster, éter, cetona, aldeído, aminas e amidas; Reação de esterificação, função de um catalisador no processo e procedimentos básicos realizados em laboratórios de síntese orgânica e Funções orgânicas dos princípios ativos presentes nos medicamentos paracetamol, codeína e aspirina. Os resultados apontaram que houve o início do processo de AC, sendo possível verificar indícios de: AC-Cívica, pois os relatos (39) indicam que houve o reconhecimento dos riscos e consequências associados à prática de automedicação, bem como a base necessária para propor meios alternativos que evitam essa prática; AC-Prática, pois constatou-se nos relatos (27) que houve a compreensão de conceitos abordados na sala de aula, bem como suas aplicações no cotidiano, tais como a compreensão da função do princípio ativo do medicamento, a importância da bula e a diferença de preço e eficácia dos medicamentos genéricos e originais; e AC-Cultural, uma vez que pelos relatos (24) ficou demonstrado que houve o reconhecimento do processo burocrático e de produção, no que diz respeito à patente de fabricação dos medicamentos originais, o entendimento do efeito do princípio ativo no organismo, que está relacionado aos grupos funcionais da molécula e aspectos farmacológicos, como toxicidade.

¹Auler, D. & Delizoicov, D. (2001). Alfabetização científico-tecnológica para quê? Ensaio Pesquisa em Educação em Ciências, 3(2), 122-134. ²Milaré, T.; Richetti, G. P. & Filho, J. P. A. (2009) Alfabetização Científica no Ensino de Química: Uma Análise dos Temas da Seção Química e Sociedade da Revista Química Nova na Escola, Química Nova na Escola, 31(3), 165-171.

Agradecimentos

Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia do Paraná, Prof. Dr. Wellington Cesar Galice e alunos colaboradores da pesquisa.

Synthesis and herbicidal activity of flavylum salts

Tássia S. Costa (PG), Bryan N.S. Pinto (PG), Fabiana C. Lopes (IC), Elson S. Alvarenga (PQ), Vânia M.T. Carneiro (PQ)*

tassia.sousa@ufv.br; vania.carneiro@ufv.br*

Departamento de Química, Universidade Federal de Viçosa (UFV), CEP 36.570-900, Viçosa, MG, Brazil.

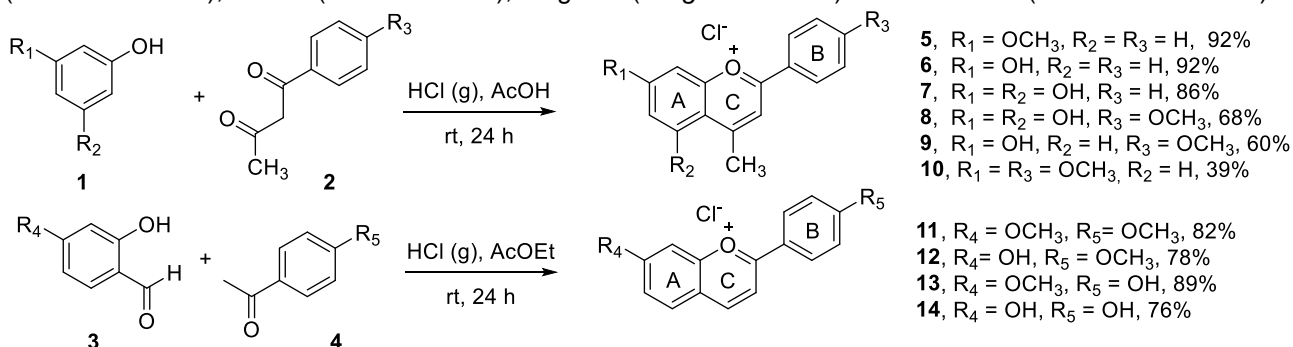
Keywords: flavylum salts, anthocyanins, herbicidal activity.

Highlights

Ten flavylum salts were synthesized by using of acid-catalyzed condensations. Flavylum salts exhibited activity against brachiaria.

Abstract

In this work, six 4-methyl flavylum salts were synthesized from acid-catalyzed condensations between phenols (**1**) and benzoylacetones (**2**). Under similar conditions, condensations of 2-hydroxy aldehydes (**3**) and acetophenones (**4**) delivered four flavylum salts without methyl in C4 (**Scheme 1**). After their complete characterization, all flavylum salts were submitted to herbicidal evaluation tests using seeds of cucumber (*Cucumis sativus*), lettuce (*Lactuca sativa*), sorghum (*Sorghum bicolor*) and brachiaria (*Urochloa brizantha*).



Scheme 1. Synthesis of flavylum salts **6-14**.

Most of the evaluated compounds showed some herbicidal activity. The best results were obtained against brachiaria seeds and were shown below in Figure 1.

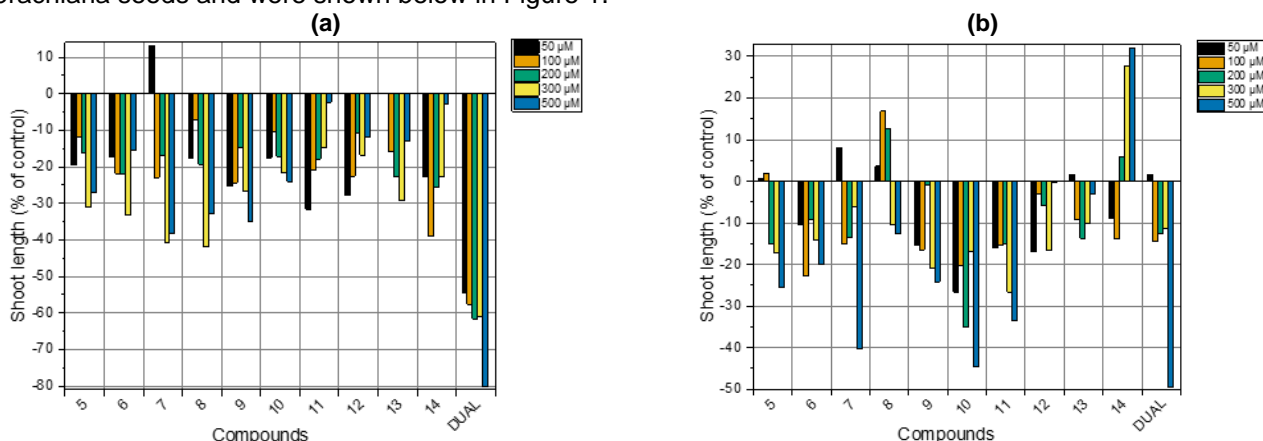


Figure 1. Effect of flavylum salts on growth of stalk (a) and root (b) of brachiaria seedlings.

Acknowledgments

Thanks to CNPq, CAPES and FAPEMIG (Project: CEX-APQ-00321-15) for financial support.

¹Brouillard, R. In *Anthocyanins as Food Colors*; Markakis, P., Ed.; Academic Press: New York, 1982.

New chiral mesogens presenting high Helical Twisting Power.

Luma Fritsch (PG),^{1*} Aloir A. Merlo (PQ),¹ Richard J. Mandle (PQ).²

lumafritsch@gmail.com

¹Departamento de Química, UFRGS, Brazil; ²Chemistry Department, University of York, UK.

Key words: Liquid Crystals, Helical Twisting Power, Simmons-Smith reaction, Mitsunobu Coupling.

Highlights

Four new compounds were synthesized, presenting γ ,2,2-trimethylcyclopropanepentanol alkyl chain and different aromatic cores. HTP was measured from mixtures between the chiral compounds **2a-d** and 5CB.

Abstract

The synthetic route (Figure 1) starts with Simmons-Smith cyclopropanation, of the alkene citronellol using diethylzinc and diiodomethane. A subsequent Mitsunobu coupling using different cores, each containing a phenol group, afforded the final compounds **2a-d**.

Figure 1. Synthetic route to afford compounds **2a-d**.

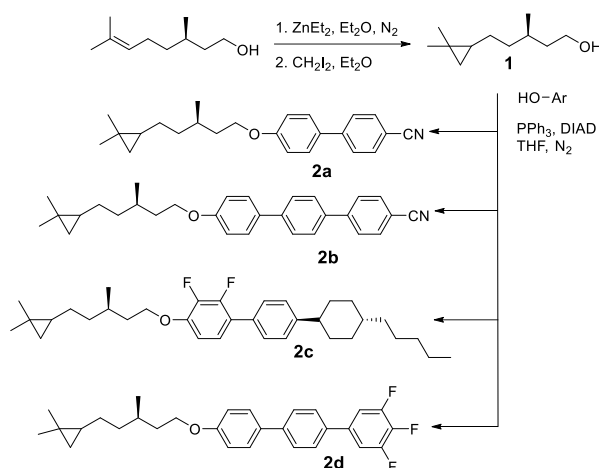
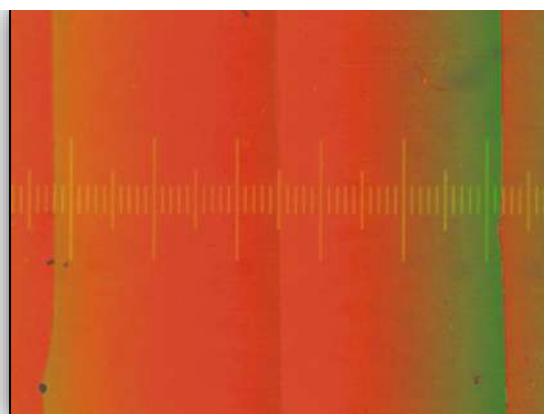


Figure 2. Parallel disclination lines observed in a Cano-Wedge cell, for compound **2c** (4.7% in 5CB).



Compound **2a** did not show a mesophase, whereas compounds **2b** and **2d** presented smectic A and crystal E mesophases. Compound **2c** also showed smectic A mesophase, besides cholesteric mesophase. The values of transitions temperatures, enthalpies and entropies are presented in Table 1.

Table 1. Transition temperatures °C, enthalpies (J g⁻¹), entropies (kJ mol⁻¹) and HTP for compounds **2a-d**.

| Compound | Transition temperatures °C, enthalpies (J.g ⁻¹) and entropies [kJ.mol ⁻¹] | | | | | HTP |
|-----------|---|-----|-----------------------|-------------------|--------------------|-------|
| | Cr | SmE | SmA | Ch | Iso | |
| 2a | - | - | - | - | - | • 3.2 |
| 2b | - | - | • 159 (45.8)[19.4] | • 181 (14.7)[6.2] | - | • 3.4 |
| 2c | • 26 (10.6)[5.4] | - | - | • 78 (0.7)[0.3] | • 85 (0.3)[0.1] | • 4.2 |
| 2d | - | - | • 100 (30.6)[13.8] | • 114 (25)[11.3] | - | • 5.2 |

Three mixtures were prepared with each compound, as dopants, in concentrations between 0 – 5 %, using as a host 5CB (4-pentyl-4'-cyanobiphenyl). The Cano-Grandjean method was used, through which it was obtained each pitch length (Figure 2). Based on the graphic with concentration *versus* 1/P, the trendline gave us the slope, known as helical twisting power (HTP). HTP values are presented in Table 1.

HTP obtained are significantly high, if one consider that the new compounds have only two asymmetric centres. As an example for comparison, cholesterol chloride in 5CB has a HTP of about 1.8.

"This study was financed in part by the Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior – Brasil (CAPES) - Finance Code 001. This work was supported by MCT/CNPq Ed Universal 01/2016 no. 403075 2016-5, FAPERGS and PPGQ-UFRGS."

ZnO QUANTUM DOTS FOR PHOTOCATALYTIC DEGRADATION OF METHYLENE BLUE AND TEXTILE EFFLUENTS

Samara de Quadros (PG),¹ Lizandra M. Zimmermann (PQ).^{1*}

samaradequadross@gmail.com; lmz@furb.br

¹Chemistry Department. CCEN/FURB. Rua Antônio da Veiga, 140, CEP 89012-900 Blumenau, SC.

Keywords: Quantum dots, Sunlight photocatalytic degradation, Fluorescent light, Zinc oxide, Methylene blue.

Highlights

Zinc oxide quantum dots (ZnO). Photodegradation of methylene blue and textile effluents with sunlight and fluorescent light in the presence of ZnO quantum dots.

Abstract

Quantum dots (QDs) are a class of nanostructures with sizes ranging between 2 and 10 nm. ZnO QDs have been extensively investigated because of their optical and electronic characteristics and their non-toxicity, which make them potential photocatalysts for the degradation of several organic molecules.^[1] The objective of this work was to investigate the action of the ZnO QDs, prepared by sol-gel technique, on the degradation of methylene blue (MB) in ethanol under sunlight and fluorescent light. Figure 1 schematizes the performance of the photocatalytic tests. Under the incidence of sunlight, after 2h, it was achieved 99.73% of degradation taking the absorption of MB at 655 nm, and with fluorescent light 97.7%, after 4h. Thus, sunlight is more efficient, and the total degradation was nearly twice as fast as it was with fluorescent light (Figure 2 and 3). However, the reproducibility of the results obtained by sunlight, are highly dependent on the intensity of light, becoming dependent on the year seasonal variation in the incidence of the sunlight and climate conditions. In this sense, the use of the fluorescent lamp proved to be a coherent alternative. Chemical kinetics tests were performed, in which a first order behavior was observed, with $k = 0.029 \text{ min}^{-1}$ for fluorescent light and $k = 0.19 \text{ min}^{-1}$ for sunlight. Photocatalytic tests are also being carried out in aqueous medium, from the formation of ZnO QDs films on glass (Figure 4), for the degradation of organic compounds and textile effluents.

ZnO QDs dispersion at $2.0 \times 10^{-3} \text{ mol L}^{-1}$ and MB at $2.0 \times 10^{-5} \text{ mol L}^{-1}$ at constant temperature and magnetic stirring.

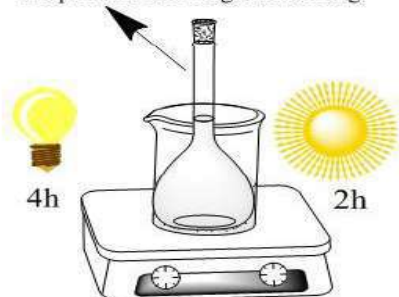


Figure 1. Experimental set up for the photocatalytic degradation.

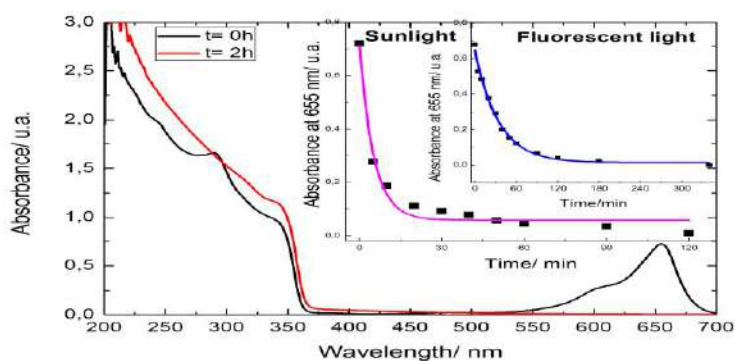


Figure 2. Kinetics studies of photocatalytic degradation of MB with ZnO QDs.

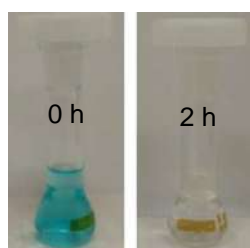


Figure 3. Samples before and after the sunlight photocatalysis with ZnO QDs.

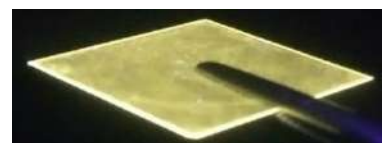


Figure 4. ZnO QDs deposited on glass substrate for photocatalytic degradation in aqueous medium.

1. Ong, C. B.; Ng, L. Y.; Mohammad, A. *Renewable and Sustainable Energy*, **2018**, 81, p 536-551.

Acknowledgments

FURB, FAPESC/ACAFE and CAPES for the financial support.

Nuclear Magnetic Resonance for Reaction Monitoring

Luana Andrade Dutra (IC),¹ Uenifer Rodrigues Couto (PG),¹ Cláudio Francisco Tormena (PQ).^{1*}

tormena@unicamp.br; luana_andrade.dutra@hotmail.com

¹Instituto de Química – Departamento de Química Orgânica - UNICAMP – Campinas - SP

Palavras Chave: NMR, kinetic profile, Knoevenagel reaction.

Highlights

Knoevenagel condensation reaction; The effect of basicity and nucleophilicity of bases were evaluated; Effect of solvent polarity; The reactional intermediate was characterized.

Resumo/Abstract

There has recently been an increased interest in the application of NMR spectroscopy to follow in real time the chemical changes associated with a chemical reaction¹ or degradation.² The Knoevenagel reaction³ is a condensation between aldehydes or ketones with activated methylenic compounds, classically under amine catalysis. The present work intends to shed light on the effect of basicity (pKa) and nucleophilicity for the applied amines (DBU, DABCO, triethylamine, piperidine, tetramethylpiperidine and morpholine) as catalyst, and the polarity of solvent (benzene and acetonitrile) on kinetic profile of condensation between benzaldehyde and ethyl cyanoacetate. Firstly, the reactions, using different bases and solvents, were conducted conventionally (in a reaction flask). The product was isolated and purified and its structure unequivocally assigned through 1D and 2D NMR spectra.⁴ The kinetic profiles were monitored separately by 1D ¹H NMR (Fig. 1a and 1b) performing the reactions, at similar condition as those conducted in a reaction flask, but for this purpose they were performed directly in a 5 mm NMR tube.

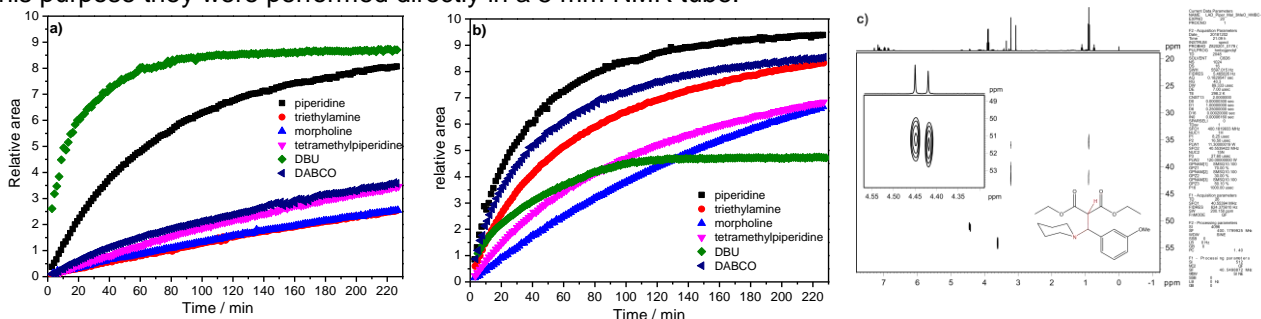


Figure 1. Kinetic profiles for the reaction between benzaldehyde and ethyl cyanoacetate using different organic bases in **a)** benzene-d₆ and **b)** CD₃CN. **c)** ¹H-¹⁵N HMBC for a snapshot of the reaction between ethyl malonate with *m*-anisaldehyde in benzene with piperidine as catalyst.

The reaction using DBU is faster in benzene than in CD₃CN (Fig. 1a and 1b). For the remaining bases the reaction is faster in acetonitrile than in benzene. A reactional intermediate containing piperidine molecule bound to the carbonyl carbon from the aldehyde was characterized straightforwardly using COSY, HSQC and ¹H-¹⁵N HMBC (Fig. 1c), supporting the occurrence of an iminium structure as intermediate, which should be responsible for the speed up of the reaction when piperidine is used as catalyst.

References:

- 1) M. A. Bernstein, *Magn. Reson. Chem.* **54**, 422 (2016)
- 2) T. M. Barbosa, G. A. Morris, M. Nilsson, R. Rittner, C. F. Tormena, *RSC Adv.* **7**, 34000 (2017)
- 3) Knoevenagel, K. *Ber. Dtsch. Chem. Ges.* **27**, 2345 (1894)
- 4) U. R. Couto, A. Navarro-Vazquez, C. F. Tormena. *J. Org. Chem.* submitted.

Agradecimentos/Acknowledgments

FAPESP #2017/08962-7 and #2015/08541-6, CNPq and CAPES

Área: QPN

Nº de Inscrição: 00637

Metabolomics as a tool for ecological analysis of the disturbance gradient from the Atlantic Forest.

Alan C. Pilon (PG),¹ Danielle R. P. Barros (PG)¹, Marcos P. M. Aidar (PQ),² Vanderlan da S. Bolzani (PQ),³ Carlos A. Joly (PQ),⁴ Norberto P. Lopes (PQ)¹

pilonac@gmail.com

¹Departamento de Física e Química, FCFRP; ²Instituto de Botânica; ³Departamento de Orgânica, IQ-UNESP; ⁴Departamento de Biologia Vegetal, IB-UNICAMP

Keywords: *Metabolomics, Ecology, Atlantic Forest, Spectral Similarity Networks, Enrichment analysis.*

Highlights

The devastation of biological diversity due to anthropogenic actions in the Atlantic Forest is a historical problem and affects important ecosystem services. This work aims development of an ecological metabolomic approach for comprehension of functioning of human-modified ecosystem (Atlantic Forest). As a result, a higher chemo-structural diversity was found in preserved areas of forest. Such diversity is associated to higher oxidation/glycosylation level and number of carbons per structure. Glycosylated flavonoids derived of flavones, flavonols and proanthocyanidins were found in higher concentration in preserved areas while basal biosynthetic subclasses of flavonoids such as isoflavones, aurones and flavanones in human-modified areas. Steroids of ergostane subclass presented higher concentration in impacted areas. These compounds are related to foliar growing. Differential channelization can be associated to different survival strategies in forest ecosystem.

Abstract

Global threats to biodiversity have motivated environmentalists to improve understanding of the relationship between biodiversity and the functioning of preserved and impacted ecosystems. In this sense, functional characteristics (morphological, physiological, structural, etc.) have been used to understand the use of different survival strategies in complex ecosystems. Briefly, there are two categories: (1) rapid strategies that prioritize rapid reproduction and foliar growth and (2) slow strategy, which emphasizes chemo-structural defence. However, the exclusive use of functional characteristics does not evaluate efficiently the role of metabolism in the phenotypic variation associated with adaptive and survival processes. Thus, metabolomics can be used as ecological tool for determination of chemo-markers in preserved and human-modified landscapes.

In this work, four forest areas from the Serra do Mar State Park (2 preserved and 2 modified by humans) were evaluated using HPLC-DAD-ESI-QToF and GC-MS analysis. The data were treated using modern statistical tools (Random Forest), enrichment of pathways together with elemental analysis, spectral networks of similarity, oxidation level, presence of nitrogen and chemotaxonomic distribution.

As a result, preserved areas shown higher diversity, oxidation level e number of carbons by structure. The phenylpropanoids pathway was overexpressed in highly oxidated, methoxylated or glycosylated flavonoids. In Impacted areas, a lower investment in metabolic diversification was observed, although the nitrogen uptake was higher. Steroids from ergostane subclass (phytohormone), involved in a series of processes of foliar growthing and development, showed larger amounts in human-modified areas. This data set, along with the functional characteristics, indicated that preserved and human-modified areas present slow and fast economic survival strategies, respectively.

The use of metabolomics as a tool for ecological analysis allowed, at a molecular level, to understand the phenomena that modulate the different economic strategies of survival in a gradient of turbulence in forest fragments.

Acknowledgments

This work was funded by FAPESP for fellowship support (2016/13292-8 to ACP) and Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq).

Área: MAT*(Inserir a sigla da seção científica para qual o resumo será submetido. Ex: ORG, BEA, CAT)***Nº de Inscrição: 00638***(Inserir o número de inscrição do autor que fez a submissão)*

Synthesis of Silver/Polypyrrole Nanocables – A Comparison between Two ‘One-pot’ Methods

Rodolfo A. Baratto (PG),^{1*} Sérgio H. Pezzin (PQ).¹**sergio.pezzin@udesc.br; Rodolfo.baratto@gmail.com**¹Departamento de Química, CCT-UDESCPalavras Chave: *nanocables, silver nanowires, polypyrrole, crystal growth, one-pot synthesis.*

Highlights

Synthesis of Ag/PPy nanoparticles at room temperature. Comparison between polyol and ‘direct redox’ one-pot methods. Proposal of mechanisms giving rise to different Ag/PPy nanostructures.

Resumo/Abstract

Conjugated polymers, like polypyrrole, have electrical properties similar to those of conventional inorganic semiconductors, while having mechanical properties suitable for active layers of organic solar cells, as well as other applications. When these polymers are combined with electron-accepting molecules, like silver nanocrystals or nanowires, greater efficiencies in energy conversion can be obtained. In this work, in order to avoid the use of organic solvents, high temperatures and costly separation and purification processes; a method was developed to synthesize silver(Ag)/polypyrrole(PPy) nanocables (as well as other Ag/PPy nanoparticles) in aqueous media and room temperature by a one-pot strategy. Silver nanostructures capped with PPy were thus prepared, for comparison, by two ‘one-pot’ methods: the well-known polyol method and the direct redox reaction between silver nitrate and pyrrole in the presence of polyvinylpyrrolidone (PVP). Fourier transform infrared and ultraviolet-visible spectroscopies confirm the formation of doped (conductive) PPy. Scanning electron microscopy (SEM) images show that, initially, there is the formation of small hexagonal silver crystals, then, some of these crystals evolve to Ag/PPy nanocables (Figure 1), while others give rise to a series of different nanostructures capped with PPy. The relative amounts of these nanostructures depend on the reaction conditions, which govern faceting and branching crystal growth mechanisms.

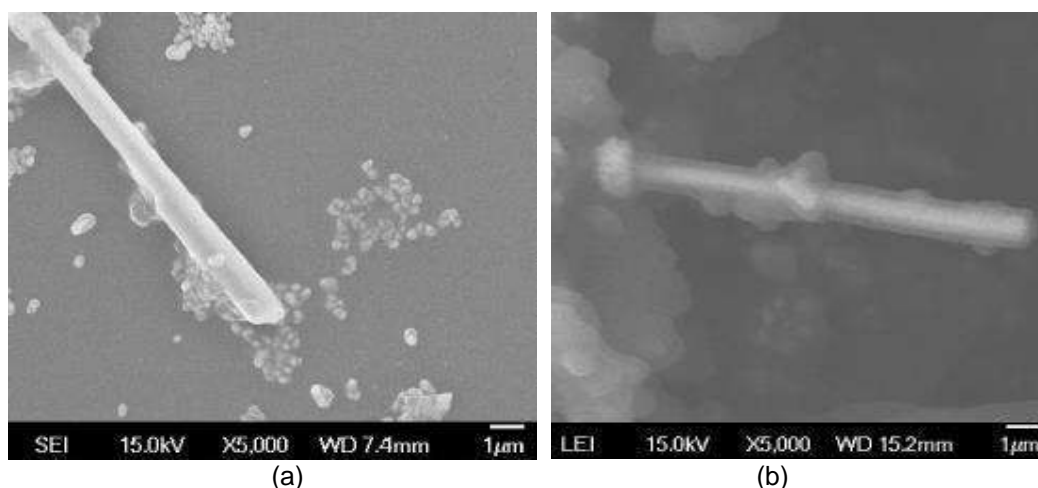


Figure 1: Ag/PPy “cables” synthesized by ‘one-pot’ methods: (a) ‘direct redox’; (b) polyol method.

Structural modifications on functionalized dienes leading to potencial agents for the treatment of Alzheimer's Disease

Nathalia Biazotto Sá (IC), Ana Caroline Ferrari (IC), Aldo Sena de Oliveira (PQ), Lidiane Meier (PG)

nathalia.biazotto@grad.ufsc.br; lidiane.meier@ufsc.br

Department of Exact Sciences and Education, Federal University of Santa Catarina - UFSC, Blumenau-SC, Brazil

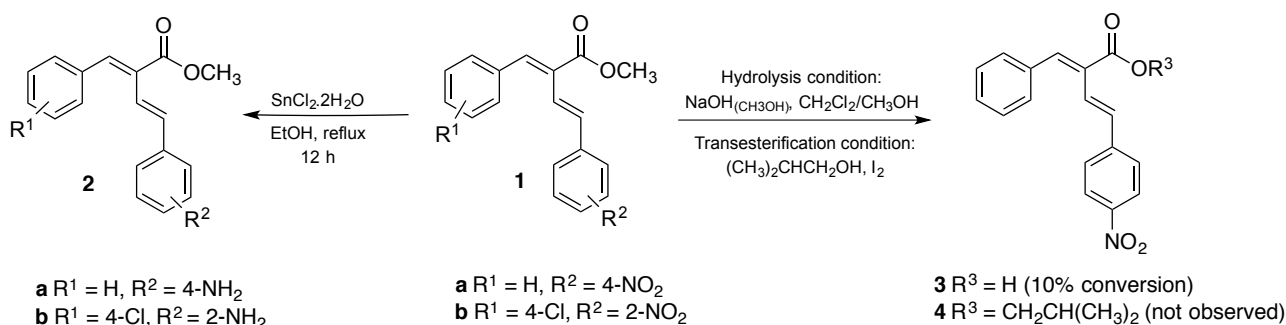
Keywords: Functionalized dienes, Structural modifications, Alzheimer's disease

Highlights

Structural modifications on functionalized 1,3- (*E, E*)-dienes Morita Baylis-Hillman derivatives to evaluating the effect as compounds of great potential in the treatment of Alzheimer's disease.

Resumo/Abstract

Recently, we reported the synthesis of functionalized (*E, E*)-1,3-dienes Morita Baylis-Hillman derivatives by Wittig reaction¹ and its great potential in the treatment of the Alzheimer's disease.² Here we report some structural modifications of the original dienes (Scheme) aiming to increase the bioactivity of the compounds. First of all, the dienes (**1a** and **1b**) were submitted to the reaction applying SnCl₂·2H₂O and CH₃OH under reflux for 12 hours leading to compound **2** in > 90% of conversion.³ Once the compound **2** has been obtained the next step will be the preparation of a metallic complex with potential antitumor activity. In other attempt to modify the structural features of the compounds **1a-b**, the hydrolysis and the transesterification of the ester moiety was tested aiming the production of the corresponding acid **3** and of a more hindered ester **4**, respectively. These structural changes were motivated by Structure–Activity Relationship (SAR) analyzes. The carboxylic acid **3** was obtained in approximately 10% of conversion by the reaction carried out with a NaOH 2 M methanolic solution in dichloromethane/methanol (9:1)⁴ at different temperatures that varied from room temperature to the boiling point of the mixture for 48 hours. The transesterification reaction was tested using *iso*-butanol and iodine refluxed up to 72 hours. Unfortunately, no conversion was observed under this condition.⁵ New methodologies and optimizations are planned for the cited transformations, including the use of lipases.



Scheme. Structural modifications of the dienes **1**.

References

- Sá, M. M.; Meier, L. *Heteroat. Chem.*, **2013**, *24*, 384.
- In Press (doi: 10.21577/0103-5053.20190004)
- Faridooon, A. L. E. et al. *Bioorg. Med. Chem. Letters*, **2016**, *26*, 3810.
- Theodorou, V. et al. *Tetrahedron Letters*, **2007**, *48*, 8230.
- Ramalinga, K.; Vijayalakshmi, P. and Kaimal, T. N. B. *Tetrahedron Letters*, **2002**, *43*, 879.

Preparation and characterization of salts of naproxen and chitosan.

¹Ricardo dos S. Medeiros (PG), ¹Ana Paula G. Ferreira (PQ), ²Tiago Venancio (PQ), ¹Éder T. G. Cavalheiro (PQ)*.

medeirosricardo@gmail.com; cavalheiro@iqsc.usp.br;

¹Instituto de Química de São Carlos, IQSC;

²Departamento de Química, UFSCAR;

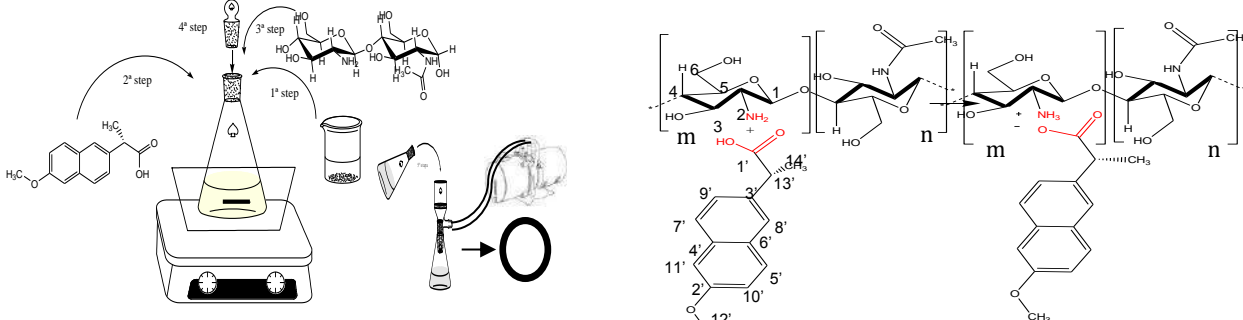
Keywords: Chitosan, Naproxen, Salt of chitosan.

Highlights

Studies were carried out to optimize the reaction conditions to obtain a salt of naproxen (NAP) and chitosan (QP). The dissociation equilibrium of NAP-QP may result in a slow dissociation of the pharmaceutical from the biopolymeric matrix.

Abstract

Optimization of reactional conditions was performed in order to prepare a naproxen (NAP) and chitosan biopolymer (QP) salt. [1-4] in order to obtain a possible controlled drug releasing system with the highest substitution as possible. Thus, the effect of reaction time, temperature and mol ratio of the reactants in the degree of substitution were evaluated. The products obtained were characterized by Nuclear Magnetic Resonance of hydrogen and carbon 13 (¹H and ¹³C NMR), Fourier Transform Infrared Spectroscopy (FTIR), Spectroscopy in the Ultraviolet-visible region in the Diffuse Reflectance mode (UV-vis) and X-ray Diffraction (XRD). The highest reaction extension was obtained under the experimental conditions: 24 hours of reaction, temperature of 60 °C and molar ratio of 1 mol of QP to 1.05 mol of NAP. In this case, the peaks related to NAP C1' and QP C2 shifted to different regions of the spectra. The peak of NAP carboxyl group was observed at 178.9 ppm when the drug is isolated and it shifted to 182.7 ppm when in the presence of chitosan. On the other hand, when QP and NAP-QP spectra are compared, it was observed that the peak related to carbon C2 of QP is slightly shifted to higher field region, going from 57.5 to 57.1 ppm. The degree of substitution was calculated from ¹³C NMR data as 17 %, suggesting the interaction of the NH₂ group of the biopolymer with the COOH group present in the drug. In the FTIR spectra, new bands were observed that were not present in the vibrational spectrum of QP and NAP, suggesting the formation of the salt. UV-vis spectrum presented three bands related to the absorption of the chromophore groups present in the salt. In the XRD diffractograms, it was observed an increase in the peak at 2θ = 22°, which was already observed in QP. In addition, changes in the crystallinity index of chitosan were also observed suggesting modifications in its semicrystalline structure after reaction with NAP. In order to improve the interaction ability between QP-NAP, chitosan was cross-linked with epichlorohydrin, after reacting with NAP under the same conditions of the higher yielded reaction. The salt prepared with the cross-linked polymer presented a lower final concentration of NAP, since the amino groups were less susceptible to the reaction with de chitosan structure.



[1] Corti, G., Maestrelli, F., Cirri, M., Mura, P. *Drug Delivery*, 15:5 303-312, 2008.;

[2] Mura, P., Zerrouk, N., Mennini, N., Maestrelli, F., Chemtob, C. *European Journal of Pharmaceutical Sciences* 19 (2003) 67-75.;

[3] Bhise, K. S., Dhumal, R. S., Paradkar, A. R., Kadam, S. S. *AAPs PharmSciTech*, Vol. 9, nº 1, march 2008.;

[4] Bhise, K. S., Dhumal, R. S., Chauhan, Paradkar, A., Kadam, S. S. *AAPs PharmSciTech* 2007; 8 (2) Article 44.

Acknowledgments

The authors thank the FAPESP and CNPq for grants.

42ª Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química: Eixos Mobilizadores da Química

Síntese de novos aciclonucleosídeos fosfonatos quinolônicos, ANPs, possíveis compostos anti-ZIKV

Letícia V. Faro (PQ),¹ Gabriela da C. V. Alves (IC),¹ Rafaela S. P. Gomes (PG),² Max Willian L. Gomes (PG),² Caroline S. Barros (PQ),² Marcos C. de Souza (PQ),¹ Fernanda C. S. Boechat (PQ),¹ Izabel C. N. P. Paixão (PQ),² Maria Cecília B. V. de Souza (PQ).^{1*}

leticiafaro@gmail.com; gqocica@vm.uff.br

¹Instituto de Química, Departamento de Química Orgânica, UFF; ²Instituto de Biologia, Departamento de Biologia Celular e Molecular, UFF

Palavras Chave: Aciclonucleosídeo, Quinolona, Fosfonato, Zika vírus.

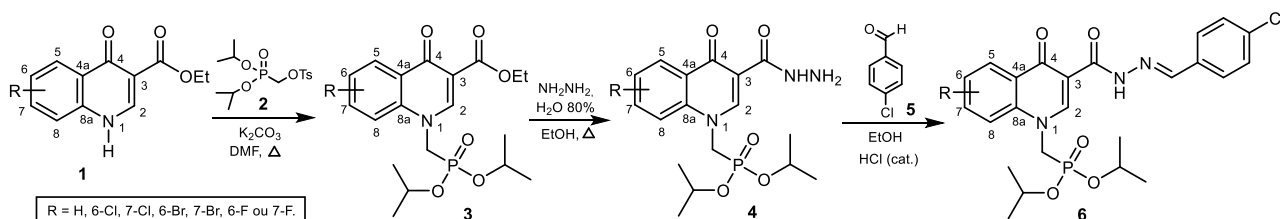
Highlights

Synthesis and biological evaluation of new 4-oxoquinoline acyclonucleoside phosphonates (ANPs) potential anti-ZIKV substances.

Zika virus (ZIKV) was recently associated with severe neurological complications and congenital diseases. Development of antiviral agents capable of inhibiting ZIKV replication is urgent.

Resumo/Abstract

O Zika vírus (ZIKV) é um flavivírus pertencente à família *Flaviviridae*, e também é considerado um arbovirus, pois é principalmente transmitido por meio da picada do mosquito *Aedes aegypti*. Recentemente, o ZIKV foi associado a distúrbios neurológicos graves e doenças congênitas e, após o esclarecimento desta relação, permanecem desafios importantes para prevenção e controle desta virose e de suas consequências. Esses desafios incluem, dentre outros, o desenvolvimento de agentes antivirais capazes de inibir a replicação do ZIKV. Assim, tem sido investigado o uso de novas substâncias, como por exemplo a niclosamida (anti-helmíntico), o sofosbuvir (anti-HCV) e a cloroquina (antimalarial). Em se tratando do sofosbuvir, um fármaco anti-HCV clinicamente aprovado, estudos relatam que este é capaz de inibir a RNA polimerase do ZIKV e sua replicação em diferentes sistemas celulares. Com base na estrutura do sofosbuvir, e em resultados relacionados a síntese e estudos de atividade antiviral de derivados ribonucleosídicos e aciclonucleosídicos quinolônicos, obtidos em trabalhos de nosso grupo de pesquisas, está sendo realizada neste trabalho a síntese e a investigação do perfil anti-ZIKV de aciclonucleosídeos quinolônicos do tipo fosfonatos. Neste sentido, foram preparadas 1-[(diisopropoxifosforil)metil]-4-*N'*-(4-clorobenzilideno)-quinolona-3-carboidrazidas (**6**) a partir da reação de condensação sob catalise ácida entre *p*-cloro-benzaldeído (**5**) e 1-[(diisopropoxifosforil)metil]-4-quinolona-3-carboidrazidas (**4**). Estas últimas são resultantes da reação de substituição nucleofílica à carbonila do grupamento éster dos derivados **3**, tendo-se hidrazina como nucleófilo. Os fosfonatos **3** foram resultantes de reação de *N*-alquilação das quinolonas **1** com diisopropil(tosilmetoxi)fosfonato (**2**). Estes novos ANPs quinolônicos **6** encontram-se em avaliação quanto sua atividade anti-ZIKV.



Esquema 1. Esquema reacional para obtenção dos derivados ANPs quinolônicos **6**.

Agradecimentos/Acknowledgments

O presente trabalho foi realizado com apoio da Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado do Rio de Janeiro (FAPERJ), do Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq) e da Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior - Brasil (CAPES) - Código de Financiamento 001.

CeO₂-Sn nanowires as effective host of sulfur as cathode for lithium-sulfur batteries

Susana Chauque (PQ), Anderson G. M. da Silva (PQ), Marcelo A. de Andrade (IC), Thiago Cipriano (PQ), Roberto M. Torresi (PQ)*

schauque@iq.usp.br; rtorresi@iq.usp.br

Departamento de Química Fundamental, Instituto de Química, Universidade de São Paulo, Brazil

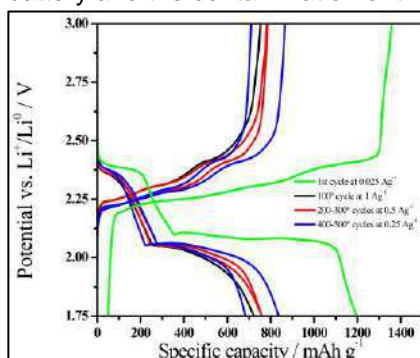
Keywords: Li-Sulfur batteries, cerium oxide, physical and chemical confinement, shuttle effect.

Highlights

An effective sulfur-host material based on CeO₂ e nanowires was obtained.
The effect of CeO₂ doping on the Li storage performance was analyzed.
A great rate capability performance was obtained.

Resumo/Abstract

In recent years sulfur has attracted attention in the world of electrochemistry, since the Li-S battery has a specific theoretical capacity of 1673 mAh g⁻¹ and a theoretical energy density of 2500 Wh kg⁻¹, 10 times more than that of the current Li-ion battery. The implications of Li-S inheriting the battery crown stretch beyond technology because of the materials used. Much publicized is the fact that this technology repurposes the elemental sulfur waste product generated by refining petroleum. While this will surely make the battery cheaper to produce, what effect could it have on the environment? If Li-S technology successfully replaces Li-ion, the battery industry will have heavy demand for sulfur. In addition, sulfur is an abundant, low-cost and non-toxic material. It is well known that during the discharge, elemental sulfur (S₈) is reduced to form Li₂S at approximately 2 V (vs. Li/Li⁺) by forming polysulphides (PS) of the Li₂S_n type (2 ≤ n ≤ 8). However, there are several challenges to improve the sulfur electrochemical reactions, which is the bottleneck that is currently stalling the commercialization of this type of technology. Since of the electronic and ionic insulating nature of sulfur, the electrochemical response is poor and the access to the active material is low. In addition, the process of lithiation of sulfur-based materials, a volumetric expansion of approximately 22% is expected because of the difference in volumetric density between Li₂S and S₈ (1.67 g cm⁻³ vs. 2.03 g cm⁻³, respectively). This can lead to ruptures in the cathode and thus to a lower cyclability, leading to a short life of the battery. Another important issue to avoid is the dissolution and diffusion of PS in the electrolyte (shuttle effect) which results in a mass loss of active material and leads to a constant decrease in the capacity of the battery and the contamination of the whole system.



Here, we report an effective sulfur-host material based on cerium oxide nanowires doped with a 10% of Sn, embed in a reduced graphene oxide matrix. In the figure we show the galvanostatic charge/discharge profiles at different current densities performed on the composite prepared. The specific capacities were determined considering the sulfur mass content obtained by TGA analysis. It is possible to see the well-definition of the typical plateaus corresponding to the discharge-charge processes as well as the excellent reversibility of the them even in the 500^o cycle performed. The new material synthesized was also characterized by cyclic voltammetry, electrochemical impedance spectroscopy, charge/discharge cycling and rate capability performance.

Finally, we determinate the effect of the doping of the CeO₂ with different cations (Ni, Co, Mn) in the ability to retain the PS during the discharge/charge processes.

Agradecimentos/Acknowledgments

FAPESP, CNPq, CAPES.

Área: MED

Nº de Inscrição: 00643

Avaliação da atividade antioxidante e fotoprotetora do óleo essencial e extrato aquoso das folhas e caule da *Chenopodium ambrosioides*

Karine R. L. Sousa (IC),^{1*} Roberto O. Rodrigues Júnior (IC),¹ Rafaela M. Donato (IC),¹ Wéverton J. E. Freitas (IC),¹ Claudinei A. Silva (PQ).¹

clalvess@ufg.br; karin.elima@hotmail.com

¹CIEXA-JAT, Química, UFJ

Palavras Chave:(Mastruz, DPPH, FPS, óleo essencial, extrato aquoso).

Highlights

Antioxidant and photoprotective activity of the essential oil and aqueous extract from leaves and stem of *Chenopodium ambrosioides*. Antioxidant activity: the percentage of free radical sequestration (% SRL) maximum, for the concentrations under study, ranged from; 39% for the essential oil and 78% for the aqueous extract of the leaves and stem, whereas for BHT and ascorbic acid 87-91% respectively. In vitro SPF was determined by the spectrophotometric method developed by Mansur. The SPF labeled values were in the range of 8 to 12.

Resumo/Abstract

In this work, the essential oil of the *Chenopodium ambrosioides* leaves extracted by hydrodistillation in a Clevenger type apparatus and the decoction were invited ahead of their antioxidant and photoprotective activities. The chromatographic file and a major chemical component were detected by gas chromatography coupled by mass spectrometry. The major components, caryophyllene oxide (14.3%) and spatulenol (11.8%) constituted approximately 26% in relation to a peak area of the other essential oil components. In relation to the antioxidant activity, as in the samples in the drops from 10.0 to 400 mg mL⁻¹; the aqueous extract of the leaves 65% and the aqueous extract of the stem an activity (78%) near the BHT and the ascorbic acid of 87 - 91%, respectively. In vitro photoprotection assays are processed according to the methodology proposed by Mansur et al., In 1986. As specific absorbance in the range of 290 to 320 nm, with intervals of 5 nm. The marked SPF values were 7.8 for the essential oil and 12 for the aqueous extract of the leaves and stem. In conclusion, the determination of antioxidant activity and SPF *in vitro* by using spectrophotometry is a viable method for the analysis of plants species, providing preliminary information for the development of formulations

MANSUR, J. S., et al. An. Bras. Dermatol., 1986, v. 61, n. 3, p. 121-124.

MORAIS, S. A. L., et al. Quim. Nova v.32, p. 327-331, 2009.

Agradecimentos/Acknowledgments

The authors wish acknowledges the "Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de Goiás (FAPEG) and Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq)", Brazil for the financial support.

Identification of steroidal alkaloids from roots of Jurubeba (*Solanum paniculatum* L.) by HR-ESI-MS

Matheus Coutinho Gazolla (PG)^{1*}, Alan Cesar Pilon (PQ)¹, Norberto Peporine Lopes (PQ)¹

mgazolla@usp.br

¹Núcleo de Pesquisa em Produtos Naturais e Sintéticos (NPPNS), School of Pharmaceutical Sciences (FCFRP), University of São Paulo (USP)

Keywords: Steroidal alkaloids; Solanaceae; *Solanum paniculatum* L.; Mass spectrometry;

Highlights

The steroidal alkaloids jurubidine, jurubine, 25-isopaniculidine and δ -tomatine were identified by HR-ESI-MS

Abstract

The species *Solanum paniculatum* L. is widely found in Brazilian territory and popularly known as "jurubeba". Its fruits and roots are popularly used for the treatment of gastric and hepatic dysfunctions in the form of tea, as well as for culinary purposes and beverage production. Species of the genus *Solanum* are known to accumulate steroidal alkaloids based on the C27 cholestane skeleton, nitrogen analogs of steroidal saponins. These compounds are usually found as glycosides in leaves, fruits and especially roots. In order to characterize the alkaloids present in the *S. paniculatum* species, the roots were collected and extracted by maceration process in MeOH:H₂O (8:2) v/v solution to obtain the crude extract. The extract was partitioned at different pHs, obtaining the enriched fraction of alkaloids. The alkaloid fraction was analyzed in HR-ESI-MS in positive mode, exhibiting four more intense signals with masses corresponding to the formulas C₂₇H₄₅NO₂, C₃₃H₅₇NO₈, C₂₇H₄₅NO₃ and C₃₃H₅₅NO₇. Analyzing the fragmentation profile of the compounds were possible to identify the four alkaloids jurubidine (**1**), jurubine (**2**), 25-isopaniculidine (**3**) and δ -tomatine (**4**). Compounds 1, 2 and 3 are derived from the 3-aminospirostane skeleton, a rare class of alkaloids of the genus *Solanum* which are characterized by amine group on ring A carbon 3.

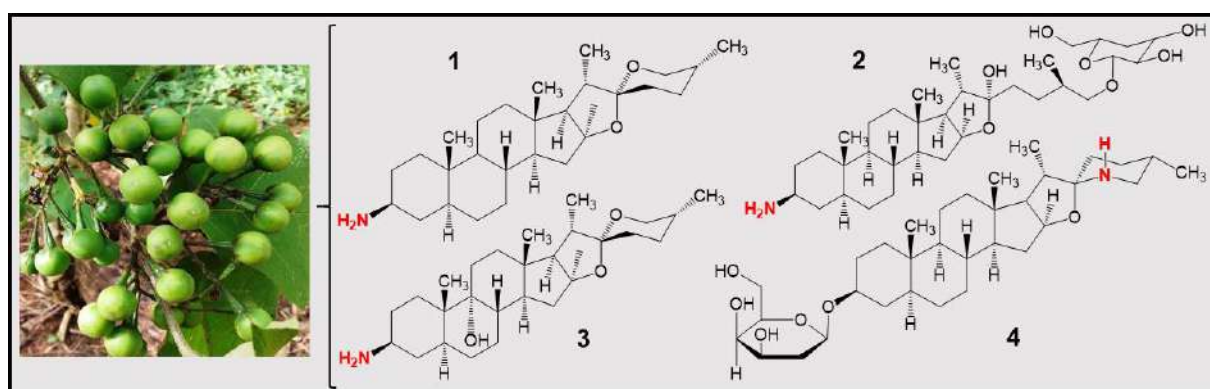


Figure 1. Steroidal alkaloids identified from *Solanum paniculatum* L.

Acknowledgments

The authors acknowledge the support of the Sao Paulo Research Foundation (FAPESP, grant # 2017/19330-1)

Área: QPN

Nº de Inscrição: _____

(Inserir o número de inscrição do autor que fez a submissão)

Chemical study by HPLC-DAD and HPLC-MS of extracts obtained from *Mimosa tenuiflora* and *Peganum harmala* simultaneously

Larissa Araújo Rolim (PQ),¹ Isabela Araujo e Amariz (PG),¹ Nathália Andrezza Carvalho de Souza (IC),¹ Emanuella Chiara Valença Pereira (PG),¹ Ana Paula de Oliveira (PQ).²

larissaraujorolim@gmail.com; isabela.amariz26@gmail.com

¹Center for Drug, Food and Drug Analysis - Federal University of São Francisco Valley – Petrolina, PE, Brazil.

Palavras Chave: HPLC-DAD; HPLC-MS; Harmaline; Harmine; N, N-dimethyltryptamine

Highlights

Chemical study by HPLC-DAD and LC-MS of extracts obtained from *Mimosa tenuiflora* and *Peganum harmala* simultaneously.

The objective of the study was the chemical study of the plant extracts of *Mimosa tenuiflora* and *Peganum harmala*, with emphasis on N, N dimethyltryptamine, harmine and harmaline, using chromatographic methods.

Resumo/Abstract

Medicinal plants have increasingly contributed to the development of new therapeutic alternatives for the treatment of various diseases. In the *Mimosa tenuiflora* stem bark the substance N, N - dimethyltryptamine (DMT) can promote neuropharmacological and anxiolytic effects. In the seeds of *Peganum harmala* are β -carbolines, alkaloids and with the inhibition activity of the monoamine oxidase enzyme (iMAO). Thus the association of these species promote some effects against depression. Therefore, the objective of this study was the development of analytical methods by High Efficiency Liquid Chromatography coupled to diode array (HPLC-DAD) and Liquid Chromatography coupled to mass spectrometry (HPLC-MS) that allowed the chemical study of plant extracts of *Mimosa tenuiflora* and *Peganum harmala* simultaneously. The analysis by HPLC-DAD aimed to determine the chemical profile of the species by evaluating the individual extracts and the mixture of extracts. The HPLC-DAD methodology was optimized through factorial planning (FP) ³³, evaluating three factors (mobile phase flow (mL / min), temperature (°C) and mobile phase gradient (% MP) composition at three different levels. Analysis by HPLC-MS was performed using the same conditions of the method that was optimized by FP for simultaneous identification of the compounds of interest: DMT present in *Mimosa tenuiflora* and β -carbolines (harmaline and harmine) present in *Peganum harmala*. Analysis by HPLC-DAD allowed to identify the compounds of interest in the mixture of the extracts, being confirmed by the analysis by HPLC-MS, with the help of the fragmentation profiles found. In the optimization of the method by factorial planning, the mobile phase flow at 1 mL / min, temperature 40°C and the mobile phase gradient had no significant influence. The development of the analytical methods allowed the simultaneous identification of the compounds present in the mixture DMT and β -carbolines thus contributing to the use of these data in the future development of a product based on *Mimosa tenuiflora* and *Peganum harmala*.

References

- Gaujac A. et al. 2013. Application of analytical methods for the structural characterization and purity assessment of N,N-dimethyltryptamine, a potent psychedelic agent isolated from *Mimosa tenuiflora* inner barks. *Microchemical Journal*. 109, (xx):78-83.
- Muller SD. Determinação de Alcaloides e Flavonoides através de CLAE e UV de extratos de *Passiflora alata curtis*, Passifloraceae-Maracujá-doce. Dissertação (Mestrado em Ciências Farmacêuticas) – Universidade do Vale do Itajaí, Itajaí, Fev. 2006
- Tavares LS. 2014. Investigação de alcaloides B-carbolinas, Triptaminas, presentes na Ayahuasca (Santo Daime) em amostra de suor. Dissertação de Mestrado - Ribeirão Preto.

Agradecimentos/Acknowledgments

CAPES. UNIVASF. USP. UFPE.

Chemical diversity of Fabaceae family species present in the Caatinga biome

Danielle Rocha Pinho Barros* (PG),¹ **Alan Cesar Pilon (PQ),**¹ **Tomas F. Domingues (PQ),**² **Jonathan Lloyd (PQ),**³ **Norberto Peporine Lopes (PQ).**¹

danielle.pinho@usp.br

¹Núcleo de Pesquisa em Produtos Naturais e Sintéticos, Department of Physics and Chemistry FCFRP-USP;

²Department of Biology FFCLRP-USP;

³Faculty of Natural Sciences, Department of Life Sciences, Imperial College London.

Palavras Caatinga, Fabaceae, Metabolomics, Molecular Network, Global Natural Products Social Molecular Networking (GNPS), LC-MS/MS.

Highlights

Study of the chemical diversity of Fabaceae family plants present in the Caatinga biome. Molecular Networking was used for the dereplication of compounds in search of trends.

Resumo/Abstract

The Caatinga biome is unique to the Brazilian territory. Its extension is defined by the Cerrado to the south, by the Atlantic Forest to the east and by the Amazon Forest to the west, being considered the largest semi-arid ecoregion in South America. Caatinga's vegetation is characterized by shrubs and small trees, with a discontinuous canopy containing spines, aculeous, stinging trichomes and microfilia, with deciduous foliage in the dry season. The heterogeneity of plants in this biome is broad and the predominance is of the Fabaceae family, with 292 cataloged species. Fabaceae is the third largest family of flowering plants and, in Caatinga, it has the highest number of endemic species with different patterns of geographic distribution. Considering that Caatinga is a neglected biome, which requires development, this project aims to contribute with the study of the chemical diversity of Fabaceae family plants present in the Caatinga. Given the complexity of the metabolic matrix, metabolomic analysis emerges as an innovative tool in the study of complex plant extracts. In combination with molecular networking, it makes it possible to systematically create models that provide the comparison between samples, aiming to determine patterns or trends within a group and / or correlate these with related properties, which may bring some information about the chemical, biological and ecological variations of the studied systems. Plants contemplated in this study were collected in different Caatinga regions, corresponding to the National Park of Sete Cidades (PSC) (Piauí), Lagoa Grande (LGE), Serra Talhada (STH) and São João (SJO) (Pernambuco) (PFF) (Rio Grande do Norte), Campina Grande (CGR) and Patos (PAT) (Paraíba) and Serra das Almas (SDA) (Ceará). The mapping and distribution of compounds along ecoregions and vegetal physiognomies are of fundamental importance for the study of Caatinga molecular diversity. The extraction of the milled vegetable material was made with a solution of MeOH:H₂O (75:25), followed by stirring, sonication and centrifugation. The filtered extracts were analyzed by UFLC-DAD-ESI-MS/MS (micrOTOF-QII). The metabolic fingerprints were uploaded to the GNPS online platform and data was clustered with MS-Cluster, providing MS² consensus spectra. Because similar molecules have a similar profile of fragmentation, the spectra were organized in groups of greater similarity. Thereafter, the consensus network spectra were screened in the GNPS spectral libraries for matching spectra, assisting in the dereplication of compounds. In the samples were found compounds belonging to diverse classes, such as anthocyanins, flavonoids and cinnamic acid derivatives. After that, unsupervised multivariate statistical analyzes were performed in order to investigate patterns of chemical similarity between plants collected in different regions of the Brazilian northeast. It was possible to observe, in the molecular network, an homogeneity of classes of substances present in the majority of the samples, however the presence of small clusters indicate that some substances are exclusive to a few sample groups. Therefore, it can be considered that the integration of the tools of metabolomic analyzes, molecular networks and chemometric analyzes can help in the process of recognition of substance patterns in a biome.

Agradecimentos/Acknowledgments

We thanks FAPESP (grant # 2017/17850-8) for funding this Project and Raquel C. Miatto and Valdemir F. Silva for providing the plants.

Área: MAT

Nº de Inscrição: 00647

Synthesis and characterization of nanocomposites between graphene oxide, polyaniline and manganese oxide

Gabriel Zeplin (PG), Eduardo G.C. Neiva (PQ).

gabrielz@furb.br

Departamento de Química, FURB.

Key words: *Nanocomposites, Graphene, Manganese Oxide, Polyaniline.*

Highlights

Different sizes of graphene oxide sheet (GO) were prepared. Nanocomposites were obtained with different proportions between polyaniline and MnO₂. Morphological and characterization were carried out.

Abstract

Nanocomposites can be an alternative to solve various problems arising from technological advances, such as in energy storage devices and in the electroanalytical methods for the detection of analytes in low concentration. This interest is due to their innovative characteristics that result from the nanoscale in which these materials are found and by the combination of the properties of different nanomaterials. Thus, nanomaterials such as graphene oxide (GO), which present formidable physical and chemical properties, are widely used in the synthesis of nanocomposites. Metal oxides and hydroxides and conducting polymers such as polyaniline (PANI) are very interesting and widely used in the cited applications. This range of applications is expected for this class of materials, since nanocomposites can provide synergistic properties that can meet this demand for improved materials. In this work, different samples of GO were prepared from the exfoliation of graphite oxide (Gr-O) to be used in synthesis of nanocomposites prepared in a single reaction stage containing manganese oxide (MnO₂) and PANI, where the concentration of aniline and HCl were evaluated. Several techniques have been used for characterizations such as DRX, SEM, Raman, FT-IR, UV-Vis spectroscopy, TGA and cyclic voltammetry. Dispersions of GO with high percent yield and different sheet sizes were obtained by varying the exfoliation method. Binary and ternary nanocomposites containing GO with large sizes, PANI in the form of emeraldine salt and birnessite-type MnO₂ with particles between 10 and 20nm were prepared. The acid concentration in the synthesis affected directly the ratio between MnO₂ and PANI, where the higher concentration of HCl used in the synthesis the lower the amount of MnO₂ in the nanocomposite. These materials will be evaluated as electrochemical sensors for the detection of H₂O₂ and as supercapacitors.

Acknowledgments

The authors acknowledge the FAPESC and ACADE financial support and the Materials Chemistry Group (GQM – Grupo de Química de Materiais) from UFPR by the infrastructure for the materials' characterization.

Área: INONº de Inscrição: 00648

Characterization of graphene-like materials from sugarcane bagasse

Mayara R. Fornari^{1*} (PG), Juliana Schultz¹ (PQ), Lídia C. da Silva¹ (IC), Marcio Vidotti¹ (PQ), Antonio S. Mangrich¹ (PQ)

mangrich@ufpr.br; mayaraforanari@ufpr.br

¹Federal University of Paraná, Av. Coronel Francisco H. dos Santos, 100, Department of Chemistry, Jardim das Américas, CEP: 81530-000 - Curitiba, PR – Brazil

Key words: *graphene, biochar, biomass, pyrolysis, reject*

Highlights

Development of graphene-like material with potential application in supercapacitors. Agroindustrial waste reuse. Obtaining biochar with high specific surface area.

Resumo/Abstract

Waste from agro-industry ends up causing great environmental and social impacts when it is not properly destined. However, through the thermal degradation of these biomasses in a reduced oxygen atmosphere, agroindustrial co-products may have important other functionalities.

This work aimed to characterize the solid fraction, biochar, produced by the pyrolysis of sugarcane bagasse (*Saccharum officinarum*) at 900 ° C for 2 hours in an inert atmosphere of N₂. With the objective of finding structures that are similar to graphens or their oxides for the development of electroactive compounds, in the application in supercapacitors.

Several techniques were used to characterize the biochar produced in this work. Through the infrared spectroscopy technique, the structural rearrangement of the aromatic carbon content and the reduction of the functional groups in relation to their biomass were observed. By Raman spectroscopy, it was possible to observe the D band (between 1300 and 1400 cm⁻¹), known as the defect band, but was also observed the G-band (between 1500 and 1700 cm⁻¹), which is attributed to the vibrations of C = C sp² bonds in aliphatic chains and aromatic rings, indicating the presence of graphite structures. With the aid of scanning electron microscopy (SEM), one can analyze that the formed biochar presents a similar structure to its original biomass. Thus, even at high temperatures, the biomass used influences the characteristics of the final product. By the BET (Brunauer, Emmett, Teller) method it was possible to verify the formation of a material with high surface area (799.5 m² g⁻¹). Through transmission electron microscopy (TEM), the exfoliated biochar on high energy ultrasound had a sheetlike structure, such as graphene. The material was used in galvanostatic deposits with load of 1.6 C cm⁻², where the steel mesh electrodes were modified with polyaniline (PANI) and biochar, forming the composite material PANI / biochar on its surface. For comparison, PANI-modified electrodes were also made. In the cyclic voltammetric assays, the modified PANI / biochar composite electrodes presented better response in the capacitive current in relation to the electrodes modified with PANI only. Moreover, they presented a good stability in the redox cycles. With these results, it is obtained indications that this type of biochar (graphene like) has potential applicability in the development of electroactive materials.

Thus, through the slow pyrolysis of industrial waste, it was possible to form structures similar to graphene, as evidenced by the characterization techniques. The combination of biochar with PANI gives rise to a composite material which electrochemical profile demonstrates potential applicability to the development of energy storage devices, being an alternative for replacing graphene.

Agradecimentos/Acknowledgments

CAPES, CNPq, UFPR, INCT/EA, DQ/UFPR and CME/UFPR.

Characterization of ozone episodes and ozone precursors in Irajá District, Rio de Janeiro

Cleyton M. da Silva (PQ),^{1,2} Débora Mendes (PG),^{2*} Michelle André (PG),² Graciela Arbilla (PQ).²
martins.cleyton@gmail.com; mendesrodriguesdebora@gmail.com

¹Universidade Veiga de Almeida, Campus de Maracanã; ²Instituto de Química, UFRJ

Key Words: Volatile Organic Compounds, Tropospheric Ozone, Air Quality Models.

Highlights

Ozone episodes.

Characterization of ozone precursors using Methods TO-11A and TO-15 from US EPA.

Air quality monitoring using a simple air quality model OZIPR and the photochemical mechanism SAPRC.

Resumo/Abstract

Tropospheric ozone is a very important pollutant in an urban atmosphere and is formed from the interaction between nitrogen oxides (NO_x) and volatile organic compounds (VOCs). Irajá District, in the city of Rio de Janeiro, presents the second worst Air Quality Index (AQI), with frequent violations to the air quality standards for ozone. The goal of this work was the study of VOCs concentrations in Irajá District and to analyze the meteorological and criteria pollutant concentrations determined in the Air Quality Station of the Secretaria Municipal de Meio Ambiente, located in Nossa Senhora da Apresentação Square, a central area in the District.

Carbonylic compounds (CC) and hydrocarbons were determined using Method TO-11A and Method TO-15 from US EPA, respectively.¹ The mean concentration for the two main CC, formaldehyde and acetaldehyde were $2.49 \pm 0.54 \mu\text{g m}^{-3}$ and $3.13 \pm 0.79 \mu\text{g m}^{-3}$, respectively, with a formaldehyde/acetaldehyde ratio of 0.8. The most abundant hydrocarbons (in the interval C₄-C₁₂) were methylcyclopentane, isobutane, n-butane, isopentane, n-pentane, cis-2-pentene, 2-methylpentane, 3-methylpentane, 2-methylhexane, benzene, toluene, n-octane, ethylbenzene, o-xylene, n-nonane and (m + p)-xylene. Total concentrations were in the interval from 77.56 to 286.09 $\mu\text{g m}^{-3}$. Benzene mean concentration was 4.98 $\mu\text{g m}^{-3}$ and individual values were in the interval 1.31 $\mu\text{g m}^{-3}$ – 19.55 $\mu\text{g m}^{-3}$. Following World Health Organization recommendations, benzene is carcinogenic to humans and no safe level exposure can be indicated, the limit established by the European Union Directive is 5 $\mu\text{g m}^{-3}$ (annual mean) indicating that benzene levels in Irajá are of health concern.²

Using the box air quality model OZIPR and the photochemical mechanism SAPRC the ozone concentrations were simulated for two sampling days, one with an Air Quality Index “Inadequate” and the other “Regular”.^{3,4} For days with “Good” and “Regular” AQI, total mean concentrations as well as the speciation of organic compounds were similar to those previously reported for Tijuca, a typical residential and commercial area previously studied in our laboratory.

The results indicate that the cause of the ozone episodes (“Inadequate AQI”) may be the relative low NO_x concentrations when compared with VOCs concentrations. The analysis of meteorological data shows that high VOCs concentrations are related to west winds which carry the air masses originated in the industrial and petrochemical area. This is, to our knowledge, the first report discussing the ozone episodes in this District.

References:

1. US EPA, 1999. Environmental Protection Agency. Compendium of Methods for the Determination of Toxic Organic Compounds in Ambient Air - Second Edition, Center for Environmental Research Information. <<https://www3.epa.gov/ttnamti1/files/ambient/airtox/tocomp99.pdf>>.
2. Directive 2008/50/EC of the European parliament and Council.
3. GERY, M.W.; CROUSE, R.R. User's Guide for Executing OZIPR, US Environmental Protection Agency, Research Triangle Park, NC, EPA-9D2196NASA. 1990.
4. CARTER, W.P.L., 2018. SAPRC Atmospheric Chemical Mechanisms and VOC Reactivity Scales. Disponível em <http://www.cert.ucr.edu/~carter/SAPRC/>.

Área: TEC

Nº de Inscrição: 00652

GC-MS study of the aqueous fraction obtained by the slow pyrolysis of *Passiflora edulis* and *Jatropha curcas* seeds cakes

Priscila Schroeder (PG)¹, Taciani de S. Fernandes (IC)¹, Taíssa da S. Cabral (IC)¹, Monique K-K. Figueiredo (PQ)², Márcia C. C. Veloso (PQ)¹, Gilberto A. Romeiro (PQ)^{1*}.

priscilaschroeder@id.uff.br; gilbertoromeiro@id.uff.br

¹Departamento de Química Orgânica, UFF - Niterói - RJ. ²Departamento de Pretróleo e Gás, IFRJ – Duque de Caxias - RJ

Key words: Pyrolysis, Aqueous fraction, GC-MS, Biomass.

Highlights

Analyze the composition of the slow pyrolysis aqueous fractions by GC-MS. Aqueous fractions have a complex organic composition rich in phenolic derivatives, alcohols, ketones and esters.

Abstract

Thermal decomposition of the biomass by pyrolysis process generates three products: solid, liquid and gas. Liquid product is composed of two fractions: aqueous fraction and bio-oil. Aqueous fraction of pyrolysis contains many organic compounds such as low molecular mass aldehydes and phenolic compounds, and its use is already well established in several countries, had been widely applied to provide smoke flavor in foods¹. New applications have been researched and a promising route is that of its use in agriculture as an additive of organic fertilizers and aid in the fight against agricultural pests reducing the use of agricultural pesticides². However, before determining the type of application it is necessary to know the composition of this product. Therefore, this study aimed to characterize the organic composition of the aqueous fractions, by GC-MS, obtained in the pyrolysis of cakes of the passion fruit seeds (PSC) and jatropha seed (JSC). Aqueous fractions were obtained in the slow pyrolysis process, through the condensation of the gases generated at 400°C, with an average yield of 26% for PSC and 25% for JSC and were subjected to sequential liquid-liquid extraction using three solvents: hexane, dichloromethane and ethyl acetate. Organic extracts were treated with anhydrous magnesium sulfate, concentrated and analyzed in a GC-MS. The major substances were identified by comparison with the mass spectra of the NIST 27 and 147 libraries with similarity greater than 80%³.

The main substances identified in the PSC chromatograms were (i) phenolic derivatives such as: 1,2-benzenediol, 2-methoxy-phenol, 4-ethyl-2-methoxy-phenol; (ii) alcohols :2-furanmethanol; (iii) ketones: 3-methyl-2-cyclopenten-1-one, 3-ethyl-2-hydroxy-2-cyclopenten-1-one. (iv) Carboxylic acids and esters such as decanoic acid, 12-methyl-tetradecanoic acid methyl ester, hexadecanoic acid, oxacycloheptadec-8-en-2-one. There are also many substances that have different functional groups but the great predominance is of aromatic substances.

For JSC, substances such as (i) phenolic derivatives were identified: 4-methyl-phenol, 2,6-dimethoxy-phenol, 2-methoxy-phenol, (ii) acids and esters derivatives: 2-ethyl-2-methyl-eicosanoic acid methyl ester; (iii) alcohols: 4-tetradecanol, 2-furanmethanol, (iv) aromatic: phenyl carbamate, 4-pyridinol, and (v) hydrocarbons such as: 6-methyl-2-heptyne.

Through the use of GC-MS it was possible to identify a large number of substances present in extracts of the pyrolysis aqueous fraction. This study may contribute to the investigation of applications and treatments for this product.

¹CZERNIK, S.; BRIDGWATER, A. V. *Energy & Fuels*, v. 18, n. 2, p. 590–598, 2004.

²CAMPOS, Á. D. *Circular Técnica EMBRAPA*, n. 65, p. 1–8, 2007.

³SCHROEDER, P.; PEREIRA, B.; ALVES, G. J. *Anal. Appl. Pyrolysis*, p. 1–14, 2017.

Acknowledgments

The authors thank CAPES, CNPq, FAPERJ and UFF.

Catalyst-free conjugated addition of indolizines to *in situ* generated oxidized Morita-Baylis-Hillman adducts.

Thiago Sabino da Silva (PG)^{1*}, Lucas André Zeoly (PG), Fernando Coelho (PQ)¹

thiagosabinodasilva@gmail.com; coelho@iqm.com.br

¹Instituto de Química, Universidade Estadual de Campinas (UNICAMP)

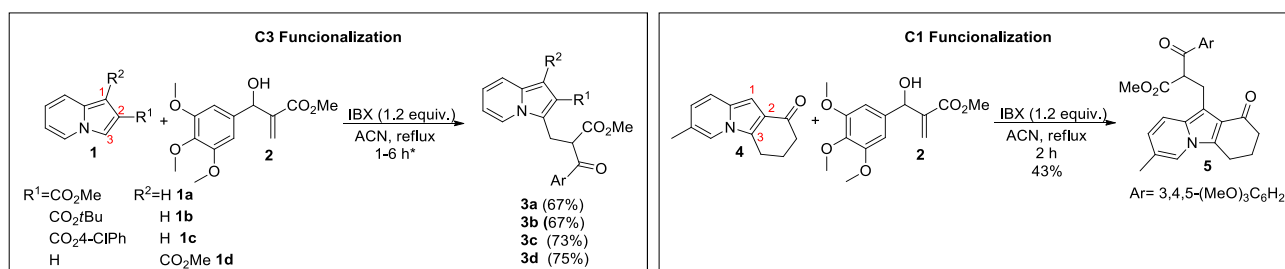
Palavras Chave: Indolizines, Morita-Baylis-Hillman, conjugated addition, one-pot procedure.

Highlights

The indolizine core offers a wide range of functionalization possibilities. In this work a catalyst-free conjugated addition of indolizines to "*in-situ*" generated oxidized Morita-Baylis-Hilman (MBH) was reported for the first time, yielding highly functionalized products.

Resumo/Abstract

The conjugated addition of aromatic nitrogenated compounds to α,β -insaturated systems is a powerful methodology to construct new C-C bonds in a efficient way, however, the majority of these methodologies explore the more electronic rich nucleus like indoles and pyrroles. In 2017, our group developed for the first-time an organocatalyzed asymmetric conjugated addition of 2-carboxylindolizines to enones using chiral phosphoric acids,¹ this work was recently expanded by us aiming the synthesis of a library of potential bioactive seven-membered lactones.² In continuation of our efforts to functionalize the indolizine nucleus and inspired by another previous research work,³ we reported here, the first examples of a catalytic free conjugated addition of indolizines to MBH adducts (Scheme 1). The conjugated addition of 2-substituted indolizines (**1a-1c**) gives only the **C3** substituted product, overcoming a challenge found by some transition metals methodologies when the carbons **C1** and **C3** were free. Inspired by the success of these preliminary tests we decided to test a polycyclic indolizine **4** that have only the less nucleophilic **C1** carbon free and, four our pleasure, the desired product **5** were obtained (Scheme 1).



Scheme 1. Synthesis of polyfunctionalized indolizines by conjugated addition. * Unoptimized reactions time.

We expect to continue explore the chemical diversity that this reaction offers so a major scope of both, indolizine and MBH adducts are on going in our laboratory. Further these highly functionalized adducts will be derivatized to give polycyclic compounds like lactones and lactams fused to the indolizine core.

References

- Correia, J. T. M.; List, B.; Coelho, F., C. *Angew. Chem. Int. Ed.* **2017**, 56 (27), 7967-7970.
- Silva, T. S. Andricopulo., A. D.; Coelho, F.A. 17th Brazilian Meeting on Organic Synthesis, Salvador, 2018; p 90665.
- Santos, M. S.; F., et al. *J. Org. Chem.* **2016**, 81 (15), 6626-6639.

Agradecimentos/Acknowledgments

This study was financed in part by the Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior - Brasil (CAPES) - Finance Code 001". The authors also thanks the Chemistry Institute of UNICAMP, FAPESP and CNPq).

Área: QPN

Nº de Inscrição: 00655

Dereplication strategies for discovering cytotoxic compounds from *Swinglea glutinosa* (Rutaceae) and its associated endophytic fungi.

Ana C. de Carvalho (PG),¹ Luiza de Camillis Rodrigues (IC),² Alany Ingrid Ribeiro (PG)³, Wagner Donizetti Santana Vital (PG),⁴ Maria Fátima das G. F. da Silva (PQ),⁵ Livia S. Medeiros (PQ),⁶ Thiago A. M. Veiga (PQ)*.⁷

ana_c.carvalho@hotmail.com; thiagoamveiga@gmail.com

^{1,2,4,6,7} Departamento de Química, UNIFESP;

^{3,4} Departamento de Química, UFSCAR.

Key words: *Swinglea glutinosa*, acridonic alkaloids, endophytic fungi, leukemia assays.

Highlights

A chemical study of *Swinglea glutinosa*'s secondary metabolism and its associated endophytic fungi is being carried out. For this purpose, we have employed dereplication approaches by liquid chromatography coupled to high resolution mass spectrometer (LC-HRMS).

Resumo/Abstract

Swinglea glutinosa is a monotypic plant belonging to the Rutaceae family. It is a plant originated in Southeast Asia, precisely in the Philippines; already disseminated throughout the world, it can be found in Latin America, mainly in Colombia and Brazil¹. Popularly called lemon-swinglea, it is widely used as an ornamental plant.

From a chemical point of view, there are already studies on some of its metabolites and their biological properties. It is characterized by the presence of alkaloids, especially acridones², amides (benzoylthyramines)³, among others. Some biological activities were associated with acridones, such as: herbicide², cytotoxic⁴ and anti-parasitic⁵.

Dereplication strategies allow the analysis of a crude fraction or extract without isolation; guided or not by biological tests. In this sense, the metabolites isolated from *S. glutinosa* will be evaluated against human leukemia cells: Jurkat, K-562, Kasumi-1 and Raji, since the hexane and ethyl acetate fractions of the *S. glutinosa* ethanolic extract presented cell viability below 10% against Jurkat and Kasumi-1. In addition, the substances will also be evaluated against other cancer strains: B16F10-Nex2, MCF-7, A2058 and HeLa; as well as on the non-tumorigenic lineage, T75. Until now, some compounds never previously reported for *S. glutinosa* have been isolated: Lansiumamide B (1) and C (2), and Lansamide I (3) (Figure 1), as well as others known acridones. These compounds will be evaluated on the cancer cells mentioned above.

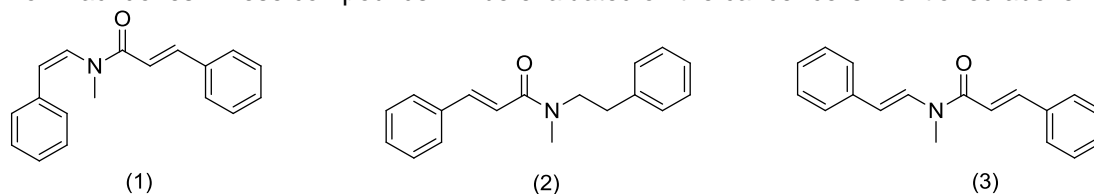


Figure 1: Lansiumamide B (1) and C (2), and Lansamide I (3)

On the other hand, eleven endophytic fungi were isolated from the plant, which were inoculated in different culture media, like as: BDA (7 and 14 days), YES (7 and 14 days), rice (35 days) and hominy (35 days). All extracts obtained were analysed by LC-HRMS in order to select the two most talented strains. After that the fungi will be cultivated on large scale aiming the isolation of these compounds. Therefore, this work intends to contribute to the discovery of new substances with cytotoxic action, besides enriching the chemical knowledge of the *Swinglea* genus, and also to explore the metabolism of the obtained fungi.

Agradecimentos/Acknowledgments

CAPES, CNPq, FAPESP

REFERENCES

1. Weniger, B. et al. *Nat. Prod.* **2001**, 64, 1221.
2. Arato Ferreira, P. H. et al. *Biodiversity*, **2016**, 13, 100–106.
3. Do Nascimento Cerqueira, C. et al. *Química Nova*, **2012**, 35, 11, 2181–2185.
4. Braga, P. A. C. et al. *Nat Prod Res*, **2007**, 21, 1, 47–55.
5. Vieira, P. C. et al. *J. Braz. Chem. Soc.* **2009**, 20, 644–651

Microwave-assisted liquid-liquid extraction of phenolic compounds from the aqueous bio-oil fraction of guava seed.

Antonia Regina S. Gois (PG)^{1*}, Solange C. A. Cerqueira (PG)¹, Laryssa M. Santos (IC)¹, Lisiane S. Freitas (PQ).¹

antonia_gois@hotmail.com*

¹ ^aChemistry Department, Federal University of Sergipe, Campus Prof. José Aloísio de Campos, Av. Marechal Rondon, s/n, Jardim Rosa Elze – CEP: 49100-000 – São Cristóvão/SE, Brazil

Keyword: *Extraction, MALLE, Aqueous phase, phenols, pyrolysis.*

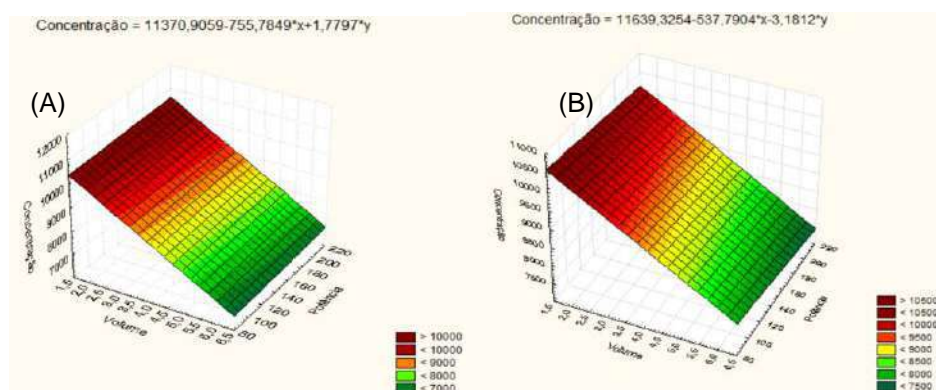
Highlights

A novel approach for phenols extraction in the aqueous phase bio-oil; The microwave-assisted liquid-liquid extraction increases phenols yields; GC/MS analysis showed presence of large amounts of phenolic compounds in aqueous phase pyrolysis.

Resumo/Abstract

The aqueous phase from the pyrolysis process consists of a complex mixture rich in organic compounds, including sugars, carboxylic acids, hydrocarbons, alcohols, furans, and phenolic compounds. These compounds can be recovered and reused in the chemical and petrochemical industry, thus minimizing petroleum consumption. The aim of this work is to study parameters for the microwave-assisted liquid-liquid extraction (MALLE) method of phenolics compounds present in the aqueous bio-oil fraction derived from guava seed pyrolysis. The pyrolysis process was performed with about 300 g of the biomass at 600 ° C with a nitrogen flow of 100 mL min⁻¹, the separation of the organic/aqueous phases was performed by decantation. To evaluate the organic compounds presents in the aqueous phase, the MALLE was applied using ethyl acetate as the solvent. The parameters used in the extraction were statistically evaluated using an experimental design 2², where the study variables were the volume and the power in the times of 60 and 180 seconds. The extraction behavior at work can be observed through the response surface plots in Figure 1.

Figure 1. Response surface graphs for power (W) versus volume (mL) in 60 seconds (A) in 180 seconds (B).



The efficiency of the extraction was evaluated in comparison to the conventional extraction carried out in previous works of the group. The total phenolics concentration in LLE was 4175 mg/L, while the MALLE obtained a concentration of 255% greater than conventional extraction. The microwave, besides allowing a short time of extraction (60 seg), showed that in smaller volumes (2 mL) there is a better efficiency in the extraction being an economically viable method. The potency had no significant effect on the extraction process based on the proposed model.

Agradecimentos/Acknowledgments

[CAPES, CNPQ, LAC, UFS].

Área: AMB

(Inserir a sigla da seção científica para qual o resumo será submetido. Ex: ORG, BEA, CAT)

Nº de Inscrição: 00657

(Inserir o número de inscrição do autor que fez a submissão)

Carbon/iron composites prepared from activated carbon and iron mining waste for the removal of emerging contaminant

Regiane D. F. Rios (PG),¹ Patrícia J. B. Bueno (IC),¹ Flávia C. C. Moura (PQ)¹.

regianed@ufmg.br

¹Departamento de Química, UFMG.

Keywords: Carbon/iron composites, Activated Carbon, Iron mining waste, Photocatalysis, Amoxicillin, Emerging contaminant.

Highlights

Composites prepared using low cost precursors, adsorbent based on activated carbon and iron mining waste; High removal of amoxicillin (above 93%) using the combined process of adsorption and photocatalysis.

Abstract

Composites materials based on carbon and different Fe phases were investigated to remove the emerging contaminant, amoxicillin (AMX). These composites were prepared from two low cost precursor: activated carbon obtained from residual Macauba biomass (AC), a waste of biofuel production and iron mining waste (RP).

AC was used as a reducing agent, mixed with RP, and thermally treated at different temperatures (300, 500 and 800 °C) under N₂ flow (50 mL min⁻¹), producing reduced iron phases. Mössbauer and X-ray powder diffraction suggested that the treatment of the materials at 300 (C/R300) and 500 °C (C/R500) produced only hematite (α -Fe₂O₃) and magnetite (Fe₃O₄), respectively. While at 800 °C (C/R800), mainly metallic iron (Fe⁰) was obtained.

The composites were used in combined processes of adsorption and photocatalysis to remove AMX and the materials C/R300 and C/R800 presented total remove of 93.01 and 88.8%, respectively.

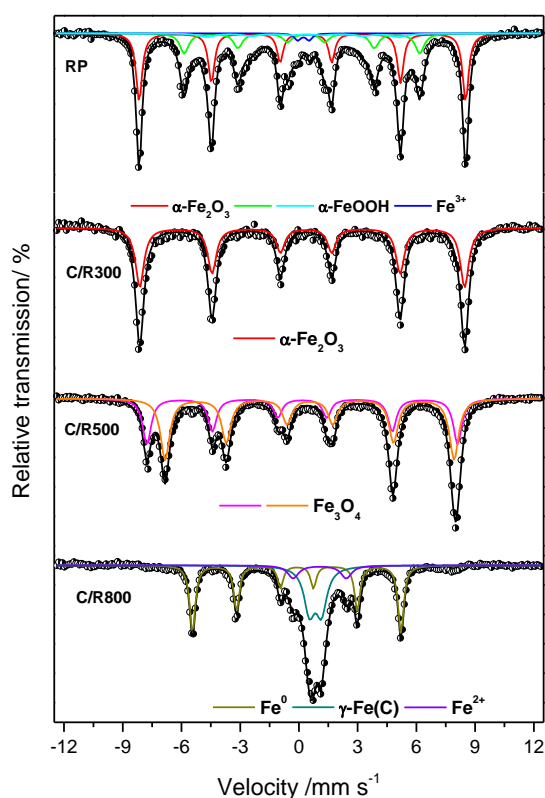


Fig. 1- Mössbauer spectra of C/Fe composites

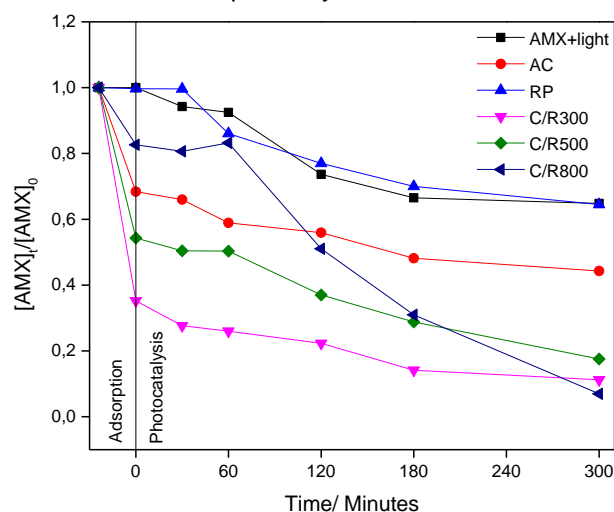


Fig. 2- Remove of AMX: C₀: 250 mg L⁻¹; 30 mg of C/Fe composites and 10 mL of AMX by combined processes of adsorption (24 hours) and photocatalysis (5 hours).

Acknowledgments

The authors are grateful to UFMG, CNPq, CAPES, FAPEMIG, INCT-Midas and CDTN.

Avaliação do perfil químico por CLAE-DAD e do potencial antioxidante de *Chamaecrista duckeana* I&B

Daniele R. Lima (PG),^{1*} Cristiane F. Paiva (PG),¹ Maria Gleiziane A. Franca (PG),¹ Francisco Wendell M. Nascimento (IC),¹ Maria Goretti V. Silva (PQ).^{1,2}

dany_rodri@hotmail.com

¹Departamento de Química Orgânica e Inorgânica; ²Departamento de Química Analítica e Físico-química- Universidade Federal do Ceará – UFC.

Palavras Chave: Quercetina, Catequina, DPPH, Flavonoides, Fenóis.

Highlights

Evaluation of the chemical profile by HPLC-DAD and antioxidant potential *Chamaecrista duckeana* I & B. The chemical profile is reported for the first time in *Chamaecrista duckeana*.

Resumo

As espécies de *Chamaecrista* Moench são largamente distribuídas no Brasil, com poucos estudos quanto à composição química do gênero. Este trabalho objetivou avaliar o perfil químico por CLAE-DAD bem como o potencial antioxidante de *Chamaecrista duckeana* coletada em Massapê – Ce (EAC = 61466). O material botânico (folhas, flores, galhos e vagens) foi extraído com metanol seguido por sonicação por 15 min (3X). Os extratos obtidos (0,1g/mL) foram analisados por CLAE-DAD (5-100% de MeOH, 0,1% ácido fórmico / 45 min, 40°C, volume de injeção: 15 µL e fluxo: 1,0 mL/min). A capacidade antioxidante foi avaliada pelo método do sequestro de radicais livres (DPPH)¹ expressa em IC₅₀ (µg/mL). Os fenólicos totais e flavonoides foram quantificados por espectrofotometria² através dos métodos de Folin-Cicateau e por reação com cloreto de alumínio (2%) respectivamente (Tabela 1). Análise dos cromatogramas obtidos permitiram identificar por comparação com padrões autênticos (t_RI = 10.958 min; t_RII = 22.462; 254nm), catequina (I) nos galhos e nas vagens e quercetina (II) nas folhas e galhos (Figura 1). A expressiva atividade antioxidante apresentada pela planta pode ser atribuída parcialmente, a presença de catequina e quercetina, compostos que apresentam significativa atividade antioxidante. Estas substâncias são inéditas na espécie *Chamaecrista duckeana* (P. Bezerra & Afr.Fern.) H.S.Irwin & Barneby.

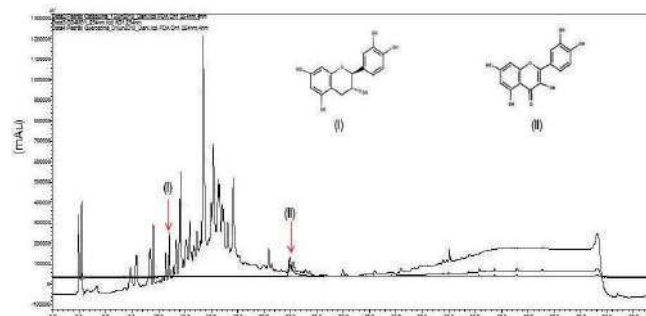
Os autores agradecem ao CNPq, CAPES e FAPESP.

Tabela 1. Atividade antioxidante, teor de flavonoides e fenólicos totais em extratos metanólicos de *Chamaecrista duckeana*.

| Partes da planta | IC ₅₀ (µg/mL) (Média±Desvio Padrão) | FT (mg de EAG/g de extrato MeOH±DP) | FLAT (mg de ER/g de extrato MeOH±DP) |
|------------------|--|-------------------------------------|--------------------------------------|
| Flores | 281,54 ± 4,19 | 64,62±4,67 | 61,78±0,47 |
| Folhas | 283,48 ± 3,15 | 57,62±0,00 | 134,94±0,00 |
| Galhos | 165,71 ± 6,94 | 62,96±7,52 | 36,50±0,64 |
| Vagens | 261,08 ± 2,53 | 51,71±2,12 | 56,26±0,84 |

FT: Fenólicos Totais; FLAT: Flavonoides Totais; EAG: Equivalente de Ácido Gálico; ER: Equivalente de Rutina;

Figura 1. Cromatograma (CLAE-DAD-254 nm) representativo dos extratos metanólicos de *Chamaecrista duckeana*.



1. YEPEZ, B. et al. Fluid Ph. Equilibria. 194: 879, 2002.

2. MAIA, I. R. O. et al. J Pharmacogn Phytochem, 6: 1321, 2017.

Helical carbon nanotubes synthesis using organometallic complexes for removal emerging contaminants.

Rubens L. F. Filho (PG)¹, Ana Paula C. Teixeira (PQ)¹, Arilza O. Porto (PQ)¹.

rubensfreitas@gmail.com

¹Departamento de Química, UFMG.

Keywords: Helical carbon nanotubes, Organometallic complexes, Adsorption of emerging contaminants, 17- α -ethinylestradiol.

Highlights

Unsupported helical carbon nanotubes synthesis obtained by CVD process. Use of organometallic complexes as catalysts for CVD process. Adsorption of emerging contaminant 17- α -ethinylestradiol.

Abstract

This work reports the use of organometallic complexes (iron and nickel dithiocarbamates) as precursors and catalysts for growth carbon nanomaterials (CNM), specially carbon nanotubes (CNT). The CNT's were grown by CVD (Chemical Vapor Deposition) process using a tubular furnace with quartz tube at 800 °C under N₂ atmosphere, and ethanol as carbon source¹. The CNT's were characterized by TG analysis, SEM, TEM, Raman and XRD. The Scanning Electron Microscopy (SEM) images, (Figure 1a and 1b), showed the formation of helical carbon nanotubes². The Raman spectra (Figure 1c), confirm the presence of carbonaceous structures (G and D bands)³. The CNT's were synthesized without the use of a supported matrix, eliminating further purification steps.

Adsorption tests for the removal of hormone 17- α -ethinylestradiol (Figure 1d), in aqueous media, by the prepared materials, showed that the adsorption capacity range from 3 mg.g⁻¹ to 47 mg.g⁻¹.

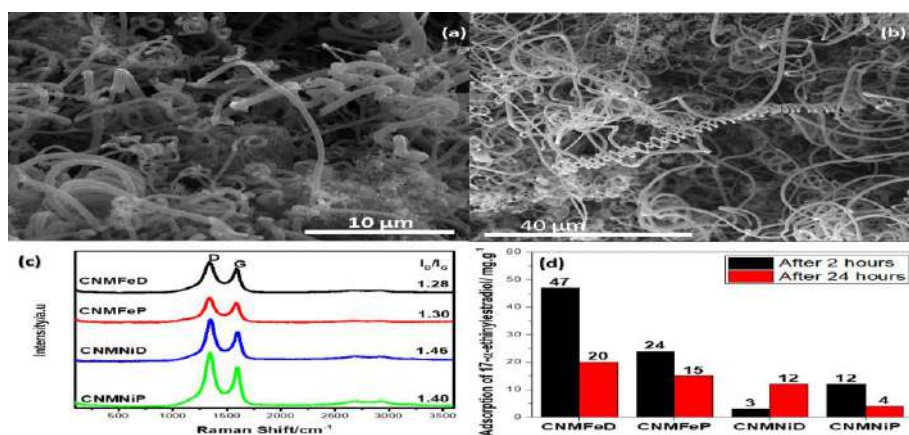


Figure 1: (a-b) SEM images of helical carbon nanotubes; (c) Raman Spectroscopy; (d) Adsorption of 17- α -ethinylestradiol.

In this work a new preparation method to obtain helical carbon nanotubes was used and the obtained material showed to be very effective to remove the contaminant 17- α -ethinylestradiol from aqueous solutions.

References

- Da Silva, H. V. *et al.* *J. Braz. Chem. Soc.* **29**, 1904–1916 (2018).
- Shaikjee, A. & Coville, N. J. *J. Adv. Res.* **3**, 195–223 (2012).
- Cuesta, A. *et al.* *Carbon N. Y.* **32**, 1523–1532 (1994).

Agradecimentos/Acknowledgments

CNPQ, CAPES, FAPEMIG, INCT Midas e Departamento de Química-UFMG

Área: EDU*(Inserir a sigla da seção científica para qual o resumo será submetido. Ex: ORG, BEA, CAT)***Nº de Inscrição: 0660***(Inserir o número de inscrição do autor que fez a submissão)*

A Short ARG (Alternate Reality Game) in High School

Thiago Cardoso de Deus (PG), Nyuara Araújo ds Silva Mesquita (PQ) e Márlon Herbert Flora Barbosa Soares (PQ).

thiagocdeus@yahoo.com.br; marlon@ufg.br;

Laboratório de Educação Química e Atividades Lúdicas - Instituto de Química – Universidade Federal de Goiás

Palavras Chave: *chemistry teaching, arg; high school.*

Highlights

This work shows the possibilities of ARG application in high school, taking out the student of his passivity in classroom. We propose a Short ARG realized em two hours during class period.

Resumo/Abstract

A utilização de jogos no ensino de ciências vem ganhando espaço ao longo das últimas décadas. O número de trabalhos publicados em eventos científicos aumentou significativamente no século XXI (Soares, 2015). Brougere (2002) associa a brincadeira ao aprendizado, afirmando que o simples ato de brincar pode gerar, além de divertimento, desenvolvimento físico e mental. Em termos de jogo educativo, utilizamos o Alternate Reality Game (ARG) ou Jogo de Realidade alternativa, uma narrativa que utiliza aspectos do mundo virtual tendo como base o mundo real, ou seja, transita entre realidades virtuais e realidades concretas. Uma característica marcante dos ARG é o uso das tecnologias, computadores, sites, blogs, smartphones, e-mail, etc. A narrativa deve contar uma história com começo, meio e fim, com a resolução de enigmas, na qual os jogadores influenciam os caminhos pelos quais a narrativa percorre mediada pelo uso das tecnologias, podendo contribuir para a quebra da dicotomia existente entre o homem e as TIC's, estimulando os alunos a utilizá-las enquanto jogam. Dessa forma, este trabalho pretende analisar a proposta de um Jogo de Realidade Alternativa (ARG) em uma escola de ensino médio de uma escola pública do Estado de Goiás, como estratégia de discussão dos conteúdos de Química. No total, participaram cerca de 100 alunos distribuídos em 4 turmas. Todos do terceiro ano do ensino médio. As atividades foram filmadas, transcritas e analisadas. O objetivo era descobrir o assassino de um professor, por meio de pistas espalhadas na escola. Ao resolver uma pista, esta levava a outra e assim por diante, até o encontro final, onde as turmas apresentavam às outras, quem era o assassino do professor e seus motivos. Todas as pistas contavam com conceitos químicos para sua resolução, ou ainda, a realização de um experimento. Neste trabalho, apresentaremos a discussão conceitual da pista 3, que diz respeito ao conceito de densidade. Os alunos tinham que determinar, em uma sala ambiente, as densidades de 4 materiais disponíveis: ferro, plástico, bola de isopor e fio de cobre. Os resultados aproximados dariam origem a uma senha para a próxima pista. Neste caso, a análise das discussões nos mostrou deficiências na apropriação da linguagem científica. Os alunos ainda confundem densidade com massa, ou ainda, com peso. Foi possível observar que há uma compreensão superficial dos conceitos científicos e falta de preocupação com aspectos quantitativos relacionados ao experimento. Em exemplo simples, duas turmas mediram a densidade dos dois fios de cobre de tamanhos diferentes, disponibilizados pela estratégia. No entanto, eles entenderam que mesmo se tratando do mesmo material, poderiam ter valores de densidade diferentes, pois tinham tamanhos diferentes. Tal fator demonstra o não entendimento do conceito de densidade e sua relação de massa e volume. Em todos estes momentos, a presença do professor foi importante para aumentar a discussão e dirimir dúvidas, para que a atividade pudesse prosseguir. Finalmente, considerando-se a totalidade da estratégia, observamos o seu forte potencial avaliativo, principalmente no que se refere a avaliação diagnóstica, importante para a discussão conceitual em sala de aula.

SOARES, M. H. F. B. *Jogos em Ensino de Química*. Goiânia: Kelps, 2015.

BROUGERE, G. *Jogo e Educação*. Porto Alegre: ArtMed, 2002

Synthesis of new functionalized indolizines

Thais Rodrigues Arroio (PG),¹ Camila R. de S. Bertallo (PG), Giuliano C. Clososki (PQ)*, Zeki Naal (PQ), Rose M. Z. G. Naal (PQ), Laila A. Deliberto (PG).

thaarroio@gmail.com; gclososki@fcfrp.usp.br

¹Núcleo de Pesquisas em Produtos Naturais e Sintéticos, Universidade de São Paulo, Ribeirão Preto – SP, Brasil.

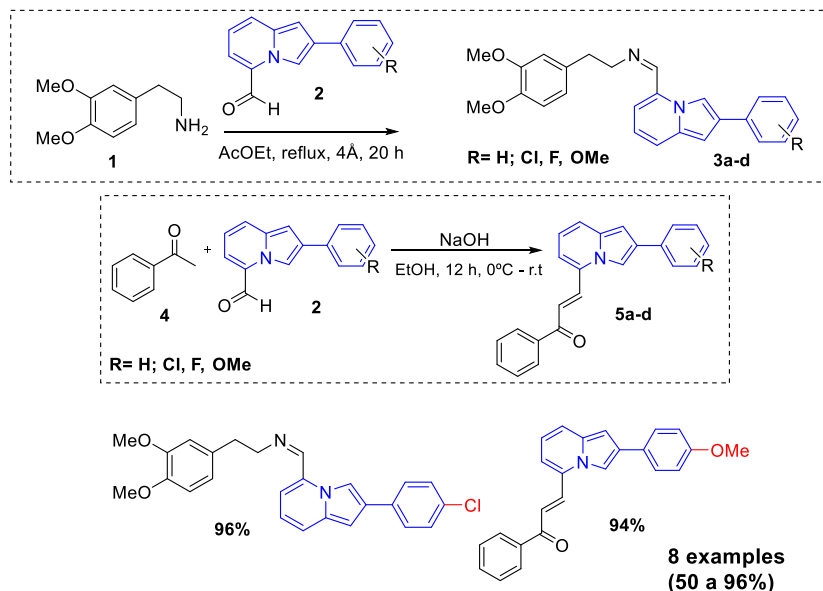
Keywords: indolizines, bioactives compounds, fluorescent compounds, chalcones, imines.

Highlights

Methodology study for preparation of new imines and chalcones; Functionalized indolizines with fluorescence properties.

Resumo/Abstract

Heterocycles are present in many scaffolds that have been showed biological activities. Among the most important N-heterocycles that contain pyridine ring are the indolizines.¹ Over the past years several research groups have been reported indolizines with different biological activities such as anti-inflammatory¹ and antioxidant.² More recently, due to interesting photochemical and photophysical properties some derivatives have been used as biosensors³, probes⁴, OLED (Organic Light-Emitting Diode) and drug markers.⁵ Because of that, our research group has been dedicated to studying methodologies in order to obtain new fluorescent indolizines. For this work, some 2-arylindolizines were reacted with *n*-BuLi followed by addition of DMF led to new fluorescent 2-aryl-5-carbaldehyde derivatives. In order to explore this property, the aim of this work is to extend the conjugation of these derivatives preparing chalcones and imines by methodologies shown in Scheme 1. The photochemical and photophysical properties are under analysis and are showing promising results.



Refence: ¹ Shrivastava, S. K.; Srivastava, P.; Bandresh, R.; Tripathi, P. N.; Tripathi, A. *Bioorganic Med. Chem.* **2017**, *25* (16), 4424–4432. ² Dinica, R. M.; Furdul, B.; Ghinea, I. O.; Bahrin, G.; Bonte, S.; Demeunynck, M. *Mar. Drugs.* **2013**, *11* (2), 431–439. ³ Kim, E.; Lee, Y.; Lee, S.; Park, S. B. *Acc. Chem. Res.* **2015**, *48* (3), 538–547. ⁴ Kim, E.; Koh, M.; Ryu, J.; Park, S. B. *J. Am. Chem. Soc.*, **2008**, *130* (37), 12206–12207. ⁵ Surpateanu, G. G.; Landy, D.; Lungu, N. C.; Fourmentin, S.; Surpateanu, G. J. *Heterocycl. Chem.* **2007**, *44* (4), 783–786.

Agradecimentos/Acknowledgments

This work was partially supported by FAPESP, CAPES, CNPq and the FINEP.

Sustainable production of biosurfactants using potato peel in liquid medium: a factorial design study

Beatriz M. Rodrigues (IC),^{1*} Wyllerson E. Gomes (PQ),¹ Augusto Etchegaray (PQ),² Renata K. Mendes (PQ),¹ Alessandra B. Nogueira (PQ),¹

aleborin@puc-campinas.edu.br; *beatrizmartini@gmail.com

¹Grupo de Pesquisa “Quimiometria e Desenvolvimento de Sensores”, Faculdade de Química, PUC-Campinas, Campinas -SP.

²Grupo de Pesquisa “Modelagem e Controle de Processos”, Faculdade de Química, PUC-Campinas, Campinas -SP.

keywords: Factorial design, Biosurfactant, potato peel, *Bacillus amyloliquefaciens*

Highlights

Surface tension measurements, guided by factorial design experiments, indicate the best values for volume of inoculum, medium composition and cultivation time to increase biosurfactant production.

Abstract

The world challenges of this century are water quality, food production and antibiotic resistance. With great potential for these demands, biotechnology is at the front. Microbial cell factories can decontaminate soil and water, protect plants and be a source of lead compounds to fight infections. *Bacillus amyloliquefaciens* are plant-growth promoting microorganisms. They produce an interesting class of cyclic peptides, the lipopeptides, which have antifungal and surfactant properties.¹ Besides their relevance to plant protection and thus food production, lipopeptides of the surfactin family are very potent biosurfactants with important applications for environmental remediation and chemical industries.² In the present work, the production of biosurfactants (mainly surfactins) by *B. amyloliquefaciens* 0G was evaluated under different conditions using factorial design 2³ (Fig. 1A).³ The results indicate, from normal plot (Fig. 1B) and Pareto chart (Fig. 1C), that the inoculum size (factor 2) is significant. In addition, we observed a synergic effect between factors “13” and “12”. Therefore, according to this study, the best parameters to increase biosurfactant production are respectively: inoculum size (15% v/v), nutrient medium (40mL), containing potato peel at constant ratio (0,12g/mL) and incubation time (72 h). These observations were based on the capacity of cell-free extracts to lower surface tension.⁴ These results agree with the work of Hmidet *et al.* (2017), indicating that aeration is an important factor in lipopeptide production.⁵

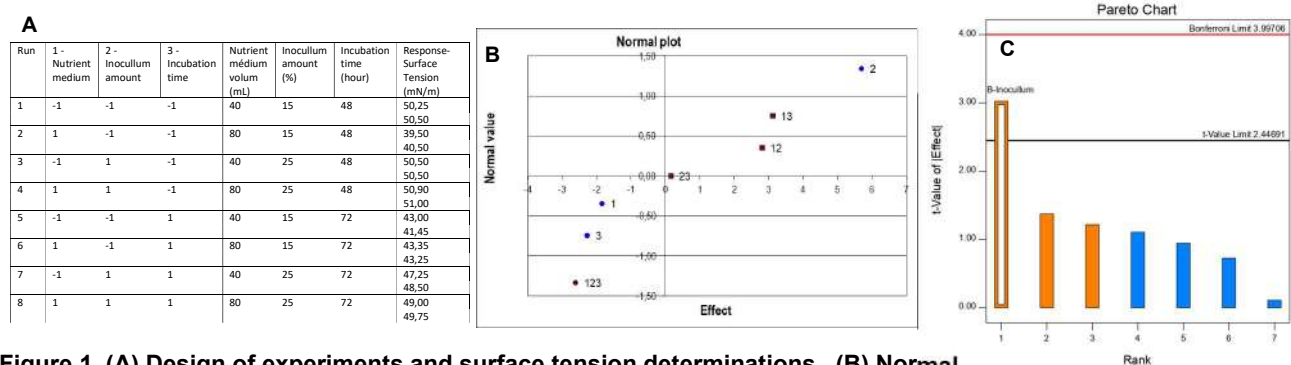


Figure 1. (A) Design of experiments and surface tension determinations. (B) Normal plot as a function of the effects. (C) Pareto chart.

References: ¹Etchegaray *et al.* (2008) *Arch. Microbiol.*, v. 190, p. 611-622; ²Etchegaray *et al.* (2017) *Can. J. Microbiol.*, 63(1), p. 46-60; ³Teófilo *et al.* (2006) *Quím. Nova*, v.29 (2), p.338-350; ⁴Sharma *et al.* (2018) *Biocatal Agric Biotechnol.*, v.16, p.132-139; ⁵Hmidet *et al.* (2017) *Biomed Res Int.*, 2017, 5893123.

Acknowledgements: This study was financed in part by the Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior – Brasil (CAPES) – Finance Code 001- scholarship PNP (Gomes, W.E). B.M.R is recipient of a scientific initiation scholarship from PUC-Campinas

Successive Digestions for Pre-Concentration and Ultra-Trace Determination of Br and I

Vitoria H. Cauduro (PG),¹ Morgana Doneda (PG),¹ Juliano S. Barin (PQ),² Paola A. Mello (PQ),¹ Érico M. M. Flores (PQ),¹ Rochele S. Picoloto (PQ).^{1*}

vitoriahcauduro@gmail.com; rspicoloto@gmail.com

¹Departamento de Química, Universidade Federal de Santa Maria - UFSM; ²Departamento de Ciência e Tecnologia dos Alimentos, UFSM

Palavras Chave: Br and I determination, Microwave-Induced Combustion, ICP-OES, ICP-MS, Ion Chromatography.

Highlights

Pre-concentration of Br and I by successive MIC digestions was evaluated as a novel sample preparation method. Analytes were determined by several analytical techniques (ICP-MS, ICP-OES and IC).

Resumo/Abstract

This study demonstrates the feasibility of successive digestions for Br and I pre-concentration and ultra-trace determination by ion chromatography or plasma-based techniques. Digestion and pre-concentration steps were performed by microwave-induced combustion (MIC). Whole milk powder for infant nutrition was used as an example of application. Samples were pressed as pellets (0.7 g) and combusted in closed quartz vessels pressurized with oxygen. Up to 5 sequential combustion cycles were evaluated using the same vessel without changing the absorbing solution. In each cycle, a new filter paper, igniter, and sample pellet were used. Ammonium hydroxide solutions (100 to 300 mmol L⁻¹) were evaluated for analytes absorption. Using 300 mmol L⁻¹ NH₄OH as absorbing solution, up to 5 sequential digestion cycles (total mass of 3.5 g) can be applied (Figure 1). Accuracy of the proposed MIC method was evaluated by using reference material RM NIST 8435 (whole milk powder) and results were in agreement with reference values. Final digests presented low residual carbon (<25 mg L⁻¹), allowing Br and I determination free of carbon-related interferences. By using the proposed method, it was possible to digest a high mass (3.5 g) of a relatively high fat content sample, using only 6 mL of a diluted alkaline absorbing solution. The method allowed detection limits as low as 0.70, 550 and 26 ng g⁻¹ for Br and 0.15, 240, 107 ng g⁻¹ for I by ICP-MS, ICP-OES and IC, respectively.

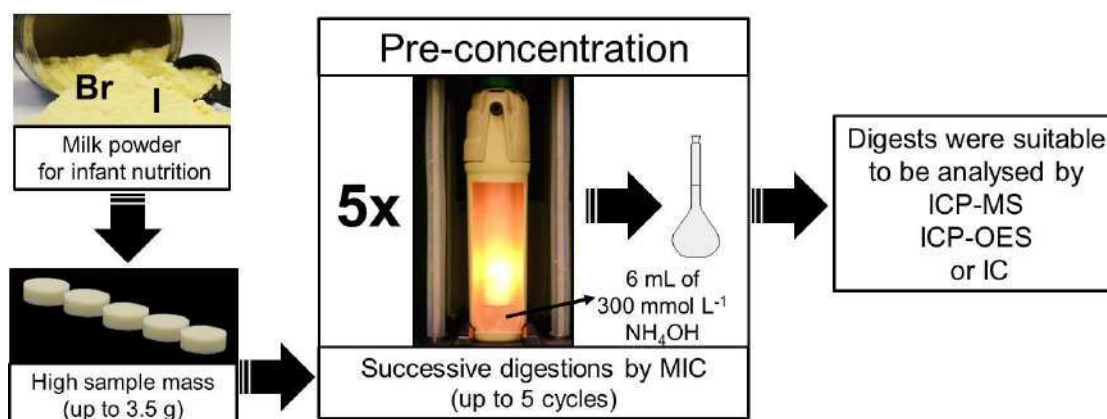


Figure 1. Summary of experimental procedures.

Área: QPN

Nº de Inscrição: 00664

Avaliação da atividade acetilcolinesterásica e antioxidante em *Libidibia ferrea* L.P. Queiroz e *Poincianella pyramidalis* Tul. nativas de Tauá-CE

Cristiane F. de Paiva (PG)^{1,2}, Maria I. S. Teixeira (IC)², Daniele R. de Lima (PG)^{1,2}, Anderson F. de Sousa (PG)^{1,2}, Maria T. S. Trevisan (PQ)^{1,2}, Maria G. V. Silva (PQ)^{1,2,3}

cristianefelixdepaiva@hotmail.com

¹Departamento de Química Orgânica e Inorgânica; ²Laboratório de Produtos Naturais e Química Medicinal -

³Departamento de Química Analítica e Físico-química- Universidade Federal do Ceará -UFC

Palavras Chave: Flavonoides, Fenólicos, Plantas do Nordeste, AChE

Highlights

Evaluation of acetylcholinesterase and antioxidant activity in *Libidibia ferrea* L.P. Queiroz and *Poincianella pyramidalis* Tul. of Tauá-CE.

Determination of the antioxidant activity, qualitative analysis of acetylcholinesterase and determination of the phenolic and flavonoid contents of ethanolic extract of *Libidibia ferrea* and *Poincianella pyramidalis*

Resumo

A caracterização do perfil químico de espécies vegetais é uma importante ferramenta na avaliação de suas propriedades bio-farmacológicas. As espécies *Libidibia ferrea* e *Poincianella pyramidalis*, conhecidas como pau-ferro e catingueira, são relatadas na literatura como ricas em metabólitos como flavonoides, saponinas, taninos e compostos fenólicos, aos quais são atribuídas suas propriedades medicinais. O objetivo desse trabalho foi determinar o teor de fenóis e flavonoides, bem como investigar a capacidade antiacetilcolinesterásica e antioxidante de extratos etanólicos de *Libidibia ferrea* e *Poincianella pyramidalis*, atividades estas, importantes na busca de novas fontes de compostos contra a doença de Alzheimer. A atividade anticolinesterásica foi avaliada de acordo com o método espectrofotométrico de Ellman, frente à enzima acetilcolinesterase (AChE), utilizando-se ezerina como controle positivo. Os extratos mostraram-se ativos, apresentando uma zona de inibição semelhante ou superior ao controle. Os resultados obtidos demonstraram ainda, que as plantas em estudo possuem uma expressiva quantidade de fenóis e flavonoides (Tabela 1) e que a atividade antioxidante através do método de DPPH, empregando-se rutina como controle positivo, foi mais expressiva para cascas e raízes de *P. pyramidalis*. Associando-se as duas atividades avaliadas, o extrato das cascas de *P. pyramidalis* apresentou resultados mais promissores na busca de compostos com ação potencial contra a doença de Alzheimer.

Os autores agradecem ao CNPq e CAPES

Tabela 1: Avaliação da atividade antioxidante, acetilcolinesterásica e quantificação de fenóis e flavonoides de extratos etanólicos de *Libidibia ferrea* e *Poincianella pyramidalis*

| Amostra | Atividade Acetilcolinesterásica Zona de Inibição | Fenóis (mg EAG/g) | Flavonoides (mgEQuer/g) | Atividade antioxidante (CE ₅₀ µg/mL) |
|---------|---|----------------------|----------------------------|--|
| CPp | 10 mm | 52,958±0,005 | 39,444±0,003 | 61,458±0,177 |
| RPp | 15 mm | 37,125±0,003 | 180,185±0,002 | 188,085±0,055 |
| CLf | 9 mm | 90,875±0,005 | 30,926±0,003 | 520,944±0,204 |
| RLf | 20 mm | 81,708±0,003 | 54,259±0,032 | 502,548±0,237 |
| Ezerina | 10 mm | - | - | - |
| Rutina | - | - | - | 81,200±0,004 |

CPp e RPp : cascas e raízes de *Poincianella pyramidalis*; CLf e RLf: cascas e raízes de *Libidibia ferrea*;

Fenóis (mg EAG/g)- Teor de fenóis expressos em mg de ácido gálico/g de material seco; Flavonoides (mgEQuer/g)- teor de flavonoides expressos em mg de quercetina/g de material seco

1. Medeiros, J. A. D., et al. Revista de Ciências Agrárias. 41, 4, 2018.
2. Kobayashi, Y. T. S., et al. Brazilian Journal of Veterinary Research and Animal Science. 5, 34, 2015.
3. Trevisan, M.T.S. Macedo, F.V.V. Quím Nova, 26, 301; 2003.

Área: QPNNº de Inscrição: 00665

Metabolism of sesquiterpene lactones and flavonoids in *Chlosyne lacinia* larvae feeding on *Tithonia diversifolia* leaves

Marília E. Gallon (PG)¹; Eduardo A. Silva-Junior (PQ)¹; Norberto P. Lopes (PQ)¹; Leonardo Gobbo-Neto (PQ)¹

mariliagallon@usp.br

¹ Núcleo de Pesquisa em Produtos Naturais e Sintéticos, School of Pharmaceutical Sciences of Ribeirão Preto, University of São Paulo (USP), Av. do Café s/n°, 14040-903, Ribeirão Preto, SP, Brazil.

Palavras Chave: *Heliantheae*, *Asteraceae*, *Specialist insect*, *Chemical ecology*, *LC-MS/MS*, *Molecular networking*.

Highlights

Molecular network unveiled the metabolism of *Chlosyne lacinia* larvae on *Tithonia diversifolia* metabolites. Glycosylation was the main metabolism mechanism for the consumed flavonoids.

Resumo/Abstract

Chlosyne lacinia, popularly known as bordered path, is an oligophagous insect feeding mostly on plants belonging to Heliantheae tribe. In Brazil, *Tithonia diversifolia* leaves herbivory by *C. lacinia* occurs mainly during rainy season. Herein, we explored the roles of insect metabolism on *T. diversifolia* metabolites at laboratory conditions. *T. diversifolia* leaves and *C. lacinia* feces and larvae we analyzed by means of LC-MS/MS and molecular networking. Seven furanoheliangolide-type sesquiterpene lactones (STLs) typical of Heliantheae species and six flavonoids, including four flavones and two flavonoids O-glycosides, were putatively annotated. Most of the STLs detected in *T. diversifolia* were ingested by *C. lacinia* larvae and excreted in their intact form. Besides, dehydroxylation may have been a potential mechanism for excretion of other STLs, since a putative tagitinin derivative STL lacking one hydroxyl group was detected majorly in *C. lacinia* feces. Flavonoid aglycones were found mainly in *T. diversifolia* leaves, while their glycosides were detected mostly in *C. lacinia* feces. Thus, *C. lacinia* caterpillars excreted a minor part of the consumed flavones in their intact form and a major part was excreted as flavone O-glycosides which indicated that the main mechanism to excrete the consumed flavonoids was through their glycosylation. Our results highlighted the main mechanisms of *C. lacinia* metabolism of sesquiterpene lactones and flavonoids and provided insights into the ecological roles for interactions among metabolites.

Agradecimentos/Acknowledgments

This study was supported by São Paulo Research Foundation (FAPESP) - grant #2017/17023-4; National Council for Scientific and Technological Development (CNPq) and Coordination for the Improvement of Higher Education Personnel (CAPES) - Finance Code 001.

Biodiesel Production via Transesterification of Soybean Oil Catalyzed by Metformin Functionalized Magnetic Nanoparticles

Roberta R. Campedelli (PG)¹, Mateus H. Keller (IC)¹, Bruno S. Souza (PQ)¹

betaruschel@gmail.com; bruno.souza@ufsc.br

¹Departament of Chemistry, Federal University of Santa Catarina – UFSC, Florianópolis - SC

Keywords: magnetic nanoparticles, metformin, transesterification, biodiesel.

Highlights

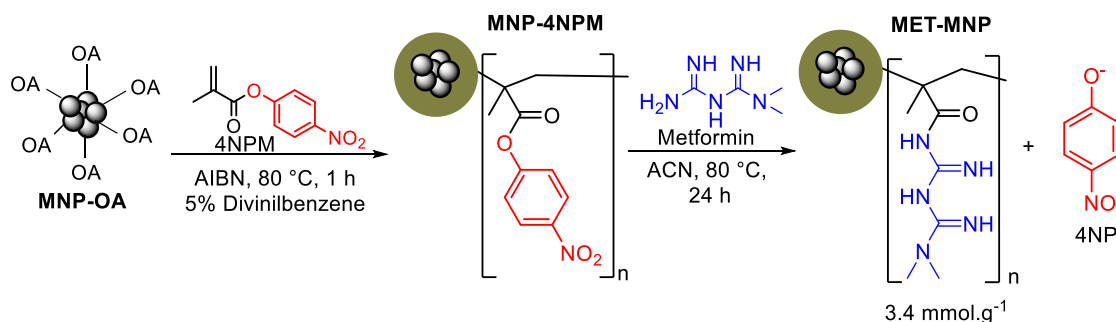
Metformin anchored in magnetic nanoparticles are prepared.
Particle modification can be easily tracked by UV-Vis spectrophotometry.
Methylic biodiesel production, with yields up to 90%, is attained in 1 hour.

Abstract

Biodiesel is an ecofriendly fuel due to its biodegradability, low-sulfur content and renewability.¹ A popular production route is through the transesterification reaction of vegetable oils and methanol in the presence of basic catalyst, such of NaOH or KOH. However, saponification is a common problem involved in these reactions, leading to tedious product separation from undesired byproducts. Besides, free alkali ions are unwanted contaminants that must be removed prior to biodiesel commercialization.

To circumvent these problems, here we employ metformin functionalized magnetic nanoparticles (MET-MNP) to produce soybean biodiesel. Metformin is a strong base (conjugated acid $pK_a = 12.4$), and once immobilized in the magnetic support can be recovered and reused.

MET-MNP preparation is illustrated in Scheme 1. Initially, 9.5 nm magnetic nanoparticles stabilized with potassium oleate (MNP-OA)³ were copolymerized with 4NPM monomer. Then, the 4NP leaving group is displaced by metformin. The degree of functionalization is monitored by the release of 4NP using UV-Vis.



Scheme 1. Preparation of MNP-MET.

The transesterification reaction was performed with soybean oil/methanol (1:30 mol:mol) varying the amount of MET-MNP catalyst (1, 3 and 6 wt% in relation to soybean oil), at reflux. Yields (¹H NMR) up to 90% were obtained in 1 hour. Catalyst reuse is being investigated.

¹ B. Jiang, Y. Wang, L. Zhang, Y. Sun, H. Yang, B. Wang and N. Yang, *Energy & Fuels*, **2017**, 31, 5203–5214.

² D. Wang and D. Astruc, *Chemical Reviews*, **2014**, 114, 6949–6985.

³ T. J. Matshaya, A. E. Lanterna, A. M. Granados, R. W. M. Krause, B. Maggio and R. V. Vico, *Langmuir*, **2014**, 30, 5888–5896.

Acknowledgments

CNPq process No 455181/2014-4, INCT-Catálise and PPGQMC-UFSC for financial support.

Área: INO

(Inserir a sigla da seção científica para qual o resumo será submetido. Ex: ORG, BEA, CAT)

Nº de Inscrição: 00667

(Inserir o número de inscrição do autor que fez a submissão)

New Tb³⁺:Eu³⁺ *tetrakis* β-diketonate complexes presenting temperature-tunable emission as ratiometric thermometers.

Lucca Blois Guimarães (IC),^{1*} Luís D. Carlos (PQ),² Alexandre M. P. Botas (PG),² Maria C.F.C. Felinto (PQ),³ Oscar L. Malta (PQ),⁴ Hermi Felinto Brito (PQ).¹

lucablois@usp.br

¹Departament of Fundamental Chemistry, IQ-USP; ²Departament of Physics, University of Aveiro; ³IPEN; ⁴Departament of Fundamental Chemistry, UFPE.

Keywords: Lanthanides, β-Diketones, Terbium-Europium, Luminescence, Optical Probes, Photoluminescence.

Highlights

New terbium-europium complexes were synthesized with imidazolium-based counterions. The complexes showed temperature-tunable emission and a good thermal sensitivity for photonic thermometers.

Abstract

In this work, novel terbium-europium *tetrakis* (benzoyltrifluoroacetone - btfa) complexes were synthesized utilizing 1-butyl-3-methylimidazolium (C₄mim) as counterion, showing stability and solubility in organic solvents. The Tb³⁺ complexes doped with the Eu³⁺ ion at different concentrations (0.01; 0.05 and 0.1 mol%) were characterized by elemental analysis, thermogravimetric analysis, infrared absorption spectroscopy and photoluminescent spectroscopy. Elemental analysis and thermogravimetric results indicate the non-hydrated stoichiometry [C₄mim][Tb_{1-x}Eu_x(btfa)₄] with x= 0.01; 0.05 and 0.1. Accordingly, infrared spectroscopy confirms the coordination of the metal ions with the btfa ligand via chelate mode. These doped complexes exhibit bright red emission only at room temperature originated from ⁵D₀ → ⁷F₀₋₄ transitions of the Eu³⁺ ion. Interestingly, at room temperature Tb³⁺ absorption is observed in the Eu³⁺ excitation spectra together with the ligand broad absorption band, which suggests that non-radiative energy transfer from Tb³⁺ to Eu³⁺ may also be operative. Besides, the doped complexes also have temperature-dependent emission features, showing the Tb³⁺ emission predominantly at lower temperatures (~130 K), with the complex displaying green color. Due to this temperature-tunable emission, several spectra were recorded for the [C₄mim][Tb_{0.95}Eu_{0.05}(btfa)₄] complex in the following temperature interval 100–300 K and the intensity ratios between Tb³⁺ (⁵D₄ → ⁷F₅) and Eu³⁺ (⁵D₀ → ⁷F₂) emission bands were studied. In addition, the relative thermal sensitivity was calculated and showed values above 1% from 100 to 300 K, which is a good indicative for photonic thermometers. These spectroscopic data can be used as ratiometric parameters for temperature sensing in the nanoscale, leading to a self-calibrating optical thermometer.

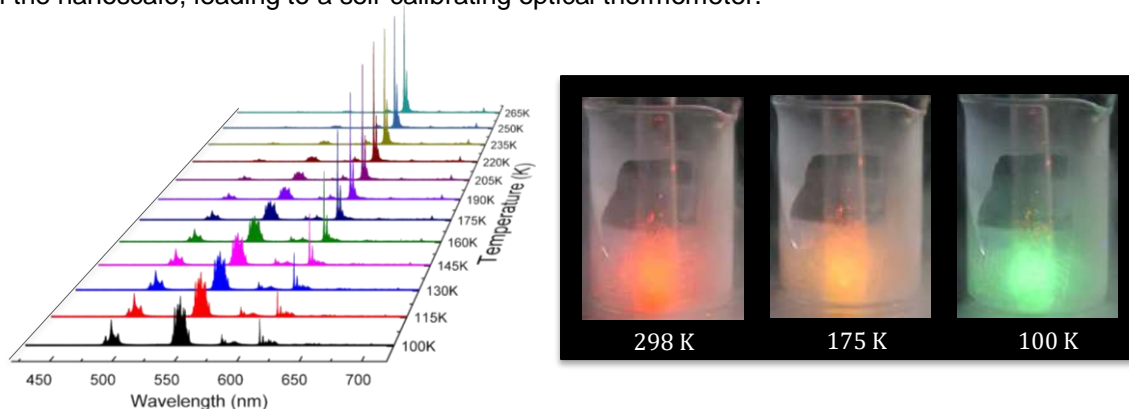


Figure 1: Emission spectra of the [C₄mim][Tb_{0.95}Eu_{0.05}(btfa)₄] complex recorded at different temperatures (left) and the photographs of the complexes taken with a digital camera under UV irradiation (right).

Acknowledgments

The authors are grateful for the financial support from the CNPq and FAPESP.

Área: ANA

(Inserir a sigla da seção científica para qual o resumo será submetido. Ex: ORG, BEA, CAT)

Nº de Inscrição: 00668

(Inserir o número de inscrição do autor que fez a submissão)

Catalytic and non-catalytic pyrolysis of the bean pod *Caupi* (*Vigna unguiculata*) for production bio-oil rich in phenols

Roberta M. Santos (PG)^{1*}, Diego F. Bispo (PG)¹, Honnara S. Granja (IC)¹, Thiago Ferreira L. Loeser¹ (IC), Lisiane dos S. Freitas (PQ)¹

thiagoloeser12@gmail.com; menezesroberta84@gmail.com

^aChemistry Department, Federal University of Sergipe, Campus Prof. José Aloísio de Campos, Av. Marechal Rondon, s/n, Jardim Rosa Elze – CEP: 49100-000 – São Cristóvão/SE, Brazil

Keywords: *bean pod, Catalytic pyrolysis, Bio-oil, Phenols.*

Highlights

The pyrolysis were performed non-catalyst and with three different catalysts (K_3PO_4 , KH_2PO_4 e K_2CO_3). The effect of the catalysts on the yield of the pyrolysis products and the composition of the bio-oil was studied. The GC/MS proved to be adequate for the identification of phenolic compounds in bio-oils. The agroindustrial waste presented a Strong potential to obtain bio-oil rich in phenols.

Abstract

O uso abusivo de combustíveis fósseis provoca a degradação do meio ambiente e devido a sua escassez, pesquisas têm sido desenvolvidas para substituir essa fonte energética por matrizes renováveis, tal como a Biomassa.¹ O Brasil é um país que tem grande disponibilidade de recursos de biomassa e a utiliza para a produção de combustíveis de segunda geração. Dentre estes resíduos, destaca-se a vagem do feijão, um tipo de matéria-prima gerada em grandes quantidades, uma vez que o país é considerado um dos maiores produtores de feijão. O aproveitamento energético e químico desses tipos de materiais depende do tipo de processo de conversão, bem como da eficiência.¹ Nesse contexto, a pirólise catalítica é um viés promissor e atraente para a produção de compostos aromáticos com altas moléculas desoxigenadas, melhorando a qualidade e estabilidade do bio-óleo.² O presente trabalho teve como objetivo avaliar a influência dos sais inorgânicos (K_3PO_4 , KH_2PO_4 e K_2CO_3) nos rendimentos dos produtos, bem como na composição do bio-óleo da vagem de feijão obtido pela pirólise catalítica. Para o desenvolvimento do trabalho, os resíduos agroindustriais foram adquiridos no mercado local. Inicialmente, as amostras foram lavadas com água corrente e secas em estufa por 24h a 60 °C. As pirólises sem catalisador e com catalisador foram realizadas na temperatura de 600 °C, fluxo de N_2 5 mL min⁻¹, taxa de aquecimento 30 °C min⁻¹, tempo de pirólise 1h, massa de amostra (8 g) e catalisador (2 g). Os bio-óleos foram caracterizados por cromatografia gasosa/espectrometria de massas (GC/MS). Comparando-se a média dos resultados da pirólise não catalítica e as catalíticas, observou-se que houve um aumento nos rendimentos do bio-óleo de 25,61% para 27,92% e diminuição no rendimento de biogás de 47,64% para 34,19%, respectivamente, significando que houve uma maior quebra das moléculas formando compostos de menor massa molecular. O rendimento médio de biochar aumentou de 26,75% (non-catalyst pyrolysis) para 37,89% (catalyst pyrolysis), pois o cálculo foi realizado considerando a massa do biochar e do sal, uma vez que não foi possível separar o catalisador. A identificação dos compostos nos bio-óleos obtidos com a adição dos sais como catalisador mostrou um aumento no teor de fenólicos, sendo que o K_2CO_3 apresentou o melhor efeito na produção seletiva dos fenólicos. Além do aumento na concentração, foi possível detectar a presença de compostos fenólicos diferentes dos encontrados no bio-óleo proveniente da pirólise sem catalisador, o que indica mudança nos mecanismos de formação de compostos durante o craqueamento. Entretanto, quando comparados à pirólise sem catalisador, tanto o KH_2PO_4 quanto o K_3PO_4 apresentaram melhora considerável no percentual de fenólicos. A vagem de feijão utilizada mostrou-se uma alternativa promissora para obtenção de produtos químicos com valor agregado, como fenóis e seus derivados.

¹ Zhang, S., Zhu, S., Zhang, H., Chen, T., Xiong, Y. *Journal of Analytical and Applied Pyrolysis* 133, 2018,91-96.

Acknowledgments

[CAPES, CNPQ, FAPITEC, UFS].

Evaluation of the cytotoxic potential of sesquiterpene lactones isolated from *Calea pinnatifida* against thyroid tumor cell lines

Lhaís Araújo Caldas (PG),¹ Marcelo José P. Ferreira (PQ),² João Henrique G. Lago (PQ)³, Mariana Teixeira (PG)¹, Ileana Rubio (PQ)¹, Patrícia Sartorelli (PQ)¹.

lhaais_araujo@hotmail.com

¹Instituto de Ciências Ambientais, Químicas e Farmacêuticas, UNIFESP- Campus Diadema, SP - Brasil; ²Instituto de Biociências, Universidade de São Paulo, SP - Brasil; ³Universidade Federal do ABC, Santo André – Brasil.

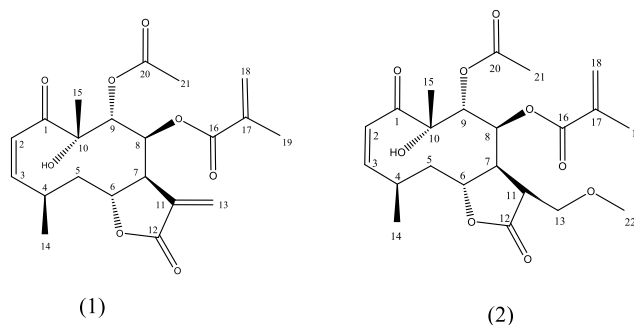
Keywords: Asteraceae, *Calea pinnatifida*, Sesquiterpene lactones, Cytotoxic activity, Pappilliferous thyroid tumor cell lines, Anaplastic thyroid tumor cell lines.

Highlights

Sesquiterpene lactones are a well-known class of compounds from Asteraceae species, with several biological activities reported in the literature¹. Focusing on the genus *Calea*, mainly germacranolides are responsible for cytotoxic activity. In this research, two germacranolides were isolated from *Calea pinnatifida*: Calein C (1) and Calein C derivative (2)². To the best of our knowledge, none of these compounds were reported for this species up until the present. Therefore, this research focus on structural elucidation of the compounds and also the evaluation of its cytotoxic potential against anaplastic and papilliferous thyroid tumor cell lines: KTC2, HTH83, PTC1 and BCPAP.

Abstract

C. pinnatifida, popularly known as "aruca" and "cipó-cruz", has been encountered specially in Brazilian "cerrado" biome, and has been used in folk medicine as tea or infusions. According to the literature data, its phytochemical is related for the presence of germacranolides, mainly sesquiterpene lactones³. In this research, fractionation of the metanolic phase led to the isolation of two sesquiterpene lactones, been one of them a derivative compound from calein C, the major compound of the aerial parts of the plant. In order to obtain the structural elucidation of calein C and calein C derivative, spectroscopic data from nuclear magnetic resonance was carried out, as well as mass spectroscopy. According to the spectroscopic data, it was possible to observe that both of the compounds shared the same chemical skeleton (Figure 1), originated from the same biosynthetic route. NMR data also showed some differences in chemical shift due to the presence of the methoxide in calein C derivative.



In order to evaluate the cytotoxic potential of the compounds, especially the structure-activity correlation among calein C and its derivative, a cytotoxic assay using thyroid tumor cell lines was carried out. According to the results, it was possible to observe that both of the compounds are cytotoxic against KTC2, HTH83, PTC1 and BCPAP cell lines especially at higher concentrations, such as 15 $\mu\text{g mL}^{-1}$ and 30 $\mu\text{g mL}^{-1}$. However, calein C showed to be slightly more cytotoxic than its derivative against all the cell lines tested, except for KTC2. According to the literature, sesquiterpene lactones such as calein C may act as Michael acceptors, capable of being more cytotoxic when compared to other compounds.

[1] SEAMAN, F. C. Sesquiterpene lactones as taxonomic characters in the Asteraceae. v. 48, n. 2, p. 121–592, 1982.

[2] CALDAS, L. A. et al. Calein C, a sesquiterpene lactone isolated from *Calea pinnatifida* (Asteraceae) inhibits mitotic progression and induces apoptosis in MCF-7 cells. *Frontiers in Pharmacology*, 2018.

[3] AMARAL, P.A., et al. The genus *Calea* L.: A review of isolated compounds and biological activities. *Journal of Medicinal Plants Research*, v. 11, n. 33, p. 518–537, 2017.

Área: PN Nº de Inscrição: 00671

Bioreduction of chalcone (2E)-1-(4'-hydroxy-phenyl)-3-(2-methoxy-phenyl)-prop-2-en-1-one by fungus *Scedosporium apiospermum*

André de Oliveira Feitosa (PG),¹ Maricelia Lopes dos Anjos (PG),¹ Heriberto Rodrigues Bitencourt (PQ),¹ Antônio Pedro da S. Souza Filho (PQ),² Patrícia Santana B. Marinho (PG),¹ Andrey Moacir do R. Marinho (PQ).^{1*}

andrey@ufpa.br

¹Faculdade de Química, UFPA; ²Embrapa Amazônia Oriental

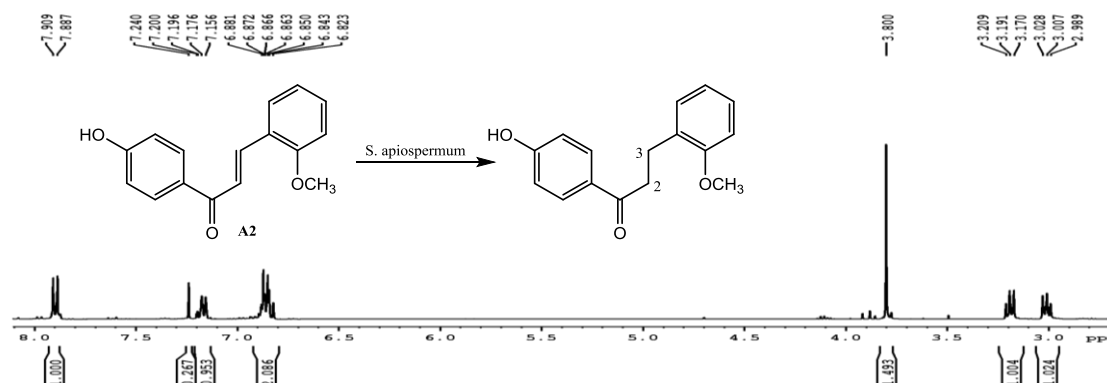
Palavras Chave: bioredução, chalcone, *Scedosporium apiospermum*, fungi.

Highlights

Bioreduction of chalcone (2E) -1- (4'-hydroxy-phenyl) -3- (2-methoxy-phenyl) -prop-2-en-1-one by fungus *Scedosporium apiospermum*. Biotransformation are important reactions carried out by microorganisms. Biotransformations can be chemo, regio and stereoselective.

Abstract

The microbial biotransformations are of great importance, they can be chemo, regio and stereoselective.¹ As a example the biotransformation, it is reported the α -hydroxylation at the 11-position of progesterone by fungus *Rhizopus arrhizus*. Microbial biotransformations are also used by industries to obtain chiral products with a high degree of enantiomeric excess (ee).² Thus, the present work aimed to study the biotransformation of chalcone (2E) -1- (4'-hydroxy-phenyl) -3- (2-methoxy-phenyl) -prop-2-en-1-one (A2) by *Scedosporium apiospermum*. Initially, the fungus *S. apiospermum* was recultured in Petri dish containing BDA culture medium for 7 days. After this period small pieces of fungus, 2mm³, were transferred to three Erlenmeyer flasks containing 200 mL of Czapeck culture medium, each. Then, the system was agitated at 120 rpm at temperature of 32 °C for growth. After 3 days 40 mg of chalcone was dissolved in 100 μ l of DMSO and added in two flasks, one flask was used as control, and shaker for more 7 days. The biotransformation product was analyzed by MS and NMR. Analysis of the mass spectrum ESI (+) showed a m/z 257 compatible with the addition of two mass units in the product obtained from the reaction when compared to the substrate, suggesting a hydrogenation of the α,β -unsaturated double bond. Analysis of the ¹H NMR spectrum (figure below) confirmed the bioreduction of chalcone (2E) -1- (4'-hydroxy-phenyl) -3- (2-methoxy-phenyl) -prop-2-en-1-one by *S. apiospermum* fungus through the observation of two triplet signals at δ 3.19 and δ 3.01 attributed to the hydrogens H-2 and H-3.



Acknowledgments

CNPq, CAPES and FAPESPA

¹ BORGES, W. S. et al. Current Organic Chemistry, v. 13, p. 1137-1163, 2009. ²LAUMEN, K. et al. Journal of Molecular Catalysis B: Enzymatic, v. 19-20, p. 55-66, 2002.

Synthesis of carbon nanomaterials *via* chemical vapor deposition using catalysts based on iron mining residues and molybdenum

Marina Duarte Figueiredo (PG), Maria Helena Araujo (PQ), Ana Paula de Carvalho Teixeira (PQ).*

marinaduartefig@gmail.com; anapct@ufmg.br

Departamento de Química, UFMG

Keywords: Carbon nanomaterials, CVD process, Mining residues.

Highlights

Preparation of catalysts from two types of iron mining residues impregnated with molybdenum.
Synthesis of carbon nanomaterials using ethylene as carbon source for a catalyzed CVD process.

Abstract

The chemical vapor deposition (CVD) stands out as a simple, scalable and low cost method for synthesis of carbon nanotubes,¹ materials with applications in several fields. In this work, carbon nanomaterials were synthesized from catalysts based on iron mining residues, impregnated with molybdenum, using ethylene as carbon source for CVD process at 700°C. Two types of catalysts were prepared from two different residues generated in the iron concentration process. One is the mud (50 % iron), and the other is the sand waste (11 % iron). The carbon nanomaterials obtained (CNT01S and CNT02M, from catalysts based on sand waste and mud, respectively) were characterized by elemental analysis (CHN), thermogravimetric analysis (TGA), X-ray diffraction (XRD), Raman spectroscopy, transmission electron microscopy (TEM) and scanning electron microscopy (SEM), with no prior purification of products. The carbon content estimated by elemental analysis and TGA was 4% for CNT01S and 46% for CNT02M, which shows the mud based catalyst leads to a higher yield of reaction. In both cases, the TEM images show the formation of carbon nanotubes (**Fig. 1a** and **b**). The Raman spectra (**Fig. 1c**) exhibit the D and G bands (around 1300 and 1600 cm^{-1} , respectively), typical of carbonaceous materials.² The D band, associated with disorganized carbon, is more intense than the G band, related to organized carbon, for the two obtained products. The materials will be evaluated for environmental applications, such as adsorption of contaminants.

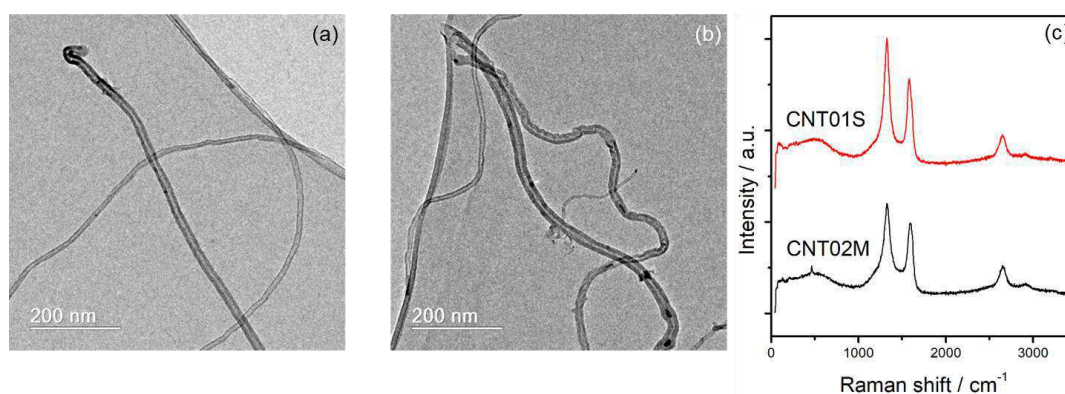


Fig.1: (a) TEM of material CNT01S, (b) TEM of material CNT02M, (c) Raman spectra of materials CNT01S and CNT02M.

References:

- SHAH, K. A.; TALI, B. A. Synthesis of carbon nanotubes by catalytic chemical vapour deposition: A review on carbon sources, catalysts and substrates. **Materials Science in Semiconductor Processing**, v. 41, p. 67-82, Jan 2016. ISSN 1369-8001. Disponível em: <<Go to ISI>://WOS:000365189500011 >.
- BEYSSAC, O. et al. On the characterization of disordered and heterogeneous carbonaceous materials by Raman spectroscopy. **Spectrochimica Acta Part a-Molecular and Biomolecular Spectroscopy**, v. 59, n. 10, p. 2267-2276, Aug 2003. ISSN 1386-1425. Disponível em: <<Go to ISI>://WOS:000185038100010 >.

Acknowledgments

CNPq, CAPES, FAPEMIG, INCT MIDAS, UFMG Microscopy Center.

42ª Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química: Eixos Mobilizadores em Química

Chemical constituents and biological evaluation of the hexanic extract (HE) of the endophytic fungus *Exserohilum rostratum* isolated of *Phanera splendens*.

Jeferson R. S. Pina (PG)^{*1}, Aline C. Cobel (IC)², Luciano A. Watanabe (PG)¹, Simone Y. S. Silva (PQ)³, Sebastião da C. Silva (PQ)³, Andrey M. R. Marinho (PQ)¹, Patrícia S. B. Marinho (PQ)¹

konanquim@gmail.com; pat@ufpa.br

¹Programa de Pós-Graduação em Química - UFPA; ²Faculdade de Química - UFPA; ³Programa de Pós-Graduação em Química - UNIFESSPA.

Palavras Chave: *Exserohilum rostratum*, Endophytic fungus, Hexanic extract, Polyketides.

Highlights

This work reports the isolation of polyketides from the hexanic extract and antimicrobial activity of the endophytic fungus *Exserohilum rostratum* isolated from an Amazonian plant matrix (*Phanera splendens*).

Abstract

The search for compounds with excellent biological activity is in agreement with the chemistry of microorganisms from which we obtain innumerable compounds that can be used in industrial applications¹. The hexanic extract (9.0 g) of the endophytic fungus *Exserohilum rostratum* was obtained after 28 days of culture in solid medium (rice). The hexane extract (HE) was fractionated and the compounds isolated by HPLC-DAD (Figure 1) and identified by MS and NMR. The red color oil (Fr 02) from the extract was analyzed by GC-MS (Figure 1). Hexanic extract fractionation resulted in the isolation of steroids ergosterol (S₁) and ergosterol peroxide (S₂), in addition to polyketides monocerin (S₃) and annularin I (S₄)² (Figure 2). The composition of Fr 02 of HE consists of three fatty acids, hexadecanoic acid (S₅) (t_R: 45 min); 9,12-octadecadienoic acid (S₆) (t_R: 50 min) and 9-octadecenoic acid (S₇) (t_R: 50,5 min)³, in addition to compounds S₃ and S₄. Also, two pigments were isolated ravenelin (S₈) and skyrin (S₉). In the antimicrobial susceptibility test against *Escherichia coli* (ATCC 25922), HE showed bacteriostatic activity of 15.62 µg/mL, monocerin (S₃) was active against *Bacillus subtilis* (ATCC 6633), *Pseudomonas aeruginosa* (ATCC 27853) and *E. coli* with CBM 15.62 µg/mL, while annularin I (S₄) was active against *E. coli* and *B. subtilis* with CBM 15.62 µg/mL and 7.81 µg/mL, respectively. These results evidenced the production of annularin I (S₄) presenting good antimicrobial activity, as well as the first report of ravenelin (S₈) and skyrin (S₉) obtained from an endophytic fungus from the Amazon region. This work will be able to contribute with the chemical arsenal of substances isolated from endophytic fungi of Amazonian plant matrices.

Acknowledgments

Pina, J. R. S. thanks the Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Ensino Superior (CAPES) for the scholarship.

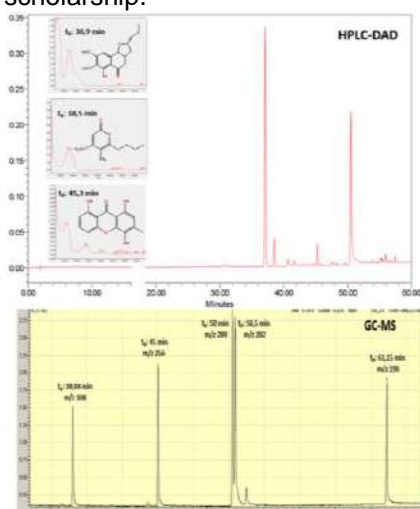


Figure 1: Hexanic extract chromatograms.

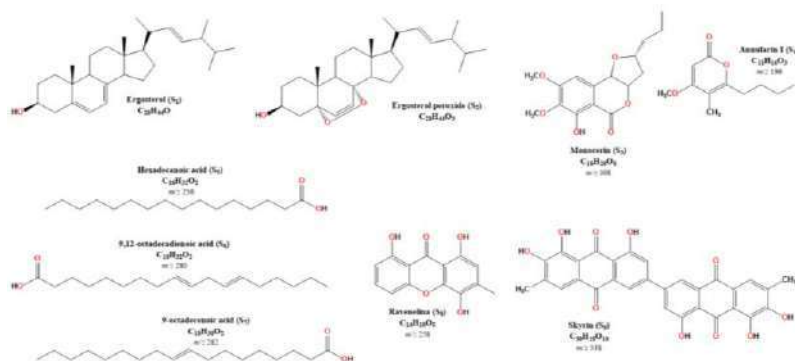


Figure 2: Chemical constituents obtained from HE of *E. rostratum*.

References:

- ¹Kim, J. W.; et al. *J. Antibiot.* **2018**.
²PINHEIRO, E. A. A et al. *J. Braz. Chem. Soc.*, **2016**.
³URANGA, C. C., et al. *Biochem. Biophys. Res. Commun.*, **2016**.

Reuse of sugarcane bagasse to obtain carboxymethylcellulose: Characterization and thermochemical degradation

Felicia M. Ito (FM, PQ),^{1,2*} Evandro da S. Oliveira (IC-EM),¹ Adriana G. P. da Silva (IC),² Talina M. N. dos Santos (PG),³ Ana C. L. da Silva (IC-EM),¹ Adilson Beatriz (PQ),³ Lincoln C. S. de Oliveira (PQ),³ Vinicius Cristani (PG),³ Alisson Richard Novais (PG).³

felicia.ito@ifms.edu.br

¹Técnico Integrado em alimentos-Campus Coxim, IFMS; ²Licenciatura em Química- Campus Coxim, IFMS, ³Instituto de Química, INQUI-UFMS

Palavras Chave: biopolymer, Mato Grosso do Sul, local factory.

Highlights

Brazil is one of the countries in the world that is blessed with a wide variety of natural resources. Brazilian natural resources are responsible for the growth of financial status of the country. Modernization and technological advances, there is a fair amount of withdrawal of these resources for the production of new products but the replacement of the same to the environment is not done satisfactorily. If wait for natural recovery, it will take many years for full regeneration and in a short time natural resources will go extinct from the face of the earth. Sugarcane bagasse is a fibrous by-product resulting from the milling of sugarcane. The challenge of this work is the conversion of plant wastes as the by-products of sugarcane bagasse through the transformation of raw material by traditionally known and easy-to-prepare reactions to obtain carboxymethylcellulose into valuable products, can be helpful in reduction of the environmental problems in our region and a possible successor with added value in the technological, biotechnological and pharmacological application.

Resumo/Abstract

The aims of the present work were to extract cellulose of sugarcane bagasse was provided by a local factory. This bagasse is agro wastes collect in this region (Coxim, Mato Grosso do Sul). Purified cellulose was carried out as describe by Cerqueira et al 2010. Further treatment of cellulose, carboximethylation was performed as described by Britto and Assis, 2005. Polymeric material based obtained by sugarcane bagasse was showed in figure 2. The sugarcane bagasse and biopolymer sample were subjected to thermal (Figure 3) and infrared (Figure 4) analysis.



Figure 1. Biopolymer based from sugarcane bagasse.

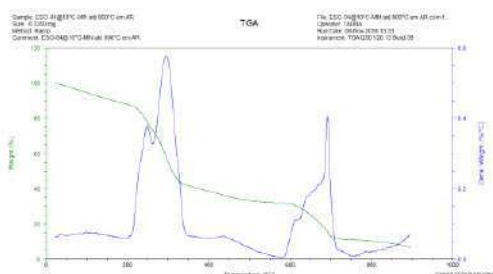


Figure 3. TG/DTG curves of carboxymethylcellulose.

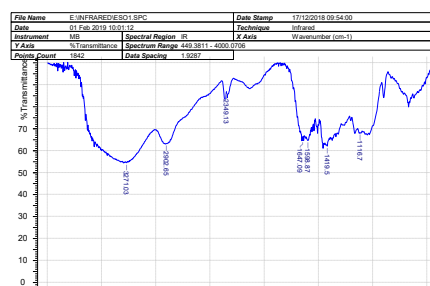


Figure 2. IR-FT spectra of sugarcane bagasse

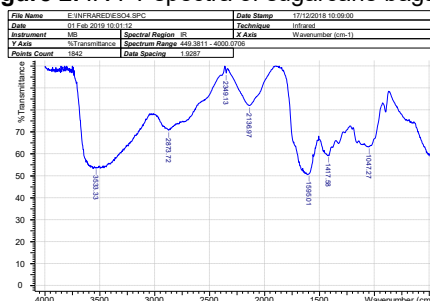


Figure 4. IR-FT spectra of carboxymethylcellulose (CMC).

Agradecimentos/Acknowledgments

PROPI-IFMS, UFMS

Cerqueira, D. A. et al. *Polímeros*, v. 20, n. 2, p. 85-91, 2010.

Britto, D.; Assis, B.G.O. *Int. J. Biol. Macromol.*, v. 41, 198, 2007.

Adsorção de Cd²⁺ em hidrogéis constituídos de quitosana: estudos dos modelos de isothermas não lineares

Tainara Vieira (PG),¹ Cassiele T. Cesco (IC),² Samantha E. S. Artifon (IC),² Alexandre Tadeu Paulino (PQ).^{1,2*}

tainara_vieira@hotmail.com; alexandre paulino@udesc.br

¹Departamento de Química, Universidade do Estado de Santa Catarina, Rua Paulo Malschitzki, 200 - CEP: 89.219-710 - Joinville/SC; ²Departamento de Engenharia de Alimentos e Engenharia Química, Universidade do Estado de Santa Catarina, Br 282, Km 574 - CEP: 89.870-000 - Pinhalzinho - SC.

Palavras Chave: hidrogéis, quitosana, cádmio, isothermas

Highlights

Adsorption of Cd²⁺ in hydrogels constituted of chitosan: studies of non-linear isotherms. Foram utilizados modelos de isothermas não lineares para avaliar o mecanismo de adsorção em uma solução de Cd²⁺ com pH e temperatura fixos em um hidrogel de quitosana e um hidrogel compósito de quitosana constituído de 50.0 mg de magnetita. Os modelos utilizados foram o de Langmuir, Freundlich, Redlich-Peterson e Sips. Os modelos de Redlich-Peterson e Sips obtiveram os melhores resultados, com R² de 0,9954 e 0,9953 para o hidrogel de quitosana e 9,864 e 0,9867 para o hidrogel compósito. Os resultados mostram que a adsorção para este contaminante ocorre em mono e multicamada, concomitantemente.

Resumo/Abstract

O cádmio é classificado como um metal pesado e é amplamente utilizado em indústrias de mineração. Essa classe de metais é de difícil remoção pelos métodos utilizados comumente nas indústrias. Foram estudados modelos de isothermas de adsorção não lineares para concentrações entre 10 e 100 mg L⁻¹ de Cd²⁺ em pH, tempo e temperatura fixos. A adsorção foi feita utilizando um hidrogel de quitosana (HCQ) e um hidrogel compósito de quitosana/magnetita contendo 50.0 mg de magnetita (HCC50). Na Tabela 1 são mostrados os resultados obtidos nos 4 modelos de isothermas não lineares.

Tabela 1 – Parâmetros dos modelos de isothermas não lineares

| Isotherma de Langmuir | | | | |
|-------------------------------|----------------|----------------|------------------|------------------|
| Hidrogel | R ² | K _L | q _{max} | R _L |
| HCQ | 0,9948 | 2,880e-3 | 47,681 | 0,9997 |
| HCCQ ₅₀ | 0,9800 | 1,40e-3 | 84,81 | 0,9998 |
| Isotherma de Freundlich | | | | |
| Hidrogel | R ² | K _F | n | b _F |
| HCQ | 0,9966 | 1,785 | 1,117 | 0,8952 |
| HCCQ ₅₀ | 0,9800 | 1,436 | 1,064 | 0,9398 |
| Isotherma de Redlich-Peterson | | | | |
| Hidrogel | R ² | A | B | g |
| HCQ | 0,9954 | 1,507 | 2,632e-2 | 0,5858 |
| HCCQ ₅₀ | 0,9864 | 1,643 | 0,2002 | 0,2051 |
| Isotherma de Sips | | | | |
| Hidrogel | R ² | K _s | n _s | q _{max} |
| HCQ | 0,9953 | 2,150e-3 | 1,04 | 70,656 |
| HCCQ ₅₀ | 0,9867 | 1,946e-4 | 1,057 | 726,78 |

Os modelos de isothermas não lineares de Redlich-Peterson e Sips foram os que obtiveram os melhores resultados, pois o valor de R² foi o mais próximo de 1. Em ambos os modelos, há adsorção em mono e multicamada concomitantemente, apresentando características dos modelos de Langmuir e Freundlich. O modelo de Freundlich, apesar dos valores de R² serem superiores, o valor de n próximo a 1, indicando que há pouca interação entre adsorvato e adsorvente. Dentre os dois hidrogéis estudados, o constituído de quitosana apresentou os melhores resultados de adsorção em todos os modelos.

Aplicação da Fluorescência de Raios X portátil para análise e classificação de amostras de filtro solar

1* Anibal Gustavo Sousa Oliveira (IC),¹ Wilkins Oliveira de Barros (IC),² Igor José Gomes da Silva (PQ),
1 Benedito B. Farias Filho (PQ).

anibal.gustavo@hotmail.com; wilkins_wl@hotmail.com

¹Departamento de Química, UFPI; ²Departamento de Química, IFPI.

Palavras Chave: FRX, Filtro Solar, Titânio, PCA.

Highlights

Application of portable X-ray Fluorescence for analysis and classification of sunscreen samples. A new approach based on portable XRF for fast screening of the profile of sunscreen. The method requires no sample preparation, nor chemical reagent, and is performed in a timely manner.

Resumo/Abstract

Os filtros solares possuem a função de proteção contra os efeitos nocivos dos raios ultravioleta (UV) com base em filtros químicos ou físicos empregados em sua composição. Os filtros físicos são de uso recorrente e constituídos de óxidos de metais como o dióxido de titânio (TiO₂) e o óxido de zinco (ZnO) em diferentes concentrações que indicam o valor do Fator de Proteção Solar (FPS). Na literatura científica os estudos utilizando a espectrometria de Fluorescência de Raios X (FRX) na análise de filtros solares é direcionada apenas para a determinação quantitativa do TiO₂ e ainda é incipiente trabalhos sobre controle de qualidade empregando instrumentação portátil. Assim, o objetivo desse trabalho é classificar amostras de filtros solares com base na comparação entre os FPS de 30 a 99 disponíveis comercialmente e manipulados e a sua composição química elementar utilizando dados da FRX portátil aliado a tratamento quimiométrico. As amostras comerciais de filtros solares foram adquiridas considerando marcas e FPS diferentes e as medidas foram realizadas utilizando 50 kV, 200 µA e 2 W aplicando o método de calibração dos parâmetros fundamentais (PF). Para a otimização da melhor razão sinal/ruído foram avaliados os parâmetros como:

natureza da amostra, tempo de secagem, área amostral de análise e tempo de medida. O sinal analítico do Ti (4,515 keV) foi tomado como base para realizar a avaliação dos parâmetros estudados. A Figura 1 mostra os resultados obtidos na avaliação dos parâmetros mencionados. Pode-se observar que com a amostra seca (Figura 1A) o sinal analítico é substancialmente melhorado desde que esse procedimento seja realizado à temperatura ambiente durante 3 dias (Figura 1D). Tentativas de minimizar esse tempo de secagem foram realizadas empregando diversos procedimentos, no entanto sem sucesso. Além disso, a utilização de um ponto focal de 3 mm (Figura 1B) e tempo de medida de 160 segundos (Figura 1C) foram os ideais para obter sinal analítico favorável e com menos operações analíticas. Após otimizados os parâmetros para a realização

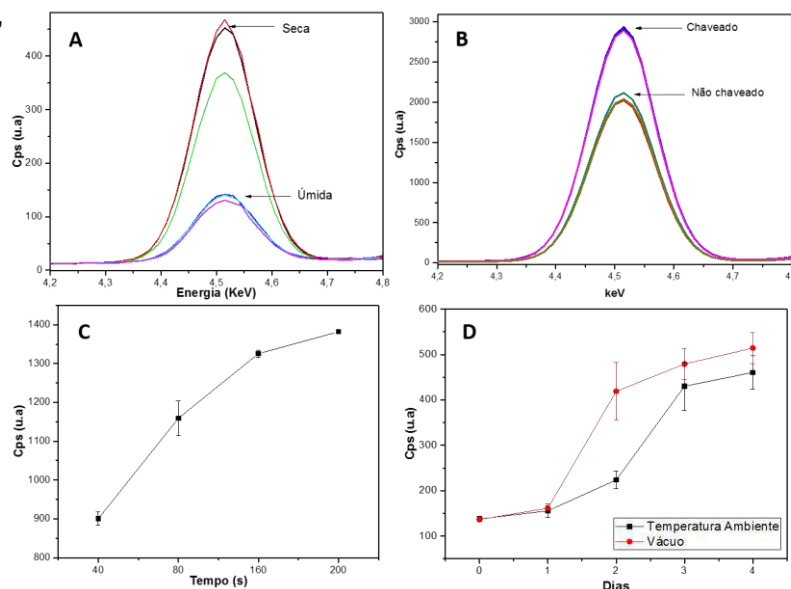


Figura 1 – Avaliação dos parâmetros otimizados: (A) natureza da amostra (B) área amostral de análise, (C) tempo de medida e (D) tempo de secagem

das análises, as próximas etapas do presente trabalho será a realização das medidas por FRX portátil das amostras de filtros solares com aplicação de tratamento quimiométrico adequado a fim de obter um padrão de classificação baseados nos FPS que servirá como controle de qualidade das amostras analisadas.

Synthesis of halohydrins via S_N2 solvent free reaction from glycerol dichlorohydrin using homogeneous media or solid-supported reagents

Priscila Faustino dos Santos (PG),¹ Sara Raposo Benfica da Silva (PG),¹ Fernanda Priscila Nascimento Rodrigues da Silva (PG),¹ Vera Lúcia Patrocínio Pereira (PQ).^{1*}

faustinatorj@hotmail.com; patrocinio.ufrj@gmail.com.

¹Laboratório de Síntese Estereosseletiva de Substâncias Bioativas, Instituto de Pesquisa de Produtos Naturais, UFRJ.

Palavras Chave: FINKELSTEIN REACTION, GLYCEROL, SOLVENTLESS REACTION, KI/Al₂O₃, BIODIESEL

Highlights

Use of Finkelstein reaction to the 1,3-dibromo- and 1,3-diiodohydrin synthesis, using reagent supported on alumina or homogeneous media in solvent free conditions. High conversion (99%) and high 1,3-selectivity (91 %) was obtained.

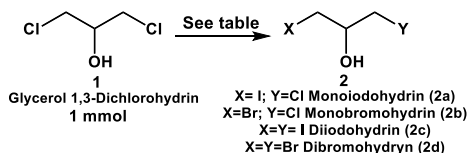
Resumo/Abstract

Glycerol 1,3-dichlorohydrin **1** has been used as solvent and reagent to produce epoxy resins.¹ The halohydrins **2a-d** are important intermediates for the synthesis of fine chemicals and new drugs for diabetes.² The Finkelstein reaction is widely used for the halohydrins synthesis, via nucleophilic substitution, employing sodium halides in acetone.³ The use of acetone is crucial to shift the equilibrium to the desired products, due to low solubility of the chlorinated salts formed. In our continuing interest in adding value to glycerol using environmentally friendly routes, we are aiming **2a-d** synthesis, via solvent-free Finkelstein reaction (Table).

Table: Synthesis of halohydrins **2a-d** from glycerol 1,3-dichlorohydrin.

| Entry | C ⁺ A ⁻ | Additive | Time ^c | Temp. (°C) | Conversion (%) | Selectivity (%) |
|-------|--|----------|-------------------|-----------------|-----------------|-----------------|
| 1 | NaI ^a | - | 3 | 80 | 43 ^e | 2a:2c (77:23) |
| 2 | NaI ^a | TBAI | 3 | 80 | 96 ^e | 2a:2c (28:72) |
| 3 | KI/Al ₂ O ₃ ^b | - | 3 | 80 | 99 | 2a:2c (9:91) |
| 4 | NaBr ^a | TBAB | 3 | 80 | 47 ^e | 2b:2d (78:22) |
| 5 | KBr/Al ₂ O ₃ ^b | - | 5 | rt ^d | 26 | 2b:2d (97:3) |
| 6 | NaBr/Al ₂ O ₃ ^b | - | 5 | rt ^d | 48 | 2b:2d (93:7) |

^a Concentration used 2.5 mmol / ^b Used 3.0 g / ^c In Days ^d The use of heating (80 °C) was not effective / ^e Homogeneous Media



Treating of **1** with NaI, in the absence of solvent produced only 43% conversion to the mixture **2a:2c**, with precipitation of NaCl (Entry 1). The regular conversion of **1** can be explained by low NaI dissociation in **1**, once this act as solvent and reagent in the process. Aiming a better conversion, TBAI was used as an effective additive (Entry 2). It was obtained an excellent conversion to **2a+2c** along with a good selectivity for **2c**. The employ of solid-supported reagents are widely desired in organic process because of environmental and economic advantages. Xie,⁴ has used KI/Al₂O₃, as an efficient basic catalyst for biodiesel production, where are present the active species K₃AlI₆ and K₂O. We imagine that the iodine present in the specie (K₃AlI₆) could to react with **1** (Entry 3). Really, treatment of **1** with KI/Al₂O₃ furnished a better conversion (99%) and excellent selectivity to **2c** (91%). Similarly, to bromination of **1** was also used TBAB, as additive and MBr/Al₂O₃ as bromide source (Entries 4-6). In this case, low conversion was obtained, probably due a lowest solubility of salts employed in **1**. In conclusion, an innovative synthesis to **2c** from of **1**, in excellent conversion and selectivity under green conditions was developed.

References

- [1] Meireles, B. A.; Pereira, V.L.P. *J. Braz. Chem. Soc.*, **2013**, 24, 17-25.
- [2] Chen, J. *et al. Bioorg. Med. Chem. Lett.*, **2013**, 23, 5061–5065.
- [3] Finkelstein, H. *Eur. J. Inorg. Chem.*, **1910**, 43, 1528-1532.
- [4] Xie, W.; Li, H. *J Mol Catal A: Chem*, **2006**, 255, 1–9.

Área: ANA

Nº de Inscrição: 00682

Extraction of organic compounds in aqueous fraction of bio-oil

Laryssa Meneguel Santos (IC),¹Antônia Regina dos S. Gois (IC),² Leslie Cruz de Carvalho (IC),³ Lisiane dos Santos Freitas (PQ),¹Solange da C. Almeida Cerqueira (PG).^{1*}

meneguellarlyssa@gmail.com;

³Chemistry Department, Federal University of Sergipe, Campus Prof. José Aloísio de Campos, Av. Marechal Rondon, s/n, Jardim Rosa Elze – CEP: 49100-000 – São Cristóvão/SE, Brazil

Palavras Chave: UALLE; *Aqueous Fraction*, *Pyrolysis*; *Bio-oil*

Highlights

Effect of ultrasound assisted liquid-liquid extraction in for polar compounds extraction in the aqueous phase bio-oil;

The ultrasound-assisted liquid-liquid extraction increases organic compounds yields;

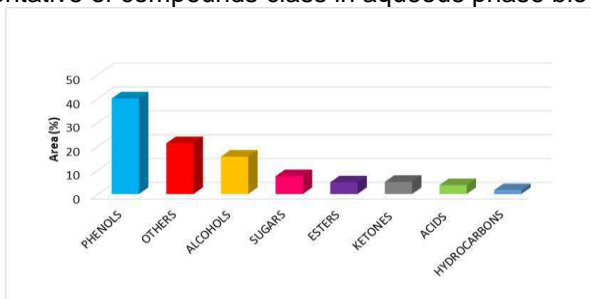
GC/MS analysis showed presence of large amounts of oxygen compounds in aqueous phase pyrolysis.

Resumo/Abstract

Pyrolysis is a thermal decomposition process that transforms biomass into biochar, biogas, and bio-oil. The bio-oil consists of an organic part and an aqueous fraction. The aqueous fraction of the bio-oil is a complex mixture of organic compounds, as: Phenols, sugars, short chain carboxylic acids, among others, that can be recovered and destined to the industries of chemical inputs, being raw material in the production of phenolic resins, secondary intermediaries in the production of chemicals products. The present work seeks to develop the methodology of ultrasonic-assisted extraction and to characterize the extract from the aqueous fraction. After obtaining it through the pyrolysis process, the aqueous fraction was submitted the analysis of pH and total carbon determination (TOC). For the characterization of the compounds, liquid-liquid extraction was used with the aid of ultrasound. The extraction process used ethyl acetate as a solvent in the proportion 1: 4 (Vol. Sample / Vol. Solvent), which was previously studied in an experimental design to determine the frequency (100%), temperature (30 °C) and time (10 min). The value of 3.9 relative to the pH obtained indicates a acid characteristic of the aqueous fraction, due the presence of acids, phenols and others oxygens compounds. The results of the experimental planning showed that the proportion 1: 4 in 30 ° C, 10 min and 100% power was the most efficient when compared to total area chromatograms. The TOC analysis determined the total carbon concentration in the aqueous fraction sample, the value obtained was 773.8 mg L⁻¹. The aqueous phase bio-oil showed high toxic compounds and in elevated concentrations.

The detected compounds are separated as the functional groups of acids, hydrocarbons, ketones, phenols, alcohols, esters, sugars, and others. Figure 1 shows the distribution chemical compositions of the aqueous phase bio-oil produced from guava seed.

Figure 1: Distribution representative of compounds class in aqueous phase bio-oil.



The greater amount of phenols is due to the breakdown of the lignin an amorphous polymer that has in its structure phenols compounds. The presence of such compounds showed the importance of extraction for characterization of the sample.

Agradecimentos/Acknowledgments

[CAPES, CNPQ, LAC, UFS].

Síntese de novos derivados triazólicos com potencial atividade antifúngica

Cleiton M. da Silva (PQ),* Luciana P. Silva (PG), Mariana I.C. Faria (IC).

cleitonmsufmg@yahoo.com

Grupo de Estudos em Química Orgânica e Biológica (GEQOB), Departamento de Química, Universidade Federal de Minas Gerais, Belo Horizonte, MG.

Palavras Chave: síntese orgânica, derivados triazólicos, atividade antifúngica.

Highlights

Synthesis of new triazole derivatives with potential antifungal activity.

In this work we employed the strategy of molecular simplification and the “click chemistry” to synthesize new triazole derivatives as potential antifungal agents.

Resumo/Abstract

As infecções fúngicas constituem um desafio significativo para a saúde pública. A incidência de infecções fúngicas invasivas (IFIs) tem aumentado drasticamente nas últimas décadas, sendo uma importante causa de morbidade e mortalidade em pacientes enfermos e imunocomprometidos.¹⁻³ Estima-se que IFIs sejam responsáveis por 1,5 milhão de mortes a cada ano em todo o mundo. Contudo, os fungos se apresentam como alguns dos patógenos mais negligenciados em termos da descoberta de novos medicamentos.⁴ Atualmente, as opções terapêuticas para o tratamento de IFIs são limitadas a quatro classes de fármacos: azóis, equinocandinas, polienos e análogos de pirimidina. No entanto, tais substâncias não são completamente eficazes devido ao desenvolvimento de resistência e toxicidade ao hospedeiro, limitando seu uso na prática médica.⁵ Tais desvantagens revelam a importância de se buscar novos compostos mais eficientes e de fácil obtenção. Neste contexto, este trabalho tem por objetivo o planejamento e a síntese de novos derivados triazólicos como potenciais agentes antifúngicos. Para tal, o antifúngico ravuconazol (Fig.1) foi usado como protótipo. A rota de síntese proposta é mostrada no Esquema 1.

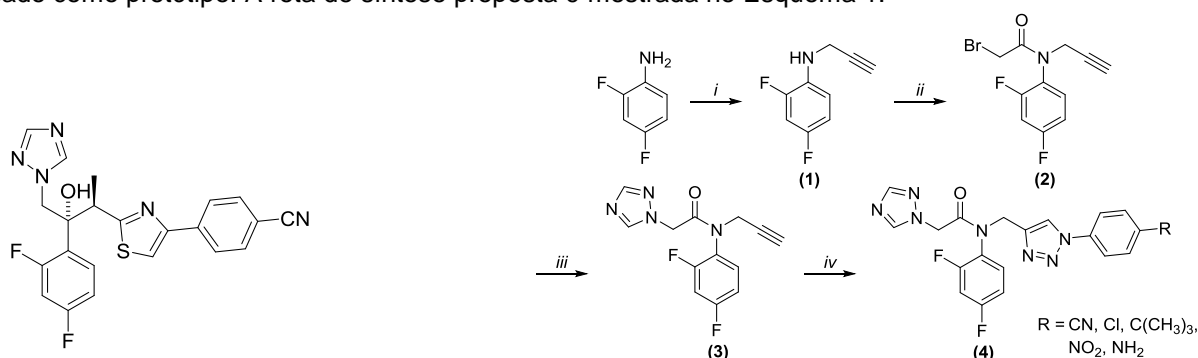


Figura 1. Estrutura do antifúngico ravuconazol

Esquema 1. i) brometo de propargila, DMF, K₂CO₃, t.a.; ii) brometo de bromoacetila, CH₂Cl₂, trietilamina, t.a.; iii) 1,2,4-triazol, K₂CO₃, acetona, t.a.; iv) azida orgânica, H₂O:CH₂Cl₂, CuSO₄, ascorbato de sódio, t.a.

Todos os intermediários e produtos finais foram devidamente caracterizados por espectroscopias na região do IV e de RMN de ¹H e ¹³C. Tais substâncias serão submetidas a ensaios a fim de se avaliar suas atividades antifúngicas.

Referências: ¹Garber, G. *Drugs*. **2001**, 61:1; ²McNeil, MM *et al. Clin Infect Dis*. **2001**, 33:641; ³Shoham, S *et al. Future Microbiol*. **2012**, 7:639; ⁴Bongomin, F *et al. J. Fungi*, **2017**, 3:57; ⁵Campoy, S. *et al. Biochem Pharmacol*. **2017**;133:86.

Agradecimentos/Acknowledgments

CNPq, CAPES, FAPEMIG e UFMG

Área: EDU

Nº de Inscrição: 00685

O uso de aplicativos para Android como ferramenta pedagógica no ensino de Química

Leonardo F. Soares (PG),^{1*} Maria G. V. Silva (PQ)^{1,2}mgvsilva@ufc.br; mgvsilva@gmail.com¹Mestrado em Ensino de Ciências e Matemática - UFC; ²Departamento de Química Analítica e Físico-Química-Universidade Federal do Ceará (UFC).Palavras Chave: *App Inventor, Metodologias ativas, Android, Estequiometria*

Highlights

The use of Android App as a pedagogical tool for teaching chemistry.

The App Inventor virtual platform (MIT Media Lab) was used for app with the chemistry content: "stoichiometry".

Resumo/Abstract

Dispositivos eletrônicos, especialmente os móveis, fazem parte da nossa rotina influenciando o cotidiano dos estudantes em que a grande maioria são "nativos digitais", surgindo como uma alternativa para atividades escolares, permitindo desenvolver habilidades como a criatividade, trabalho em equipe, resolução de problemas, além de melhorar o desempenho escolar¹. Plataformas *online* como o *App Inventor* (App Inventor for Android) e o *Thunkable* (Massachusetts Institute of Technology - MIT) são opções amigáveis com diversos recursos que podem contribuir para ampliar habilidades e conhecimentos em diversos conteúdos. Este trabalho objetivou disponibilizar uma alternativa metodológica ativa para o ensino de Química, empregando-se a plataforma online *App Inventor* como ferramenta pedagógica. Aplicativos para dispositivos móveis com o conteúdo "estequiometria" foram desenvolvidos por estudantes de uma turma de 46 alunos da segunda série do Curso Profissionalizante de Química, em uma escola pública estadual, na cidade de Maracanaú, CE. A metodologia e alguns dos resultados são apresentados na tabela 1.

Tabela 1- Metodologia e Resultados obtidos com o desenvolvimento do trabalho

| Etapa | Objetivos | Atividades | Resultados |
|----------------|---|--|---|
| 1 ^a | Revisar o conteúdo "estequiometria". | Aula expositiva referente conteúdo estequiometria e aplicação de questionário. | A maioria dos estudantes não conseguiu perceber o significado contido nas questões. |
| 2 ^a | Desenvolver nos estudantes, habilidades no uso de ambientes virtuais de aprendizagem. | Execução de oficina temática com a construção dos aplicativos utilizando-se o App Inventor e o Thunkable ² . | Interesse e envolvimento dos estudantes com as atividades. |
| 3 ^a | Desenvolver aplicativos com orientação do professor. | Desenvolvimento dos aplicativos em equipes de cinco estudantes utilizando-se o App Inventor. | Foram desenvolvidos 5 aplicativos: um <i>app</i> de notícias, um <i>podcast</i> , uma calculadora, um <i>quiz</i> e um jogo para realizar o balanceamento de equações. |
| 4 ^a | Avaliação qualitativa e quantitativa | Apresentação dos aplicativos pelas equipes na sala de aula socializando as etapas da produção dos aplicativos e o conteúdo presente. Aplicação de questionários. | Evolução em habilidades sócio-emocionais (desenvolvimento da empatia, tolerância, confiança, interação e aprendizado com os colegas). Cerca de alunos (71%) acertou três de quatro questões sobre estequiometria. |

Observou-se que a metodologia empregada provocou nos estudantes uma ampliação de suas capacidades cognitivas ao utilizarem as suas habilidades tecnológicas para desenvolver e utilizar um produto com finalidade pedagógica, constituindo-se em uma ferramenta alternativa para um ensino de Química mais interessante e significativo.

1- DUDA, R.; SILVA, S.C.R. *Rev Tecnol Edu*, 7, 3, 2015.2- LEITE, B. *Rev Bras Ens Ciênc Tecnol*. 10, 4873, 2017.

Heterogeneous catalytic hydrogenation of cafestol-kahweol mixture obtained from green coffee beans

Fernanda A. Lima (PG)^{1*}, Rodrigo O. M. A. de Souza (PQ)¹, Fernando C. da Silva (PQ)², Claudia M. Rezende (PQ)¹.

Fernanda.lima@id.uff.br; Claudia.rezendeufrj@gmail.com

¹Instituto de Química, PGQu, UFRJ.

²Instituto de Química, UFF.

Keywords: Hydrogenation, Cafestol, Kahweol, Coffee.

Highlights

The heterogeneous catalytic hydrogenation of cafestol-kahweol mixture obtained from green coffee beans is studied. The selectivity of the catalysts Pd/C-quinoline and Pd/CaCO₃-quinoline on the hydrogenation reaction is discussed.

Introduction

Cafestol is an *ent*-kaurane diterpene found in the arabic green coffee beans, which has several biological activities, such as antioxidant¹ and anti-inflammatory², and is a promising raw material for pharmaceutical and cosmetic industries. Bertholet³ related the preparation of cafestol by hydrogenation of a cafestol-kahweol mixture derived from coffee oil, using partially deactivated palladium catalyst on calcium carbonate and active carbon support, both conditioned by lead. In this present study, the selective hydrogenation of the cafestol-kahweol mixture obtained from green coffee beans using Pd/C and Pd/CaCO₃ partially deactivated with quinoline as greener catalyst poison is discussed.

Results and Discussion

After the isolation of C&K mixture from arabica green coffee beans,⁴ the hydrogenation reactions were carried out using Pd/CaCO₃ with 1% of quinoline (Reaction I) and Pd/C with 1% of quinoline (Reaction II) (Table 1). The two reactions were monitored by GC-MS after 5, 30 and 60 minutes. The results are shown in the Table 2.

Table 1. Hydrogenation reactions parameters.

| Reaction I | Reaction II |
|---|---|
| 100 mg de C&K | 100 mg de C&K |
| 25 ml ethanol 95% | 25 ml ethanol 95% |
| 5 mg Pd/CaCO ₃ 1% quinoline 2 bar H ₂ | 5 mg Pd/C 1% quinoline 2 bar H ₂ |
| Room temperature | Room temperature |

Table 2. Hydrogenation of C&K with Pd/C and Pd/CaCO₃ at different times.

| Entry | Catalyst | Time (min) | C (%) [*] | K (%) [*] | DP (%) [*] | FRHP (%) [*] |
|-------|----------------------|------------|--------------------|--------------------|---------------------|-----------------------|
| 1 | Pd/CaCO ₃ | 5 | 62 | 31 | 7 | - |
| 2 | Pd/CaCO ₃ | 30 | 90 | 1 | 7 | 2 |
| 3 | Pd/CaCO ₃ | 60 | 87 | - | 8 | 5 |
| 4 | Pd/C | 5 | 78 | - | 22 | - |
| 5 | Pd/C | 30 | 60 | - | 7 | 33 |
| 6 | Pd/C | 60 | 10 | - | 4 | 86 |

DP: Dehydration products; FRHP: Furan ring hydrogenation products.

^{*}Values based on GC absolute area.

After 5 minutes, the conversion was not complete using the catalyst Pd/CaCO₃ (entry 1). Using Pd/C, all kahweol was consumed but higher amounts of dehydrated products involving the C-16 tertiary hydroxyl were observed (entry 4). After 30 minutes, the reaction using Pd/CaCO₃ showed the higher conversion. Low amounts of dehydration products and furan ring hydrogenation products were observed (entry 2). After 60 minutes, the results were quite the same (entry 3). After 30 and 60 minutes of the reaction using Pd/C, the cafestol concentration decreased and furan ring hydrogenation products prevailed (entry 5 and 6).

Conclusion

The best conversion of kahweol to cafestol was achieved with Pd/CaCO₃-quinoline through heterolytic hydrogenation. The Pd/C-quinoline catalyst was more reactive than Pd/CaCO₃-quinoline, producing higher amounts of hydrogenated furan ring products over time. The quinoline concentration should be adjusted in order to control reactivity and decrease unwished products formation.

Acknowledgment

To PGQu-IQ/UFRJ, Faperj, Embrapa Café, CNPq and Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior - Brasil (CAPES) - Finance Code 001 for financial resources.

¹Lee, K. J. Food Chem. Toxicol. **2007**, 45, 2118; ²Cárdenas, C. Plos One. **2011**, 6, 23407; ³Bertholet, R. United States Utility Patent, **1987**, 4,692,534; ⁴Novaes, F.J.M. 2017. Tese de doutorado, UFRJ.

Vinylic substitution on Methyl 3,3-bis-methylsulfanyl-2-cianoacrylate.

Jorge L. F. Lacerda (IC), Edward K. S. Gonçalves (IC), Diego P. Sangi (PQ)*.

Jl.lacerda4@gmail.com; dpsangi@id.uff.br

Departamento de Química, Instituto de Ciências Exatas, Universidade Federal Fluminense

Palavras Chave: Methyl 3,3-bis-methylsulfanyl-2-cianoacrylate; Vinylic substitution; N,S-acetals

Highlights

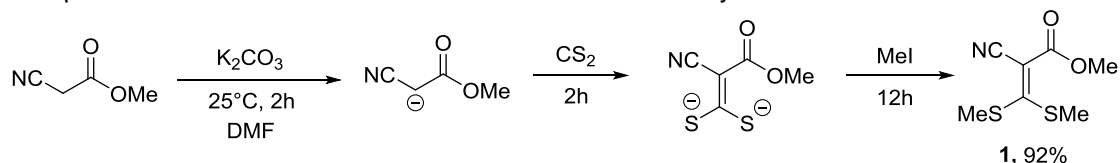
Polarized dithioacetals are important building blocks on synthesis of heterocyclic compounds. Here we show the synthesis and application of Methyl 3,3-bis-methylsulfanyl-2-cianoacrylate on the N,S-acetal and heterocyclic compounds preparation.

Resumo/Abstract

Polarized dithioacetals as important building blocks on the synthesis of organic compounds with potential biological activity. These compounds react with good nucleophiles by mechanism of addition-elimination being able to produce easily N,S, N,O and N,N acetals.¹

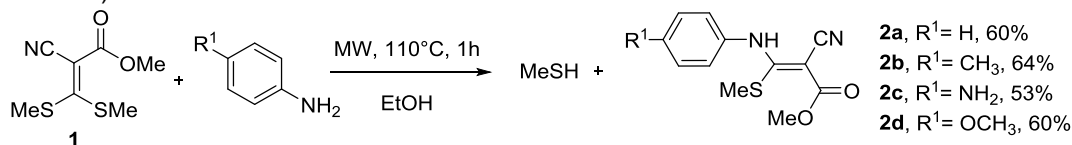
Some Nucleophilic substitution figure as one of the most important reactions used to synthesize organic compounds. The majority substrate where leaving group is tied to sp² carbon hybridized hardly react by SN₁ or SN₂ mechanisms, although vinylic compounds containing electron withdrawal group in β carbon of leaving group currently works as a substrate to nucleophilic substitution reactions that operates by addition-elimination mechanisms.

In this work, we synthesized Methyl 3,3-bis-methylsulfanyl-2-cianoacrylate (**1**), for this, we explored acidness of methyl 2-cyanoacetate, to addition on carbon disulfide, followed by one-pot methylation using methyl iodide.² The polarized ketene dithioacetal was obtained with 92% of yield like showed in scheme 1.²

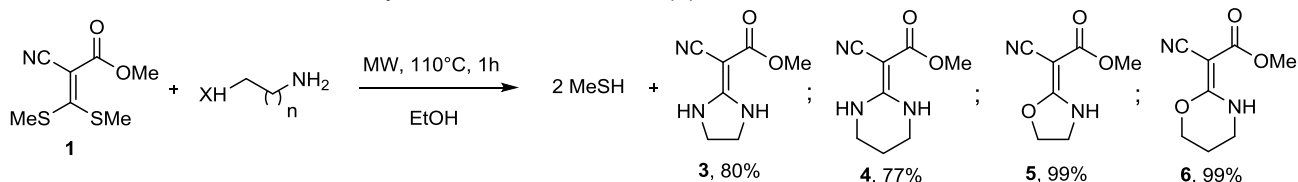


Scheme 1. Synthesis of methyl 3,3-bis-methylsulfanyl-2-cianoacrylate **1**.

Following, we investigated compound **1** reactivity on single and double vinylic substitution to obtain N,S acetals, intermediates on heterocyclic synthesis, and N,N or N,O heterocyclic compounds respectively (Scheme 2 and 3).



Scheme 2. Microwave assisted synthesis of N,S-acetals (**2**).



Scheme 3. Microwave assisted synthesis of heterocyclic (**3-6**).

References: 1. D.P. Sangi, et al., *Journal of the Brazilian Chemical Society*, vol 25, 887-889(2014). 2. D.Thomae, et al., *Tetrahedron*, 65, 10453-10458(2009).

Agradecimentos/Acknowledgments

Thanks to the Carlos Chagas Filho Foundation for Research Support of the State of Rio de Janeiro (FAPERJ) and to the Pro-Rector for Research, Graduate Studies and Innovation (proppi-UFF).

Área: MED

(Inserir a sigla da seção científica para qual o resumo será submetido. Ex: ORG, BEA, CAT)

Nº de Inscrição: 00690

(Inserir o número de inscrição do autor que fez a submissão)

Sulfated and carboxymethylated botryosphaeran as a novel antiviral polysaccharide derivative

José L. Lopes (PG)^{1*}, Vinicius S. T. Quinteiro (IC)¹, Vitor Y. Ito (IC)², Aneli M. Barbosa-Dekker (PQ)¹, Lígia C. F. Galhardi (PQ)², Rosa E. C. Linhares (PQ)², Alexandre Orsato (PQ)¹

orsato@uel.br; louzinho.lopes@gmail.com

¹Departamento de Química, CCE/UEL; ²Departamento de Microbiologia, CCB/UEL

Palavras Chave: Sulfated Polysaccharides, Botryosphaeran, Antiviral, Herpes.

Highlights

After sulfonylation, sulfate groups provide good antiviral activity to carboxymethylated botryosphaeran against herpes simplex virus both sensible to acyclovir and resistant to acyclovir, and poliovirus.

Resumo/Abstract

Sulfated polysaccharides are remarkable antiviral agents against enveloped viruses. In previous works, our research group prepared sulfated botryosphaeran derivatives with good antiviral activity against herpes simplex virus (sensible and resistant to acyclovir strains) and dengue. Botryosphaeran, a β -glucan¹, has moderate antiviral activity against the same viruses. Since the only difference between them is the presence of sulfate groups, the antiviral activity is strongly attributed to these groups. Enveloped viruses display glycoproteins on their surfaces responsible for viral binding and entry into the host cell. These glycoproteins contain cationic motifs able to interact with the negatively charged sulfate groups of polysaccharides. The interaction between the viral glycoproteins and the sulfated polysaccharides block the enveloped viruses from binding to host cells². In an attempt to enhance the antiviral activity of botryosphaeran, the polysaccharide was submitted to carboxymethylation, with monochloroacetic acid, and sulfonylation, with chlorosulfonic acid. The derivatization was performed in order to make botryosphaeran more similar to heparan sulfate, the host cell receptor to the viral glycoproteins, which has both carboxyl and sulfate groups. Infrared spectroscopy confirmed the success of both derivatizations. The carboxymethylated/sulfated derivative of botryosphaeran was tested against two strains of herpes simplex virus, one sensible to acyclovir and the other resistant to acyclovir, and a strain of poliovirus. The derivative displayed moderate to good antiviral activity against all viruses tested. The presence of the anionic groups is indicated to be responsible for viral inhibition.

1. BARBOSA A. M. et al. *Carbohydr. Res.*, 338, 1691–8, 2003. 2. DUARTE, M. E. R. et al. *Carbohydr. Res.*, 339, 335-347, 2004.

Agradecimentos/Acknowledgments

CNPq (grant 409016), CAPES, LP MBA-UEL, LQP-UEL, ESPEC-UEL

Área: AMB

Inscrição: 00691

Investigation of changes in the polyphenolic profile of *Lycopersicon esculentum* (tomato) leaves caused by lead contamination

Thayná L. Mesquita (IC), Matheus V. Curti (IC), Carlos E. R. de Paula (PQ), Rodolfo S. Barboza (PQ)*.

mesquita.thayna@gmail.com; rodolfosb@iq.ufrj.br

Departamento de Química Analítica, Instituto de Química, UFRJ.

Key words: Lycopersicon esculentum, Tomato, Lead, Profile, Plant-metal interaction.

Highlights

Polyphenolic profile changes of *Lycopersicon esculentum* (tomato) leaves caused by lead contamination; Cultivation Viability; Antioxidant valuation by DPPH; Lead determination by AAS.

Abstract

The present study investigates the cultivation of *Lycopersicon esculentum* Miller (tomato) under lead (Pb) contamination stress on controlled levels of contamination of 25, 50, 75 and 100 ppm (mg of Pb per kg of soil), over 60, 90 and 120 days. Lead was ranked as the second most dangerous element on the priority list of the American Environmental Protection Agency (ATSDR, 2005). CONAMA resolution n. 420/09 established 72 ppm as the prevention value concentration for Pb in soils (BRASIL, 2009). The main parameters adopted to evaluate the influence of soil contamination in plant development were the anatomical characteristics and the polyphenols substances profiles of leaves from cultivated specimens. In general, the leaves and stems masses of contaminated plants were greater than those of the control, while smaller root masses suggested an atrophy caused by Pb contamination. The thin layer chromatography analyses of the leaves methanolic extracts, under specific conditions to polyphenols substances monitoring, suggested the selective production of a flavonoid under 25 ppm of Pb in 60 days. Moreover, this substance showed potential antioxidant activity through DPPH reagent reaction. The determination of Pb levels in the leaves is still being carried out using atomic absorption spectrometry in graphite furnace on an atomic absorption spectrometer Perkin Elmer AA600, equipped with Perkin Elmer AA800 automatic sampler and graphite tube with transverse heating.

ATSDR - AGENCY FOR TOXIC SUBSTANCES AND DISEASE REGISTRY. A priority list of hazardous substances. United States, Public Health Service, 2005.

BRASIL. Conselho Nacional do Meio Ambiente. Resolução n. 420, Dez/2009. Diário Oficial, 30 dez. 2009, p. 81-84.

Synthesis of liquid crystals precursors containing the isoxazole core

Leonardo Poloni Pavan (IC)¹, Luana Dezingrini Lopes (PG)¹, Aloir Antonio Merlo (PQ)^{1*}

leo.lppavan@gmail.com; aloir.merlo@ufrgs.br

¹ Instituto de Química, Universidade Federal do Rio Grande do Sul (UFRGS), Porto Alegre, RS, Brazil.

Palavras Chave: Isoxazole, Liquid Crystals, Fluorine, Synthesis.

Highlights

Liquid crystals containing the isoxazole core. Simple synthetic route with medium to high yields. Fluorine substituents. Intermediates in the construction of liquid crystals monomers.

Resumo/Abstract

Isoxazolines and isoxazoles are interesting intermediates in organic synthesis,¹ and play an important role in the synthesis of novel liquid crystalline materials.² The isoxazole ring incorporates a strong dipole moment and this polar effect favors the increasing of molecular anisotropic polarizability. Consequently, it induces the formation of stable mesophase with enantiotropic behavior. The incorporation of fluorine into organic molecules has received intensive attention due to the unique characteristics that this substituent gives to the products, both in material science and in pharmaceutical industry. In fact, the study of fluorine influence on the control of the liquid crystalline properties is being stimulated because it ensures significant modifications in respect of melting point, mesophase morphology and transition temperatures.³

In the present work we have synthesized and characterized new bromine-terminated isoxazoles (Figure 1) which will be connected to glycerol framework to produce polymerizable liquid crystals allyl monomers. Using the oximes, previously prepared, isoxazoles were obtained by [3+2] 1,3-dipolar cycloaddition of nitrile oxide with 4-*tert*-butoxystyrene to access the key intermediate isoxazoline, followed by MnO₂-oxidation reaction to yield the corresponding isoxazole. To achieve the compounds illustrated below, other two simple steps were necessary. The first one was the removal of the protective group in acidic medium to provide the phenol, which was alkylated using alkyl dibromide.⁴ All the products were obtained with medium to high yields. Bromine-terminated isoxazoles are excellent advanced precursors to be bonded to the glycerol portion, and then become liquid crystalline materials.

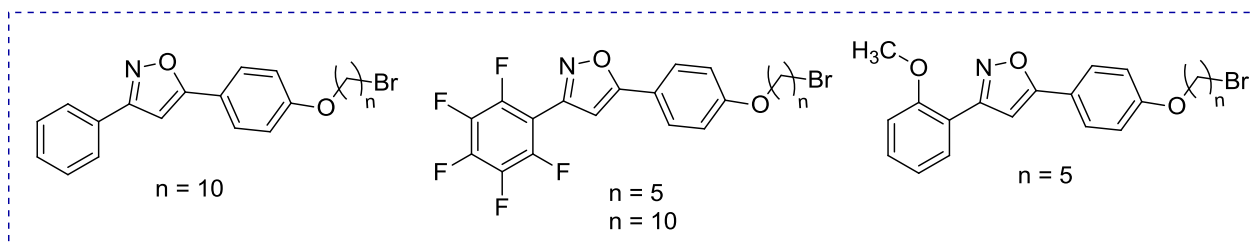


Figure 1: Bromine-terminated isoxazoles structures.

References:

- [1] a) Fuller, A. A. et al.; *J. Am. Chem. Soc.* 2005, 127, 5376. b) Muri, D.; Carreira, E. M. *J. Org. Chem.* 2009, 74, 8695.
 [2] a) Kuo, H.-M. et al.; *Tetrahedron* 2013, 69, 618. b) Brown, D. H.; Styring, P. *Liq. Cryst.* 2003, 30, 23.
 [3] a) Hird, M. *Chem. Soc. Rev.* 2007, 36, 2070. b) Al-Maharik, N. et al.; *Tetrahedron* 2014, 70, 4626.
 [4] Vilela, G. D. et al.; *Tetrahedron Lett.* 2011, 52, 6569.

Agradecimentos/Acknowledgments

This work was supported by MCT/CNPq Ed. Universal 01/2016 n° 403075 2016-5, FAPERGS and PPGQ-UFRGS. L. D. Lopes thanks CNPq for her fellowship.

Theoretical Study of a series of sulfonamide tubulin inhibitors against the growth of *Trypanosoma brucei* (T. brucei)

Eduarda L. S. da Anunciação^{1*}(IC), Solange M. V. Corrêa¹ (FM), Ricardo M. Miranda² (FM)
Eduarda.leticia444@gmail.com; scorreacefetpa@yahoo.com.br

¹Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia do Pará, Campus Belém, ²Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia do Pará, Campus Ananindeua

Palavras Chave: *Tripanossoma Brucei*, Doença do sono, Inibidores sulfonamidas

Highlights

- ✓ A doença do sono é causada por parasitas protozoários pertencentes ao gênero *trypanossoma*.
- ✓ Parasitas transmitidos pela picada das moscas tsé-tsé que adquiriram a infecção de animais ou de seres humanos.

Resumo/Abstract

A tripanossomíase africana humana, também conhecida como doença do sono, é uma das mais complexas doenças tropicais endêmicas, causada por tripanossomos transmitidos pela mosca tsé-tsé, e provoca dores de cabeça, febre, fraqueza e dor nas articulações e pode provocar distúrbios neurológicos e psiquiátricos graves¹. Existe uma necessidade urgente de desenvolver uma terapia segura, eficaz, oralmente ativa e barata

para a tripanossomíase africana devido às desvantagens dos medicamentos atuais. Os inibidores seletivos de tubulina têm potencial para serem candidatos promissores de drogas para o tratamento desta doença, que se baseia na diferença estrutural da proteína tubulina entre células de mamíferos e tripanosomas, inibidores da classe das sulfonamidas foram sintetizados por NANAVATY et al., 2016². Este trabalho consiste no planejamento de inibidores sulfonamidas, de tubulina, através de estudos computacionais baseados na relação quantitativa estrutura atividade (QSAR-3D). 79 derivados da sulfonamida, foram otimizados quanticamente com o programa Gaussian 03, adicionados cargas e submetidos ao alinhamento molecular (Figura 1), com o programa SYBYL 8.2. Em seguida, criou-se modelos QSAR-3D para estabelecer a relação entre atividade farmacológica e estrutura molecular, aplicando os métodos de Análise Comparativa dos Campos Moleculares (CoMFA) e Análise Comparativa dos Índices de Similaridade Moleculares (CoMSIA) embutidos na plataforma SYBYL. As atividades foram correlacionadas com os campos estéricos e eletrostáticos no modelo CoMFA, enquanto que no modelo CoMSIA são correlacionados também os campos hidrofóbicos, acceptor e doador de ligações de hidrogênio. Os modelos após construídos, forma validados interna e externamente, por meio de parâmetros como coeficiente de determinação (R^2), coeficiente de validação cruzada (q^2) e R_2 predito (R^2_{pred}), essenciais para sua confiabilidade e consistência do modelo. Com os modelos construídos obteve-se a atividade de outros 20 derivados planejados a partir dos 79 derivados da sulfonamida.

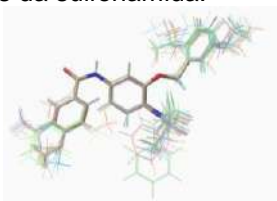


Figura 1: Alinhamento molecular 79 compostos inibidores da classe das sulfonamidas, da tubulina, a partir do mesmo fragmento (farmacóforo).

REFERÊNCIAS:

- [1] Avanços para Superar o Impacto Global de Doenças Tropicais Negligenciadas. Primeiro Relatório da OMS sobre doenças tropicais negligenciadas. Organização Mundial da Saúde, 2012.
- [2] Nanavaty V., Lama R., Sandhu R., Zhong B., Kulman D., Bobba V., Zhao A., Li B., Su B.. Orally Active and Selective Tubulin Inhibitors as Anti-Trypanosome Agents. US National Library of Medicine National Institutes of Health, 15 de janeiro de 2016.

Synthesis of polylactic acid-lemongrass essential oil nanocapsules and their activity against *C. gloeosporioides* and *C. acutatum*

Gabriela Antonioli (PG)¹, Gabrielli Fontanella (IC)¹, Sérgio Echeverrigaray (PQ)¹, Gabriel F. Pauletti (PQ)¹, Thiago Barcellos (PQ)^{1*}

gantonioli@ucs.br; thiago.barcellos@ucs.br

¹Biotechnology Graduate Program (PPGBio), University of Caxias do Sul (UCS), Caxias do Sul, Brazil.

Keywords: Nanocapsules, Lemongrass, Essential oil, Ripe rot on grapes, Anthracnose.

Highlights

Nanocapsules developed from biodegradable polymer shell and a natural product core effectively applied against ripe rot on grapes and anthracnose.

Abstract

Grapes are among the most produced fruits reaching in 2017 a 1.91 million tons production in Brazil.^[1] Despite the great production, grapes are commonly attacked by pathogens such as *Colletotrichum gloeosporioides* and *Colletotrichum acutatum*, which are responsible for ripe rot on grapes and anthracnose, usually controlled with fungicides containing pyraclostrobin + metiram and tetraconazole.^[2] Nevertheless, pesticides-free foods are a world tendency. Therefore, essential oils are seen as an environment friendly alternative for these fungicides. However, essential oils are volatile and photodegradable. Thus, this work aimed to develop PLA nanocapsules with a lemongrass essential oil core (LG-PLA-NCs) and evaluate their activity against phytopathogens.^[3] The nanocapsules were developed by solvent evaporation method. The effects of the amount of the surfactants (Tween 80 and Span 60) and essential oil were evaluated using a 2³ factorial design and the mean diameter (MD), zeta potential (ZP) and encapsulation efficiency (EE) as responses. After determining the best synthesis condition, a SEM analysis was performed. Then the spore germination was tested in the presence of the essential oil and the LG-PLA-NCs against the previously cited fungi and based on a germination scale (0 to 4). The optimized methodology led to 99,8% EE, with a MD of 96,4 nm and ZP of -25,2 mV. It was possible to observe spore germination inhibitory dose for both species in LG-PLA-NCs concentrations ≥ 0.1% (Table 1). These results proved the efficiency of lemongrass essential oil encapsulation and showed LG-PLA-NCs activity against *C. gloeosporioides* and *C. acutatum*.

Table 1 – Essential oil and LG-PLA-NCs concentration x germination scale for *C. gloeosporioides* and *C. acutatum*.

| Concentration (%) | Germination scale ^(a) | | | |
|-------------------|----------------------------------|---------------|--------------------|---------------|
| | <i>C. gloeosporioides</i> | | <i>C. acutatum</i> | |
| | LG-PLA-NCs | Essential oil | LG-PLA-NCs | Essential oil |
| 0.4 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| 0.2 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| 0.1 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| 0.05 | 0 | 0 | 1 | 0 |
| 0.025 | 0 | 0 | 2 | 0 |
| 0.0125 | 2 | 0 | 3 | 1 |
| 0.0063 | 3 | 1 | 3 | 1 |
| Control | 4 | 4 | 4 | 4 |

^(a)0 - no spore germination; 1 - inhibition at the beginning of spore germination; 2 - partial spore germination and very low mycelial growth; 3 - partial spore germination and mycelial growth; 4 - total spore germination and high mycelial growth.

Acknowledgments

We kindly acknowledge Cargill by the PLA donation, CAPES, CNPq, FAPERGS and the University of Caxias do Sul (UCS) for financial support.

[1] FAO - Top 10 Country Production of Grapes 2017. 2018

[2] EMBRAPA. Época de redobrar o cuidado com a podridão-da-uva-madura. 2015.

[3] H.N. Cheng, K. T. Klasson, T. Asakura, Q. Wu. **Nanotechnology**: Delivering on the Promise Volume 2. 2016, 233-242.

High Energy Ball-Milling synthesis of CuO nanoparticles and its catalytic performance for nitroarenes reduction

Aline L. Schio (PG)¹, Márcio R. F. Soares (PQ)¹, Thiago Barcellos (PQ)^{1,2*}

alschio1@ucs.br; thiago.barcellos@ucs.br

¹ Materials Science Graduate Program (PGMAT), University of Caxias do Sul (UCS), Caxias do Sul, Brazil.

² Biotechnology Graduate Program (PPGBio), University of Caxias do Sul (UCS), Caxias do Sul, Brazil.

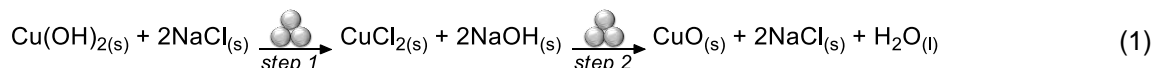
Palavras chave/Keywords: Mechanochemistry, Ball milling, Green chemistry, CuO nanoparticles, Catalysis, Nitroarenes reduction.

Highlights

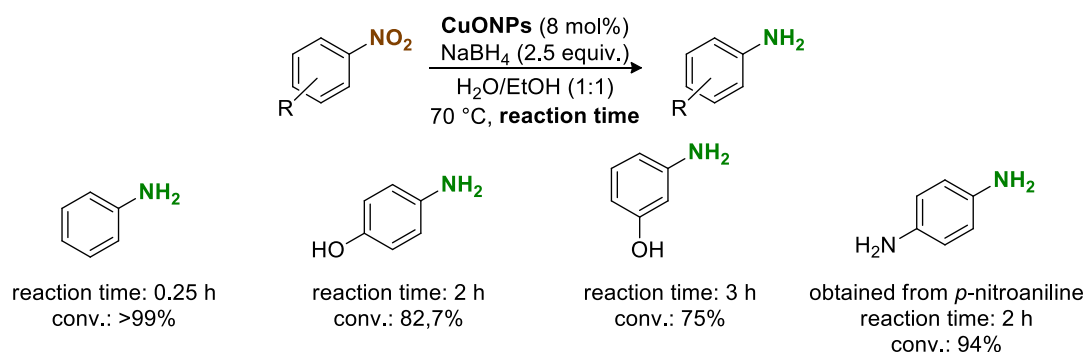
The one-pot, solventless, low-cost and fast synthesized CuONPs and successfully applied as catalyst in the reduction of nitroarenes.

Resumo/Abstract

Pointed as a technique that follows the principles of the green chemistry, the mechanochemistry has been widely used for the synthesis of a myriad of nanoparticles. The chemical reactions are induced by the energy provided by the grinding balls shocks. In addition, the reactions under mechanochemical energy usually do not require solvent. The result is a homogeneous and stable product with good yield and in a fast way.¹ Therefore, the aim of the present work was the development of a high energy mechanochemical synthesis of cupric oxide nanoparticles to apply as catalyst. The low-cost copper precursor Cu(OH)₂ and NaCl were submitted to a high energy mechanical grinding leading to CuONPs (equation 1). After the optimization experiments, the full conversion was achieved after 20 minutes at 1000 rpm and a charge ratio of spheres/reagents of 40:1. The CuONPs were characterized by field emission scanning electron microscope (FESEM), energy dispersive X-ray spectrometry (EDS), dynamic light scattering (DLS) and X-ray diffraction (XRD). An average size of 17 nm for almost 65% of the sample volume, a predominantly spherical morphology and a literature compatible diffratogram were obtained.



The synthesized CuONPs were successfully applied as catalyst in the reduction of nitroarenes.² As instance, nitrobenzene was completely converted to aniline using NaBH₄ as reduction agent after 15 min (Scheme 1).



Scheme 1. Reaction of nitroarenes reduction by sodium borohydride catalyzed by CuONPs.

Agradecimentos/Acknowledgments

We are pleased to acknowledge the support of CAPES, CNPq, FAPERGS and the University of Caxias do Sul.

¹ Ameri et al. *J. Alloys Compd.*, **2017**, 695, 114.

² (a) Kadam, H.K.; Tilve, S.G. *RSC Advances*, **2012**, 2, 6057. (b) Aditya, T.; Pal, A.; Pal, T. *Chem. Commun.*, **2015**, 51, 9410.

Development of an accurate analytical method for crude oil digestion and Hg determination by CVG-ICP-MS

Gabriel T. Druzian (PG), Mariele S. Nascimento (PG), Rochele S. Picoloto (PQ), Erico M. M. Flores (PQ), and Paola A. Mello (PQ)*

rspicoloto@gmail.com; paola.mello@ufsm.br

*Departamento de Química, Universidade Federal de Santa Maria (UFSM), Santa Maria, RS, Brazil
Crude oil, Hg, Microwave-assisted pressurized digestion cavity, Sample preparation, CVG-ICP-MS*

Highlights

It was possible to digest up to 1.1 g of light crude oil.

The carbon concentration and the residual acidity of digests were 3600 mg L⁻¹ and 10%, respectively.

Ultra-trace Hg determination was possible (LOQ was 0.6 ng g⁻¹).

Abstract

Crude oil is a hydrocarbon-based matrix, containing some elements, such as sulfur, nitrogen, oxygen and metals (e.g. Ni, V, and Hg). Regarding to Hg, it may cause poisoning, corrosion, and affect equipment during crude oil refining process, even at low concentration.¹ Considering the difficulties reported for wet digestion of this material and the low levels of Hg typically found in crude oil, as well as the low carbon content and low acidity required in digests by some analytical techniques, the development of an accurate sample preparation method for further Hg determination in crude oil is required. In this work, crude oil digestion employing a microwave-assisted pressurized digestion cavity² is proposed for further Hg determination by chemical vapor generation inductively coupled plasma mass spectrometry (CVG-ICP-MS). An ultra high pressure microwave-assisted digestion system (Multiwave 7000, Anton Paar, Austria) equipped with 5 quartz vessels (80 mL), with maximum temperature and pressure of 270 °C and 160 bar, respectively, was used. The Hg determination was performed by using an inductively coupled mass spectrometer (Elan DRC, Perkin Elmer, Canada). The determination of carbon content in digests and residual acidity was performed by ICP-OES (Perkin Elmer, Shelton, USA) and by titration (836, Metrohm, Switzerland), respectively. Three samples and one certified reference material (CRM) of crude oil (NIST 2722) were used. Recovery experiments were carried out by adding 1 µg L⁻¹ of Hg on the samples before the digestion. Operational conditions, such as the sample mass (0.5 to 1.1 g), the volume of HNO₃ (6, 8, and 10 mL), the maximum temperature (220, 250, and 270 °C), and microwave irradiation time (15, 20, 25, and 30 min) were investigated. Using the optimized conditions (8 mL of 14.4 mol L⁻¹ HNO₃, 270 °C, and 30 min), the proposed method allowed the digestion of 1.1 g of crude oil, resulting in a very low limit of quantification (0.6 ng g⁻¹). Recoveries close to 100% for Hg were obtained for all samples and CRM. The carbon content and residual acidity in digests were about 3600 mg L⁻¹ and 10%, respectively.

Acknowledgments

CNPq, CAPES, FAPERGS and UFSM.

1. J.G. Speight. Handbook of Petroleum Analysis, John Wiley and Sons Inc, New Jersey, 2001, 519 pp.

2. Anton Paar, Instruction Manual and Safety information, Multiwave 7000, 43 pp.

Solid-phase synthesis of a β -amyloid-like peptide-PEG conjugate

Wallace S. G. Pereira (PG), Sandra V. Vassiliades (PG), Wendel A. Alves (PQ).

wallace.sena@ufabc.edu.br

Centro de Ciências Naturais e Humanas, Universidade Federal do ABC, 09210-580, Santo André, Brazil.

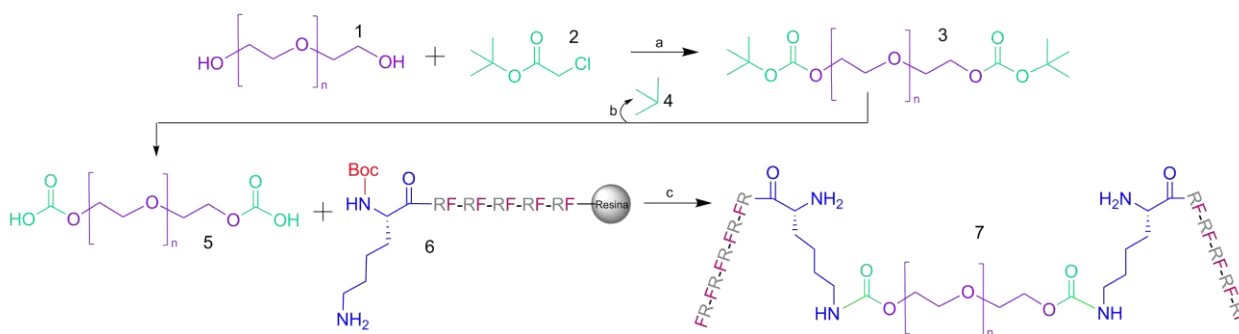
Keywords: Peptide copolymers, Polyethylene glycol (PEG), Cross- β structure, Solid phase synthesis.

Highlights

We have used solid-phase synthesis to obtain a peptide-PEG conjugate, containing an alternating $[RF]_5$ decapeptides (R = arginine, F = phenylalanine) conjugated to PEG of molar mass 1500 g mol^{-1} .

Resumo/Abstract

The peptide unit can be coupled to a synthetic polymer that improved stability against pH, temperature or concentration or which undergoes conformational changes in response to such variables. Recently, we have investigated the aggregation and cytotoxicity of short amyloid-like ($A\beta$) peptides with general form $[RF]_n$ ($n = 1-5$).^[1] The sequences selected are critical in fibrillization. We will also investigate the copolymers' self-assembly between peptide and poly(ethylene glycol), PEG. It is an inert (FDA approved for use in vivo), inexpensive, biocompatible and has well-known physico-chemical properties. We expect that conjugation can enhance the solubility of the $A\beta$ peptides, and led to reversible fibrillization, in contrast to small aggregated oligomers. To obtain **3*** (90,3% yield), PEG was solubilized in MeCN with potassium carbonate (K_2CO_3). It was added, dropwise, *tert*-butyl chloroacetate **2**. For removal of **4** and formation of **5****, **3** was solubilized in DCM:TFA mixture, dried and moved on to the next step. Solid-phase peptide synthesis (SPPS) was used for the growth of the oligopeptide $K[RF]_5$ (**6**), in which lysine as a spacer (highlighted in blue in the scheme below), has a side chain amine available for peptide bonding with a carboxylate group, functionalized previously in PEG (**5**). SPPS, then, was used as a coupling strategy. In the last solid phase coupling, **5** was added to the SPPS system with HBTU, DIPEA and NMP. All the obtained compounds were purified and characterized using different analytical and spectroscopic techniques.



Scheme: **1** – Polyethylene glycol (PEG 1500); **2** – *tert*-butyl chloroacetate; **3** – PEG(TBAC); **4** – isobutane radical; **5** – PEG(CH_2CCOOH)₂; **6** – $K[RF]_5$; **7** – $[FR]_5K$ -PEG- $K[RF]_5$. **a)** 1mmol of PEG 1500, MeCN HPLC, 6.0eq. K_2CO_3 , 30min at 82°C. Added dropwise 4.0eq. of **2**. 18h, 82°C. **b)** **3**, DCM and TFA, 1h, r.t. **c)** SPPS. After the growth of **6**, 2.5eq **5**, 5.0eq. HBTU, 5eq. DIPEA in NMP, 72h, r.t. Acronyms and Abbreviations: MeCN = acetonitrile; DCM = dichloromethane; TFA = Trifluoroacetic acid HBTU = 2-(1H-benzotriazol-1-yl)-1,1,3,3-tetramethyluronium-hexafluorophosphate; DIPEA = N,N-diisopropylethylamine; NMP = 1-methyl-2-pyrrolidinone.

REFERENCE

[1] (a) Decandio, C.C.; Silva, E.R.; Hamley, I.W.; Castelletto, V.; Liberato, M.S.; Oliveira Jr., V.X.; Oliveira, C.L.P.; Alves, W.A. Self-Assembly of a Designed Alternating Arginine/Phenylalanine Oligopeptide. *Langmuir* **2015**, *31*, 4513–4523; (b) Silva, E.R.; Listik, E.; Han, S.W.; Alves, W.A.; Soares, B.M.; Reza, M.; Ruokolainen, J.; Hamley, I.W. Sequence length dependence in arginine/phenylalanine oligopeptides: implications for self-assembly and cytotoxicity. *Biophys. Chem.* **2018**, *233*, 1–12.

Chemical synthesis of ultra-thin films of graphene through the liquid-liquid interfacial method.

Helio O. S. Junior (PG)¹, Lais C. Lopes (PQ)¹, Aldo J. G. Zarbin (PQ)*¹.

helioosj@gmail.com; laiscristinelopes@gmail.com; aldozarbin@ufpr.br

¹Chemistry Department, Federal University of Paraná - UFPR, Curitiba.

Key Words: Chemical synthesis, Benzene, Interfacial method, Thin Films, Graphene.

Highlights

Chemical synthesis and characterization of thin films composed of graphene through the liquid-liquid interfacial method at room temperature, starting from benzene as precursor.

Resumo/Abstract

Since obtaining the isolated form of graphene through mechanical exfoliation and the subsequent discovery of its unique properties, the scientific community concentrates enormous effort in the development of strategies to optimize both the production and processing of graphene^[1]. Among the main challenges in the production of graphene, we highlight the investigation of methods with strict control on the structural quality of the samples, as well as the width of the sheets and the number of layers overlapping^[1, 2, 3]. Recently we reported an innovative route to prepare graphene starting from benzene, at room temperature, based on a chemical reaction with solid iron chloride at room temperature^[3]. Here we demonstrate that similar reaction can be obtained using $\text{AlCl}_3/\text{CuCl}_2$ as oxidizing agent and catalyst. Graphene sheets deposited as thin film at the liquid-liquid interface were obtained from the controlled addition of adequate proportions of $\text{AlCl}_3/\text{CuCl}_2$ to a biphasic system (benzene/water). Different proportions between AlCl_3 and CuCl_2 have been studied, which directly affects the composition of the sample, from high-structural graphene to Poly-paraphenylene (PPP). The samples have been characterized by Raman spectroscopy, FEG-SEM, EDS, XRD and UV-Vis spectroscopy, evidencing the production of high-quality graphene samples, with morphology characterized by well-defined contours and folds as can be seen in Figure 1.

Agradecimentos/Acknowledgments

The authors acknowledge the financial support of CNPq, CAPES and INCT-Nanocarbon.

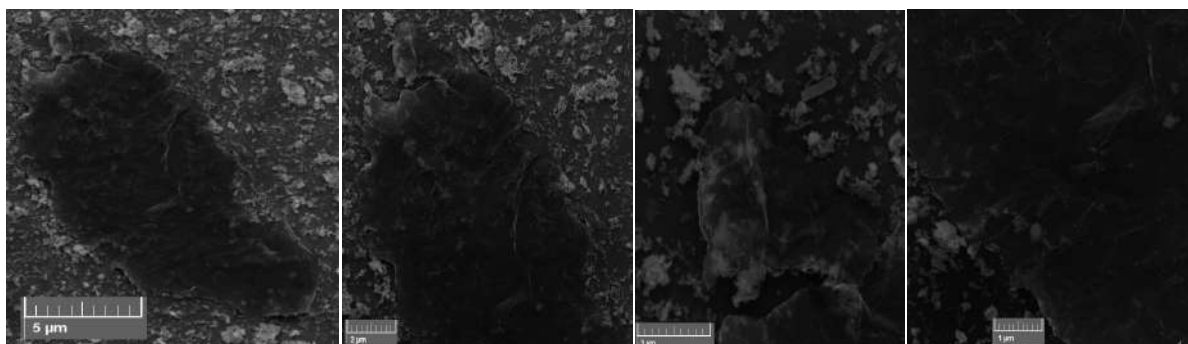


Figure 1: SEM images obtained of the same graphene sheet in different magnifications.

[1] Ravandiir, E. P., Brownson, A. C. D., Banks, G., *A decade of graphene research: production, applications and outlooks*, Materials today, v. 17, **2014**, 426-432.

[2] Salvatierra, R. V., Souza, V. H. R., Matos C. F., Oliveira M. M., Zarbin, A. J.G., *Graphene chemically synthesized from benzene at liquid-liquid interfaces*, CARBON 93, **2015**, 924 –932.

[3] Lopes, L. C., da Silva, L. C., Vaz, B. G., Oliveira, A. R. M., Oliveira, M. M., Rocco, M. L. M., Orth, E. S., Zarbin, A. J. G., *Facile room temperature synthesis of large graphene sheets from simple molecules*, Chem. Sci., **2018**, v. 9, 7297-7303.

Área: ANA

Nº de Inscrição:00701

Evaluation of calibration strategies for Hg determination at ultra-trace level in eye shadow by electrothermal vaporization coupled to ICP-MS

Jussiane S. Silva (PQ),^{1*} Alessandra S. Henn (PG),¹ Graciela M. Heidrich (PG),¹ Paola A. Mello (PQ),¹ Valderi L. Dressler (PQ),¹ Érico M. M. Flores (PQ).¹

jussiane.silva@ufsm.br

¹Departamento de Química, Universidade Federal de Santa Maria, UFSM, Santa Maria - RS, Brazil.

Keywords: ETV-ICP-MS, Calibration Strategies, Direct Solid Sample Analysis, Mercury, Eye Shadow

Highlights

An ETV-ICP-MS method using a simple and low cost ETV system combining the feasibility of calibration with aqueous solution is proposed for Hg determination at ultra-trace level in eye shadow.

Abstract

The use of make-up on the eye region comes from prehistory. Among eye cosmetics, eye shadow can be cited, which are applied in the periocular region. In these areas, the facial skin is thinner and delicate, and there is a higher risk to absorb toxic elements and cause allergic reactions. Toxic elements can be contaminants in the raw material and/or be in the structure of compounds used in cosmetic formulations (such as preservatives and pigments). In the case of Hg, it may come from both the contamination and the compounds used as preservatives. Mercury is a toxic element and even in low concentration can cause serious effects to the human organism. According to ANVISA, Hg and its compounds should not be used in cosmetics, except as preservative for eye make-up, respecting the maximum concentration up to 0.007%.¹ In this view, it is necessary to develop suitable methodologies for Hg determination at low concentration in eye shadow. Electrothermal vaporization (ETV) coupled to inductively coupled plasma mass spectrometry (ICP-MS) has been used for Hg quantification since it minimizes and simplifies the sample pretreatment step and allows quantification at ultra-trace levels.^{2,3} The determination of Hg by ETV-ICP-MS reduces the risk of contamination and losses by volatilization, which may occur in the sample preparation step, especially because relatively high amounts of acids and high temperature are required to convert the sample into a solution. On the other hand, the direct analysis has some drawbacks, mainly the difficulty of calibration, sometimes requiring solid standard reference materials and the low amount of sample that is commonly used, sometimes bringing problems with regard to the lack of homogeneity. In this work, different calibration strategies to determine Hg at low concentration in eye shadow by direct solid analysis using ETV-ICP-MS were evaluated. The ETV system used was developed in the author's laboratory and consists of a high-power lamp enclosed in a glass chamber equipped with solenoid valves to control the flow of carrier gas (Ar) during the heating program.³ Calibration strategies using a certified reference material (CRM, MESS-3) and aqueous reference solutions pipetted onto quartz fiber, magnesium silicate, silicon oxide or titanium oxide were evaluated. The accuracy of the proposed method was evaluated by comparison of the results obtained for CRMs by ETV-ICP-MS with the certified values and no significant difference was observed (*t*-test, 95% confidence level). In addition, samples were digested according to EPA 3052 for further Hg determination by cold vapour-ICP-MS and the results were lower than the limit of quantification (LOQ, 50 ng g⁻¹). Using ETV-ICP-MS and calibration with aqueous solutions on magnesium silicate, the results for the evaluated samples were between 14 and 36 ng g⁻¹, relative standard deviation was lower than 13%, and LOQ was 5 ng g⁻¹. The proposed ETV-ICP-MS method using external calibration with aqueous solutions was suitable for Hg determination at low concentration in eye shadow in a simple way and minimizes the sample pretreatment step.

Acknowledgments

CNPq, CAPES and UFSM for supporting this study.

¹ ANVISA, Agência Nacional de Vigilância Sanitária, Brasília, Brazil, RDC n° 83, de 17 de junho de 2016.

² Silva, J. S., Henn, A. S., Dressler, V. L., Mello, P. A., & Flores, E. M. M. Anal. Chem., 2018, 90, 7064.

³ Wohlmann, W., Neves, V. M., Heidrich, G. M., Silva, J. S., Costa, A. B., Paniz, J. N. G. & Dressler, V. L. Spectrochim. Acta, Part B 2018, 149, 222.

Área: INO Nº de Inscrição: 702
 (Inserir a sigla da seção científica para qual o resumo será submetido. Ex: ORG, BEA, CAT) (Inserir o número de inscrição do autor que fez a submissão)

Building up a hexacopper(II)-pyrazolato/oxamate magnetic complex with rare ethylenedioide ($^{-}\text{OCH}_2\text{CH}_2\text{O}^{-}$) as bridge between copper(II) units

Willian X. C. Oliveira¹ (PQ); Carlos B. Pinheiro² (PQ); Miguel Julve³ (PQ); Cynthia L. M. Pereira¹ (PQ)

williancoliveira@yahoo.com.br; chester@ufmg.br

¹Departamento de Química, Universidade Federal de Minas Gerais, Brazil; ²Departamento de Física, Universidade Federal de Minas Gerais, Brazil; ³ Instituto de Ciencia Molecular (ICMol), Univesitat de València, Spain.

Palavras Chave: Magnetism, Copper(II), Metallic complex, Pyrazol, Oxamate, Polynuclear complex

Highlights

Hexacopper(II) complex build up by two tricopper units linked by pyrazolato-oxamate ligands. Rare ethylenedioide capped and bridged copper atoms. Strong antiferromagnetic coupling in tricopper units.

Resumo/Abstract

Synthesized molecular magnetic materials are expected to replace classical magnetic materials in the future considering their potential applications such as quantum computing, for instance. This work presents a novel hexacopper(II) complex with 1*H*-pyrazolate-3-yl-phenyloxamic acid (H₂Pyox), 1,2-ethylenediol (H₂ed), 1,2-ethylenediamine (en) ligands and its temperature variable magnetic susceptibility study.

The title compound, which has formulae $[\{\text{Cu}_3(\text{en})(\text{ed})\}_2(\text{Pyox})_4] \cdot 2(\text{CH}_2\text{OH})_2 \cdot x\text{H}_2\text{O}$ (**1**), was obtained by slow diffusion of $[\text{Cu}(\text{en})(\text{H}_2\text{O})_2](\text{NO}_3)_2$ and $\text{Bu}_4\text{N}(\text{H}_2\text{Pyox})$ in basic H_2O -ethyleneglycol mixture. The product **1** was obtained as dark blue needle crystals, and was characterized by single crystal X-ray diffraction and DC magnetic measurement.

The molecular structure of the resulting multimetallic complex **1** is composed of two trinuclear $[\{\text{Cu}(\text{en})\}-\mu_2\{\text{Cu}(\text{ed})\}-\{\text{Cu}(\text{en})\}]^{4+}$ species interconnected by Pyox ligands, bonding to the copper atoms by both pyrazolate nitrogen and a carboxylic oxygen atoms, acting as $\mu^3\text{-}\kappa\text{N}_{\text{pyrazol}}\text{:}\kappa\text{N}'_{\text{pyrazol}}\text{:}\kappa\text{O}_{\text{oxalate}}$ ligand. The central Cu(ed) unit exhibits rare dianionic 1,2-ethylenediol group acting as bidentate ligand, capping the central copper atom and bridging it to other two metal ions in $\kappa\text{O}:\kappa\text{O}, \text{O}'\text{:}\kappa\text{O}'$ coordination mode. Crystal structure of **1** is shown in Figure 1a. The magnetic properties of **1** indicates that the trinuclear $[\{\text{Cu}(\text{en})\}-\mu_2\{\text{Cu}(\text{ed})\}-\{\text{Cu}(\text{en})\}]^{4+}$ subunits are weakly coupled via Pyox ligand ($\theta = -0.23$ K) meanwhile the sum of pyrazolate and ethylenedioide bridges leads to a strong antiferromagnetic coupling ($J = -106$ cm⁻¹). Coupling constants were obtained by the best-fit curve using double linear of trinuclear copper(II) systems¹. Both experimental and calculated magnetic susceptibility curves (observed data and best-fit curve) are shown in Fig 1b.

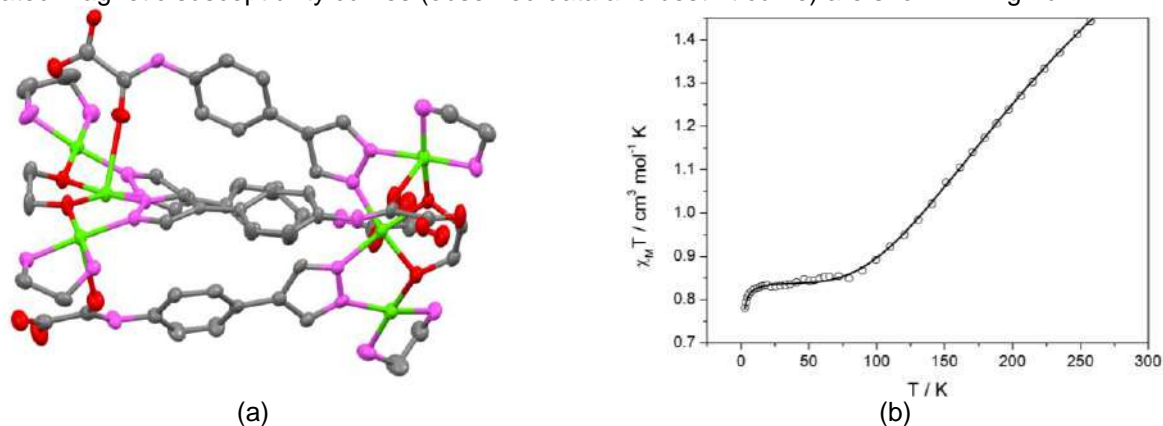


Fig 1. (a) Crystal structure of **1**. Crystalization solvent molecules and hydrogen atoms omitted for clarity. Color scheme: Gray = carbon, pink = nitrogen, red = oxygen and green = copper. (b) Magnetic susceptibility curve of **1** at 0.1 T: (○) experimental data and (–) best-fit curve.

¹ T. R. G. Simões, et. al. *Dalton Trans.*, **2013**, 42, 5778-5795.
 42ª Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química: Eixos Mobilizadores em Química

Effect of ultrasonic pretreatment in the phenolics production by cowpea bean pod catalytic pyrolysis.

Diego F. Bispo (PG)^{1*}, Roberta M. Santos (PG)¹, Honnara S. Granja (IC)¹, Lisiane dos S. Freitas (PQ)¹

lisane_santos_freitas@yahoo.com.br; diegofonbis@gmail.com

¹Chemistry Department, Federal University of Sergipe, Campus Prof. José Aloísio de Campos, Av. Marechal Rondon, s/n, Jardim Rosa Elze – CEP: 49100-000 – São Cristóvão/SE, Brazil

Keywords: bean pod, pretreatment, Ultrasound, Catalytic pyrolysis, Bio-oil, Phenols.

Highlights

The pyrolysis was performed using K_3PO_4 as catalyst.

The pretreatment was carried out for 0.5 h.

K_3PO_4 showed influence on the pyrolysis phenols distribution.

The effect of the ultrasonic pretreatment was evaluated by monitoring of 13 phenolic in the bio-oil by GC/MS.

Resumo/Abstract

The use of agricultural waste as raw materials in thermochemical conversion processes, such as pyrolysis, to produce fuels and chemicals has been attracting attention. The development of technologies to facilitate its conversion is necessary in order to upgrade the yield or the profile of the products, making these processes economically viable. The use of ultrasonic pretreatment is promising because of its capacity to disorganize the biomass structure, making it more susceptible to thermo-conversion processes¹. The use of catalysts is a valuable tool in the optimization of the process, producing selectively chemicals of interest². In this context, the present work had as objective to evaluate the potential of the ultrasonic pretreatment in the phenolic-rich bio-oil production by cowpea bean pod pyrolysis using K_3PO_4 as catalyst. For the development of this work, the bean pods were washed with running water, dried in oven for 24 h at 60 °C, and then crushed in a knife mill, obtaining granulometry between 40 and 60 mesh. The pyrolysis was performed in triplicate, at 600 °C and a constant flow of nitrogen ($5 \text{ mL}\cdot\text{min}^{-1}$), using a mixture of 8 g of biomass and 2 g of K_3PO_4 . In the experiments in which the ultrasonic pretreatment was performed, was added to this mixture 100 mL of deionized water and the obtained suspension was subjected to 30 min of sonication, at a frequency of 40 kHz. After the treatment the suspension was lyophilized to eliminate the water and then pyrolyzed. The obtained bio-oils were analyzed by gas chromatography/mass spectrometry (GC/MS), and the pre-treatment effect was evaluated by the monitoring of 13 specific phenolic compounds present in the samples, identified and quantified by comparison with standards. From the chromatographic analysis of the bio-oils was verified that the ultrasonic pretreatment caused a considerable increase in the content of phenolic compounds, from 60.26 mg g^{-1} in the samples without pre-treatment to 78.14 mg g^{-1} in the samples submitted to the ultrasonic treatment, representing an increase of 29.67% in the concentration of the phenolics compounds monitored. One explanation for this increase is the fragmentation of the macromolecular structure of lignin under the action of the ultrasonic pretreatment, mainly by the homolytic cleavage of $\beta\text{-O-4}$ and $\alpha\text{-O-4}$ bonds between the forming units. During the pyrolysis process, these fragments decompose more easily into compounds of lower molecular weight, contributing to the increase of phenolic compounds in produced the bio-oil³. Thus, the ultrasonic pretreatment showed a positive effect on the selective production of a phenolic-rich bio-oil, resulting in a better-quality product and reducing costs with subsequent purification steps.

1. Cherpozat, L., Loranger, E., Daneault, C. *Journal of Analytical and Applied Pyrolysis* 126, 2017,31-38.

2. Zhang, Z., Lu, Q., Ye, X., Xiao, L., Dong, C., Liu, Y. *BioResources*, 4(3), 2014, 4050-4062.

3. Sul'man, E. M., Sul'man, M. G., Prutenskaya, E. A. *Catalysis in Industry*,3(1),2011, 28-33.

Agradecimentos/Acknowledgments

[CAPES, CNPQ, LAC, UFS].

Synthesis of Novel Polyfunctionalized Organoselenides Employing a Seleno-Containing Cyanohydrin as Starting Material

Juliana C. Thomas (PG),¹ Alfredo R. M. de Oliveira (PQ),¹ Leandro Piovan (PQ)^{1*}

lpiovan@quimica.ufpr.br ¹ Laboratório de Síntese Química e Enzimática - LaSQuE Department of Chemistry, Universidade Federal do Paraná - UFPR, Curitiba – Paraná – Brazil

Keywords: Organoselenides, Cyanohydrins, Polyfunctionalized Compounds, Antioxidant Activity

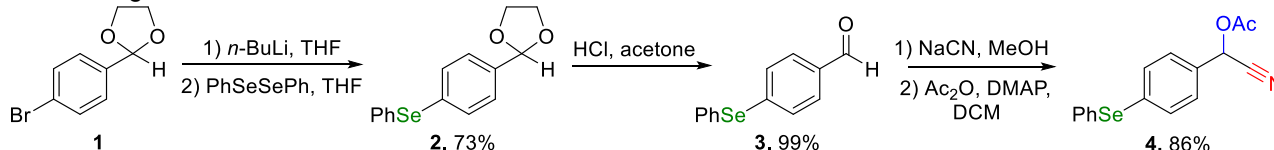
Highlights

Synthesis of a novel seleno-containing cyanohydrin; Synthesis of novel polyfunctionalized organoselenides; Evaluation of polyfunctionalized organoselenides as GPx mimics.

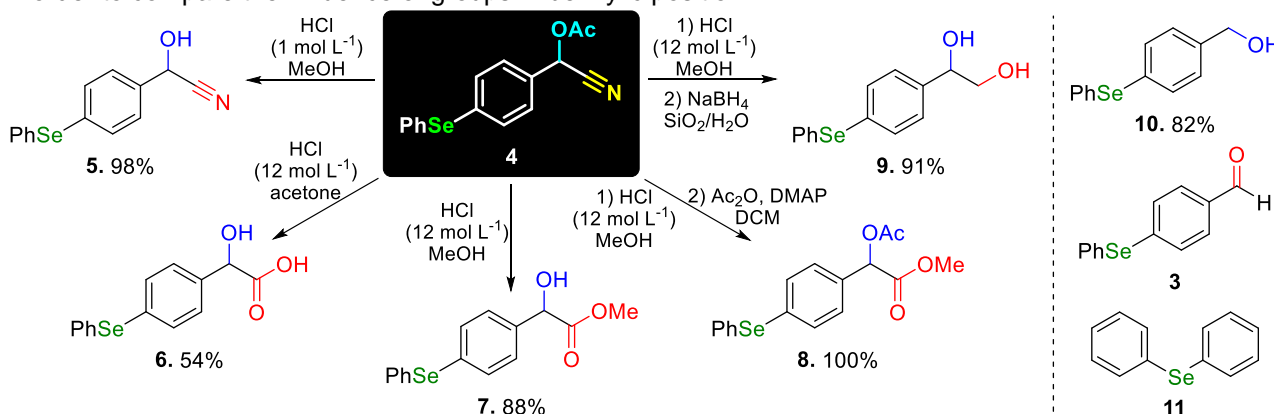
Abstract

Organoselenium compounds have been reported as biologically active substances, which present antioxidant, antitumor and antibacterial activities, among others.¹ Despite the known biological activity, some physicochemical properties of these compounds may not be appropriate to *in vivo* studies. In order to improve physicochemical properties (e.g. solubility in water) polar groups can be inserted in the structure, highlighting the synthesis of polyfunctionalized compounds.² In this context, the use of cyanohydrins as starting materials³ is a very interesting way to achieve polyfunctionalized compounds employing a simple material as a precursor. Herein we report the synthesis of a novel seleno-containing cyanohydrin and its transformation to several polyfunctionalized organoselenides and the evaluation of their antioxidant activity.

Seleno-containing cyanohydrin was synthesized from its corresponding aldehyde (**3**) upon simple methodologies and it was isolated as its acetate derivative **4**.



Compound **4** was then employed as starting material to organoselenides **5-9**, resulting in yield ranging from 54 up to 100% (Scheme 2). A benzyl alcohol derivative (**10**) was also prepared (via reduction of aldehyde **3**) in order to compare the influence of groups in benzylic position.



Compounds **3-11** were evaluated as GPx mimics, reacting the organoselenide with H₂O₂ and PhSH as cofactor.⁴ Unfortunately, all compounds presented similar activity as model compound **11**, indicating that the addition of polar groups in the structure did not contribute to increase biological activity.

Finally, an enzymatic kinetic resolution reaction of compound **4** in continuous-flow mode was performed,⁵ resulting in good enantioselectivity (results not shown), indicating that an optically active version of all organoselenides can also be prepared in the future.

Acknowledgments

LaSQuE, UFPR, CNPQ, CAPES, Fundação Araucária.

¹ Mugesh, G.; Mont, W. W.; Sies, H. *Chem. Rev.* **2001**, *101*, 2125-2179. ² Kamel, M. M.; Syam, Y. M. *Egypt Pharmaceut. J.* **2013**, *12*, 95-108. ³ Brunel, J. M.; Holmes, I. P. *Angew. Chem. Int. Ed.* **2004**, *43*, 2752-2778. ⁴ Nascimento, V. et al. *J. Am. Chem. Soc.* **2012**, *134*, 138-141. ⁵ Thomas, J. C.; Aggio, B. B.; Oliveira, A. R. M.; Piovan, L. *Eur. J. Org. Chem.* **2016**, 5964-5970.

Quantitative analyses of coumarine in *Mikania glomerata* Sprengel syrup using ^1H NMR

Vinícius Bertonecello Molon (IC),^{1*} Luana Conte Crocoli (PG),¹ Sidnei Moura e Silva (PQ).¹

vbmolon@ucs.br; luanaccrocoli@hotmail.com

¹Laboratory of Biotechnology of Natural and Synthetic Products - University of Caxias do Sul, RS, Brazil;

Palavras Chave: *Mikania glomerata*, coumarine, syrup, qNMR,.

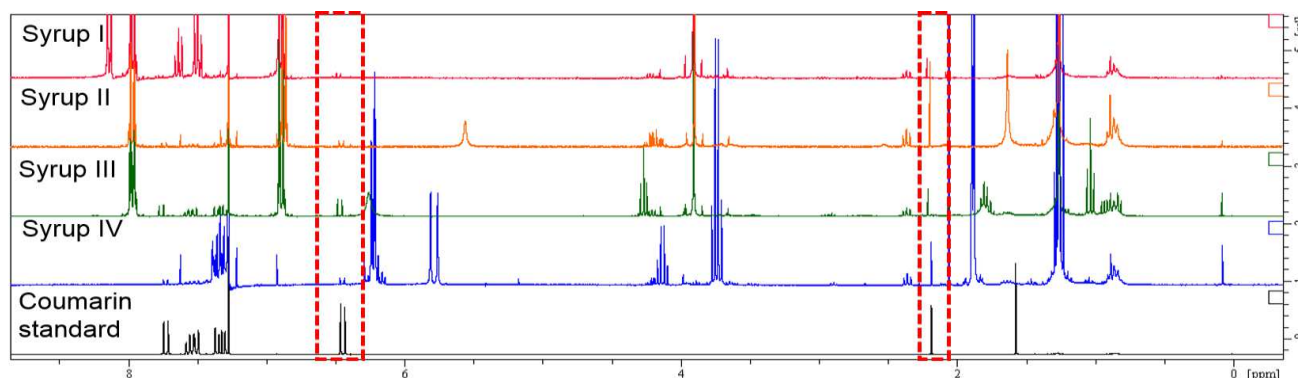
Highlights

Rapid and efficient method for extraction and quantification of coumarine in guaco syrup by NMR

Resumo/Abstract

Mikania glomerata Sprengel also known as guaco, is a native plant from South America utilized in popular medicine as a syrup for the treatment of pulmonar affections and other diseases due to their bronchodilators, antioxidants, antidiarrheal and antimicrobial effects. The coumarine (1,2-benzopyrone) is the principal metabolite of *Mikania glomerata* Sprengel and is defined as a chemical marker for the quality control of formulations based on guaco.¹ The qNMR is a simple, fast and non-destructive methodology that has been studied for the quality control of several foods, beverages, drugs and phytotherapy. Therefore, the objective of the present work is to develop a quantitative method by ^1H NMR for analysis of coumarine in guaco syrup. For this, syrups of different brands were purchased. Coumarin was extracted using 5 mL CHCl_3 (1:1), shaken manually for 1 min and centrifuged 2 min at 2000 rpm. After, the chloroform phase was separated, evaporated in a rotary evaporator and the product was resuspended with 600 μL of CDCl_3 . All analyzes were performed on a Fourier300 Bruker NMR equipment. Fortifications were carried out in the white samples in order to verify the effectiveness of the extraction method. To do this, solution of 1 mg mL^{-1} coumarin was prepared in ethanol and the samples were added at concentrations of 0.1, 0.5 and 1.5 mg mL^{-1} . The quantification was done through an analytical curve that was verified using solutions of 0.1 to 3.2 mg mL^{-1} . As can be observed in **Figure 1**, the method was efficient for extraction of coumarin and together with the analytical curve, which presented R^2 higher than 0.99, it was possible to quantify the target metabolite.

Figure 1- Comparison between the different syrups and the coumarin standard.



About the coumarin concentrations found, only syrup I had a concentration that differs from that shown by the manufacturer (50% higher). Thus it can be concluded that the method developed by qNMR can be used for quality control of guaco syrups.

References:

¹ K. E. Czelusniak, A. Brocco, D. F. Pereira and G. B. L. Freitas, *Rev. Bras. Plantas Med.*, 2012, **14**, 400–409.

Acknowledgments

UCS, CAPES, FAPERGS

Area: **EDU**Registration N^o: **00706**

Impact analysis of the "1000 Future Scientists" project developed in DQ/UFMG with students of public basic education in Minas Gerais

Janaina de Paula e Silva (TC)^{1*}, Wladimir Teodoro da Silva (TC)¹, Thales do Valle Moreira (TM)¹, Marley Alisson Perdigão de Assis (TC)¹, Rita de Cássia Oliveira Sebastião (PQ)¹

janainadepaulaesilva@gmail.com

¹Departamento de Química, Instituto de Ciências Exatas, Universidade Federal de Minas Gerais.

Key words: Extension, Chemistry education, Innovative education

Highlights

Impact analysis of an extension project using a quiz with 284 students, from which 75% had their first contact with a chemistry laboratory and 97% would like to come back for a new experience.

Resumo/Abstract

"1000 Future Scientists: Experiencing Science in laboratories of UFMG - Department of Chemistry " is an extension project created and developed by Administrative Technicians in Education (TAE) of Department of Chemistry (DQ) in the Federal University of Minas Gerais (UFMG). In this project, students of public basic education in Minas Gerais are received to perform an adapted practical experiment using the laboratories. Questionnaires are applied before and after the experiment, which is supervised by UFMG undergraduate and graduate students. The first questionnaire is provided before the students get in the laboratory and aims to verify their knowledge and expectation regarding to the experiment in a chemistry laboratory. The second questionnaire is applied after the experiment to evaluate if the expectation were contemplated and if the chemical content was assimilated. Together with this analysis, it is intended to evaluate the project impact on visitors, their demands, and the viability new editions of the project.

The questionnaires were answered by 284 students from five different public schools between October and December 2018. The results showed 75% of students had their first contact with a chemical laboratory during this experience and 97% would like to come back for a new practice, indicating the positive impact of the project. The experiment/experience words were mostly related to the chemist activity (present in 43% of the answers) and the experience within the laboratory was also emphasized (51% of the answers). These results corroborate the importance of practical activity for student chemical learning process. In addition, the project enables these students to access equipped chemical laboratories, which is, in some case, not possible. Moreover, it increases the usage of DQ infra-structure, improving the university and society relation. With this validated configuration, it is expected the project to impact 1000 students by November 2019, receiving, on average, two schools per month.

MANZATO, Antonio José; SANTOS, Adriana Barbosa. A elaboração de questionários na pesquisa quantitativa. **Departamento de Ciência de Computação e Estatística-IBILCE-UNESP**, p. 1-17, 2012.

TAMIR, P. O trabalho prático na ciência da escola: uma análise da prática atual. Belo Horizonte: CECIMIG. **Publicação para circulação interna**. Traduzido por Anderson FF Higino de TAMIR, PINCHAS. **Practical Work in school: na analysis of current pratic**, in WOOLBOUGH, BRIAN (ED), **Practical Science**. Milton Keynes: Open University Press, 1990.

Agradecimentos/Acknowledgments

Instituto de Ciências Exatas (ICEx); Departamento de Química (DQ); Laboratório de Ensaios Combustíveis (LEC); Programa de Pós-graduação em Química (PPGQ); Pro-Reitoria de Extensão – PAIE (Programa de Apoio Integrado a Eventos).

Bis-bases de Schiff como inibidores de corrosão em meio ácidoArthur Valbon (PG),¹ Claudio Eduardo Rodrigues-Santos (PQ),¹ Aurea Echevarria (PQ)¹

arthurvalbon@gmail.com; echevarr@ufrrj.br

¹Departamento de Química, UFRRJ;

Palavras Chave: bases de Schiff, química verde, impedância eletroquímica, polarização potenciodinâmica.

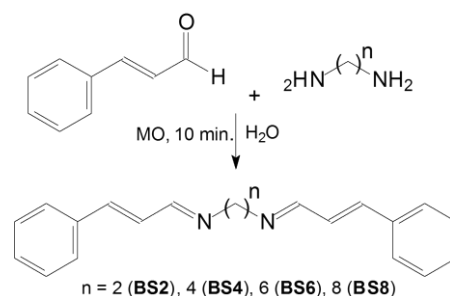
Highlights

Bis-Schiff-bases as corrosion inhibitors in acidic medium. The bis-Schiff bases were synthesized under microwave irradiation using water as the solvent and evaluated as corrosion inhibitors. All compounds showed good corrosion inhibition efficiency.

Resumo/Abstract

O aço-carbono é muito utilizado na indústria, devido ao seu baixo custo e aplicabilidade. Mas, este material é muito suscetível à corrosão. A maioria dos inibidores de corrosão são compostos orgânicos, contendo heteroátomos, ligações π e anéis aromáticos. Assim, as bases-de-Schiff podem apresentar possível efeito anticorrosivo e, com simplicidade sintética. Neste trabalho foram sintetizadas quatro bases-de-Schiff através de metodologia inovadora, sob irradiação de micro-ondas (10 minutos) utilizando água como solvente (Esquema 1).

As aminas utilizadas apresentam diferentes tamanhos de cadeia alquílica, o que influencia na lipofilicidade da molécula. As iminas foram testadas frente ao aço-carbono AISI 1020, em HCl 1 mol L⁻¹ em quatro concentrações diferentes. As eficiências de inibição da corrosão (concentração de 1x10⁻³ mol L⁻¹) obtidas por perda de massa (PM) e ensaios eletroquímicos de impedância (EIE), resistência de polarização linear (RPL), podem ser observados na Tabela 1.



Esquema 1.

Tabela 1: Ensaios eletroquímicos (Eletroq.) e de PM para BS2-8.

| 1x10 ⁻³ mol L ⁻¹ | Eletroq. (%) | | PM (%) | | |
|--|--------------|-----|--------|------|------|
| | EIE | RPL | 3 h | 24 h | 48 h |
| BS2 | 78 | 78 | 90 | 92 | 95 |
| BS4 | 95 | 95 | 97 | 97 | 97 |
| BS6 | 95 | 95 | 97 | 98 | 98 |
| BS8 | 97 | 97 | 97 | 98 | 98 |

Como observado na Tabela 1, o aumento da cadeia alquílica influenciou diretamente na eficiência de inibição da corrosão, sendo de 98% para o composto **BS8** na técnica de PM.

Tal comportamento pode ser atribuído ao aumento da cadeia lipofílica que, confere aos compostos maior caráter hidrofóbico e, assim repelem melhor as moléculas de água da superfície metálica, diminuindo a dupla camada elétrica e, conseqüentemente, o processo corrosivo. Os compostos também foram avaliados em diferentes temperaturas (30, 40, 50, 60 °C). Um aumento na energia de ativação (E_a) foi observado para todos os compostos em relação a ausência de inibidor (Branco). Os resultados são mostrados na Tabela 2.

Tabela 2: Ensaios de PM com variação de temperatura para BS2-8, durante 3 horas.

| 1x10 ⁻³ mol L ⁻¹ | Perda de Massa (%) | | | | E_a (kJ mol ⁻¹) |
|--|--------------------|-------|-------|-------|-------------------------------|
| | 30 °C | 40 °C | 50 °C | 60 °C | |
| Branco | - | - | - | - | 36 |
| BS2 | 90 | 90 | 89 | 87 | 42 |
| BS4 | 97 | 96 | 95 | 93 | 58 |
| BS6 | 97 | 97 | 95 | 93 | 58 |
| BS8 | 97 | 96 | 96 | 94 | 58 |

Concluindo, as bis-bases-de-Schiff, obtidas em água e sob micro-ondas, se apresentam como bons inibidores de corrosão frente ao aço-carbono em meio ácido.

Agradecimentos/Acknowledgments

Capes, CNPq, Faperj, Petrobras.

Synthesis and antibacterial activity of coumarin derivatives

Marciéli Fabris (PG),¹ Michel P. Batista (IC),¹ Jhonatan M. Ribeiro (PG),² Gerson Nakazato (PQ),² Marcelle L. F. Bispo (PQ).^{1*}

mfbispo@uel.br;

¹Departamento de Química, Universidade Estadual de Londrina; ²Departamento de Microbiologia, Universidade Estadual de Londrina.

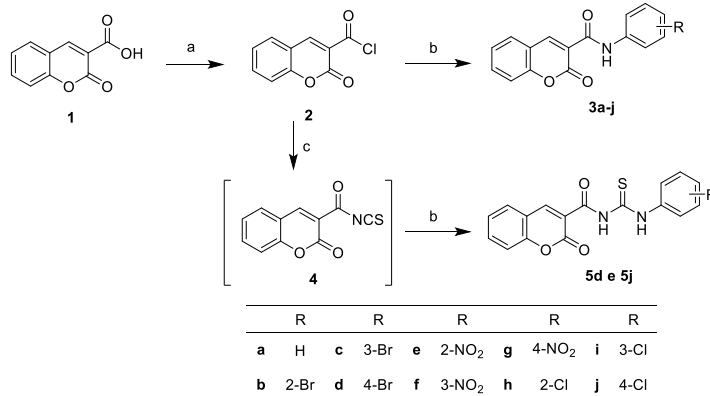
Palavras Chave: Coumarins, thiourea, amides, antibacterial activity

Highlights

Coumarins are considered as privileged structures in drug discovery. This scaffold possesses a wide range of biological activities including, antiviral, anticancer, anti-inflammatory, antioxidant and antimicrobial. Two series of thiourea and amide derivatives containing the coumarin ring were synthesized and evaluated against some pathogenic bacteria that cause healthcare-associated infections, which are responsible for millions of deaths around the world.

Resumo/Abstract

The synthetic route for preparation of amides and thiourea derivatives begins with the obtention of coumarin-3-carboxylic acid **1**. This compound was achieved in high yield (92%) by reacting salicylaldehyde with Meldrum's acid using water as the solvent. Therefore, this acid was converted in situ in its respective acyl chloride **2** through the reaction with SOCl₂ under reflux. After 2h30, the corresponding amine **a-j** was added to reactional media in acetone. After 1h under reflux, the amides derivatives **3a-j** were precipitated on the ice and washed with cold water and ether. They were obtained in moderate to high yields (75-92%) and were characterized by spectroscopic methods (GC-MS and NMR). For the preparation of thiourea derivative, the acyl chloride was reacted with NH₄SCN in acetone under reflux for 15 or 30 minutes to produce in situ an isothiocyanate intermediate (**4**). After that, the corresponding amine was added to reactional media that remains under reflux for 15 min to 4h. Until this moment, 2 derivatives were obtained in 10 and 72% yields. They were also characterized by spectroscopic methods (GC-MS and NMR).



Reagents and conditions: a) SOCl₂ (20 eq), reflux, 2h30; b) Corresponding aniline (1,0 eq, a-j), acetone, reflux, 15 min to 4h, c) NH₄SCN, acetone, reflux, 15 to 30 min.

Staphylococcus aureus ATCC 25923, *Staphylococcus epidermidis* ATCC 12228, *Escherichia coli* ATCC 8739 and *Pseudomonas aeruginosa* ATCC 25969 were included in this study. The inhibitory activity of the coumarins derivatives on growth of all bacteria was determined by broth microdilution assays according to the Clinical and Laboratory Standards Institute guidelines. Until this moment, only the compound **1** was evaluated. Against the first three strains tested, the MIC was 1000 µg mL⁻¹ and for the fourth strain it was greater than 1000 µg mL⁻¹. The evaluation of **3a-j** and **5d** and **5j** are in progress.

Agradecimentos/Acknowledgments

The authors would like to thanks to Nuclear Magnetic Resonance Laboratory – RMN UEL/FINEP for the NMR experiments.

Proposição lúdica como atividade avaliativa do tema funções orgânicas

Rodrigo Alves de Souza (FM)^{1*}, Ana Beatriz Silva Velloso (IC)²

rodralves@gmail.com

¹Secretaria da Educação do Estado de São Paulo, Araraquara/SP; ²Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia de São Paulo – IFSP, campus Matão/SP.

Palavras-Chave: Lúdico, Funções orgânicas, Avaliação.

Highlights

Ludic proposition as an evaluative activity of the theme organic functions

Elaboration and application of evaluation about organic functions, involving ludic activity, to high school concluding year students from Araraquara, SP, Brazil.

Resumo/Abstract

Vigotski¹ considera as interações fundamentais para a aprendizagem, apontando a transição do conhecimento do plano social ao individual. Neste sentido, o lúdico pode proporcionar, inclusive, a mediação dos saberes dos mais sábios aos menos².

Para mensurar o processo de aprendizagem, não há receita, pois múltiplos fatores devem ser considerados. Segundo Luckesi³, avaliações devem buscar a transformação do educando para o seu crescimento, balizando novos direcionamentos pedagógicos dos envolvidos.

Na perspectiva sociocultural, este trabalho trata, portanto, de uma atividade avaliativa lúdica sobre funções orgânicas, com 28 concluintes do Ensino Médio (sete grupos), de uma escola pública estadual do Ensino Integral de Araraquara/SP.

Foram utilizadas tampas de refrigerantes, representando elementos, e tiras de papel-cartão (ligações químicas), em aula dupla dividida em quatro fases: 1 e 2 → questões do professor sobre nomes e estruturas; 3 e 4 → as mesmas indicações a partir de estruturas montadas pelos próprios grupos, sendo respondidas entre eles (figura 1).

A atividade correspondeu a 20% da nota bimestral, antecedendo outras formas avaliativas que também incluíram este conteúdo. Percebeu-se, durante a aplicação, considerável engajamento dos estudantes e permuta dos conhecimentos sob o pressuposto de Vigotski. Vinte alunos obtiveram notas entre 5,0 e 6,5 (escore de 0 até 10).

Questionados sobre a aplicação (26 alunos), 84,6% deles acharam a proposta ótima ou muito boa e 92,3% concordaram que ação semelhante poderia ser desenvolvida para outros conteúdos de Química, indicando que esta foi altamente divertida, desafiadora e envolvente, para eles.



Referências/References

¹ VIGOTSKI, L. S. **A formação social da mente: o desenvolvimento dos processos psicológicos superiores**, São Paulo: Martins Fontes, 2007. 224 p.

² VIGOTSKI, L. S.; LURIA, A. R.; LEONTIEV, A. N. **Linguagem, desenvolvimento e aprendizagem**, 16 ed., São Paulo: Ícone, 2018. 228 p.

³ LUCKESI, C. **Avaliação da aprendizagem escolar: componente do ato pedagógico**, São Paulo: Cortez, 2011. 448 p.

42ª Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química: Eixos Mobilizadores em Química

Synthetic Study toward a new hybrid with potential antimalarial activity

Carla C. Perez (PQ),¹ Alexandre Orsato (PQ),¹ Felipe R. Benati (PG)¹.

perezcc@uel.br

¹ Centro de Ciências Exatas, Departamento de Química, UEL;

Palavras Chave: Malaria, Silicon tether, Lapachol, Quinazoline, Molecular hybrid, Antimalarials.

Highlights

Malaria is a disease that although old still plagues many tropical countries. In 2017, about 219 million cases were registered with 435 thousand deaths worldwide. Resistance against antimalarials have been increasing and have been reported for artemisinin-based combination therapies, first-line treatment for malaria. The search for new antimalarial agents is therefore important. Lapachol and febrifugine are substances with antimalarial activity with potential for the development of new antimalarials. In this work, we propose the synthesis of a hybrid formed by lapachol and 4-hydroxyquinazoline, a pharmacophoric group of febrifugine, that will be connected by a silicon tether. To date, successful substitutions reactions with 4-hydroxyquinazolines and lapachol has been carried in good yields (30% and 25% yields to two steps respectively). To complete the hybrid synthesis we will be bonding both of fragments to the dimethylsilane by one pot reaction.

Resumo/Abstract

Malaria is an infectious disease caused by protozoa of the genus *Plasmodium*, which are transmitted to humans through female mosquitoes of the genus *Anopheles*. In 2017, 219 million cases were registered worldwide (435,000 deaths).¹ The WHO recommends the administration of drugs in the form of combination therapies, in order to reduce the risk of parasites gaining resistance. An alternative to combination therapy is the use of hybrid drugs, which can combine two or more drugs or pharmacophore groups into a single compound. Besides of the synergism, the hybrids utilization still decreases the risk of interaction between drugs.² In this context, the objective of this work is a preparation of a hybrid (**3**) containing lapachol (a naphthoquinone that despite low activity, was starting point to development of atovaquona, a commercial drug) and a pharmacophore group of febrifugine (molecule that even though having a satisfactory antiparasitic effect, has been presenting significant toxicity) with a silicon linker between them. To obtain the desired hybrid, it was added the lapachol **1** to the previously prepared electrophile **4** providing the unpublished intermediate **5** in 11% yield (2 steps). In the same way, the compound **7** was prepared in 27% yield (2 steps). By bidimensional NMR, HSQC and HMBC techniques, it was confirmed the inlet position of the spacers in both products **5** and **7**. To complete the synthesis of **3** we will be bonding both of fragments to the dimethylsilane by one pot reaction.

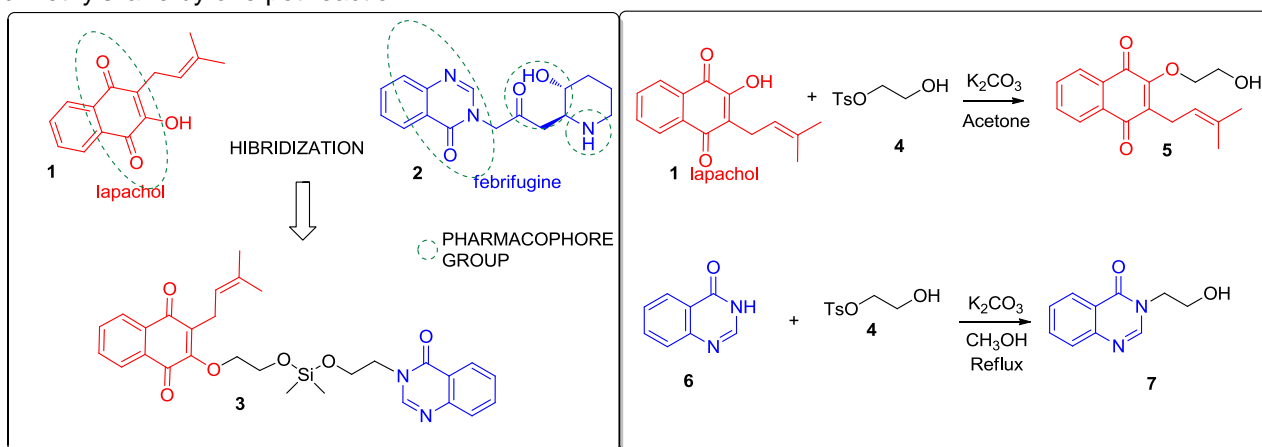


Figure 1: Hybrid proposed in this work.

Figure 2: Synthesis of compound 5 and 7.

¹ WORLD HEALTH ORGANIZATION. World malaria report 2018. < <https://www.who.int/malaria/publications/world-malaria-report-2018/en/> >. Accessed in: november 23th, 2018.

² OLIVEIRA, R. et al. *Bioorg. Med. Chem.* **2015**, 23, 5120.

Desenvolvimento de método por CLAE-DAD para comparação do perfil químico de *Senna trachypus* H & B de cinco localidades do Ceará

Maria G. A. Franca (PG),^{1*} João F. S. Barros (IC),¹ Alberto J. Cavalheiro (PQ),² Maria G. V. Silva (PQ).¹
mariag50@live.com*

¹Departamento de Química Orgânica e Inorgânica, Laboratório de Produtos Naturais e Química Medicinal - UFC;

²Departamento de Química Orgânica - Instituto de Química – UNESP.

Palavras Chave: *Senna trachypus*, Variabilidade química, Quercetina, Fisciona.

Highlights

HPLC-DAD method development for comparison of fingerprinting de *Senna trachypus* H&B from five Ceará localities.

An HPLC-DAD method was developed in order to obtain a comprehensive chemical profile of *Senna* species. Variations in rutin, quercetin, apigenin and physcion relative amounts were discussed.

Resumo/Abstract

O gênero *Senna* Mill. tem ampla distribuição no Brasil e apresenta composição química rica em compostos fenólicos, flavonoides, antraquinonas, alcaloides, entre outros. Para realizar comparação sistemática e abrangente do perfil químico em espécies desse gênero, um método analítico foi desenvolvido e validado em CLAE-DAD no modo reverso (C18). A estratégia diferencial utilizada foi a preparação de uma mistura de extratos de vários órgãos e de várias espécies de *Senna*. Os parâmetros cromatográficos avaliados incluíram composição (solvente e % de ácido fórmico), vazão da fase móvel, tempo de gradiente, temperatura da coluna e escolha de padrão interno. Condições para preparação das amostras também foram estudadas. Para exemplificar o uso e importância desse método, comparou-se o perfil químico dos extratos metanólicos (folhas, flores, frutos e galhos) de 5 espécimes de *Senna trachypus*. As amostras foram coletadas em maio de 2017, em cinco diferentes localidades do Ceará. A variação intraespecífica dos componentes químicos nas amostras de *S. trachypus*, identificada nos cromatogramas obtidos, foi significativa, como pode ser observado na comparação dos teores relativos de rutina, quercetina, apigenina e fisciona entre órgãos e entre indivíduos (figura 1). Esta variação pode ser atribuída a diferentes condições edafo-climáticas, pois as localidades de coletas têm diferenças de temperatura, altitude, índices pluviométricos e tipo de solo. Estes dados justificam a continuidade do estudo, que envolverá o estudo químico de populações desta e de outras espécies de *Senna*.

Os autores agradecem ao CNPq, CAPES e FAPESP.

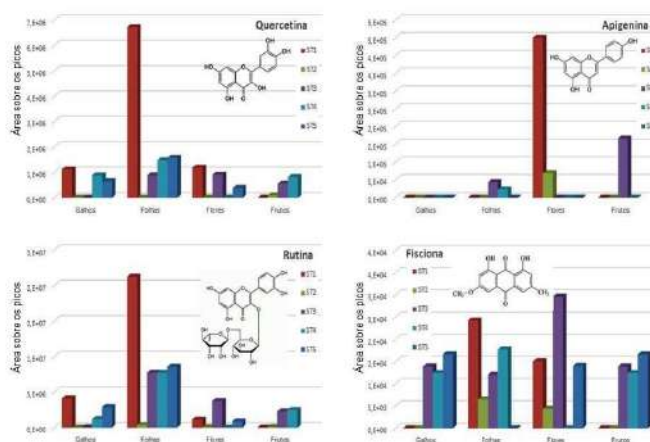


Figura 1. Comparação do teor relativo (CLAE-DAD) de fenólicos representativos em extratos metanólicos de órgãos de *Senna trachypus* amostradas em cinco localidades diferentes do estado do Ceará. ST1- Crateús; ST2- Serra das Almas; ST3- Tianguá; ST4- Senador Sá; ST5- Caucaia.

Área: ANA*(Inserir a sigla da seção científica para qual o resumo será submetido. Ex: ORG, BEA, CAT)***Nº de Inscrição: 00713***(Inserir o número de inscrição do autor que fez a submissão)*

Spot test baseado em imagens digitais explorando extração líquido-líquido para a determinação de Ca e Mg em biodiesel

^{1,2}Gabriel Martins Fernandes (IC), ¹Samara Soares* (PG), ²Alex Domingues Batista (PQ), ¹Fábio R. P. Rocha (PQ).

gabriel.fernandes@ufu.br

¹Centro de Energia Nuclear na Agricultura, Universidade de São Paulo; ²Instituto de Química, Universidade Federal de Uberlândia

Palavras chave: Spot test, Biodiesel, Smartphone, Fotometria,

Highlights

Spot test pioneiro para a determinação de cálcio e magnésio em biodiesel. Extração líquido-líquido utilizando água como extrator. Imagens digitais obtidas com a câmera de um telefone celular.

Resumo/Abstract

O biodiesel é proveniente de fontes renováveis, como óleo vegetal e gordura animal. Usualmente, é produzido pela reação de transesterificação, na presença de um álcool de cadeia curta e de um catalisador. Atualmente o diesel é comercializado com uma mistura de 10% (v/v) de biodiesel. Diante disso, é essencial o controle de qualidade do biodiesel, sendo necessários procedimentos simples e rápidos para este propósito. Dentre os parâmetros de qualidade, estão as concentrações de cálcio e magnésio, que são provenientes do catalisador utilizado no processo de produção do biocombustível. De acordo com a EN 14214, a soma das concentrações de cálcio e magnésio não deve exceder 5 mg·kg⁻¹ para minimizar riscos de entupimento dos bicos injetores e do filtro do motor. O método oficial é baseado em espectrometria de emissão óptica em plasma acoplado indutivamente. Esse método é bastante sensível e robusto, porém requer pré-tratamento da amostra e equipamento de custo relativamente alto. Diante disso, o presente trabalho tem como objetivo desenvolver um procedimento baseado em *spot test* e imagens digitais, que seja simples e consuma pequenas quantidades de reagentes. A medida analítica foi baseada na descoloração de uma solução etanólica de negro de eriocromo T, ocasionado pela formação de complexos com cálcio e/ou magnésio. A resposta analítica foi baseada na radiação refletida e as imagens digitais foram obtidas utilizando a câmera de um telefone celular e o aplicativo PhotoMetrix[®]1.1.1 para conversão das imagens em valores de RGB. Os valores do canal R foram empregados como sinal analítico, considerando a complementariedade com a cor da solução alcalina de eriocromo preparada em etanol. Para a extração dos analitos, os tubos foram agitados por 20 min em um vortex. O procedimento foi conduzido em tubos tipo eppendorf, nos quais as medidas fotométricas foram diretamente realizadas em condições de iluminação controlada. Respostas lineares foram obtidas entre 62 e 250 µmol L⁻¹ de cálcio e magnésio, descritas pelas equações: $R = 40 + 0,22C$ ($r = 0,986$) e $R = 24 \pm 0,27C$ ($r = 0,993$), respectivamente. O coeficiente de variação ($n = 10$) e limite de detecção para cálcio e magnésio (nível de confiança de 95%) foram estimados em 7,7% e 20 µmol L⁻¹. O spot test permite a determinação independente dos analitos com base em medidas em diferentes concentrações de hidróxido de sódio. O procedimento proposto requer somente 50 µL da solução de referência ou extrato, 400 µL de etanol, 7 µg de negro de eriocromo e 35 µg de hidróxido de sódio. Os resultados obtidos foram concordantes com o procedimento de referência, demonstrando que a proposta apresentada é uma alternativa simples, rápida e de baixo custo ao método oficial.

Agradecimentos/Acknowledgments

FAPESP (processo 2018/07687-5), CNPq e CAPES.

Área: ANA

Nº de Inscrição: 00714

Manganese fractionation in black tea infusions by square-wave voltammetry

Aline C. Elias (PG),¹ Silvia V. F. Castro (PG)¹, Eduardo M. Richter (PQ)¹, Raquel M. F. Sousa (PQ)¹ Rodrigo A. A. Munoz (PQ)¹, Sidnei G. Silva(PQ)¹

allinne-carvalho@hotmail.com

¹Federal University of Uberlândia, Chemistry Institute, Uberlândia, Minas Gerais, Brazil, 38408-100

Palavras Chave: Black tea, Fractionation, Manganese

Highlights

“Direct manganese fractionation in tea samples” “Voltammetric determination of free and total manganese in black tea” “Determination free manganese in tea samples by cathodic stripping voltammetry”

Resumo/Abstract

Medicinal properties of tea infusions have been reported in the literature, and can be attributed to the presence of flavonoids, especially catechins¹. In addition, infusions prepared through from *Camellia sinensis* leaves are also a source of mineral nutrients and some of these compounds are classified as essential element such as manganese². However, manganese is the only element found in significant dietary amounts in tea, found in black tea in concentrations up to 4 mg L⁻¹. Although manganese is classified as an essential element, elevated metal intake has been associated with a neurological disease. In some cases, metals could be complexed with organic compounds and in this case, contributes to making it more bioavailable. Studies presented in the literature report that the absorption of metal complexed (M-O) by organism is greater than the absorption of free metal (M-L)³. This work presents the development of a procedure for manganese fractionation black tea infusions by cathodic redissolution voltammetry. Glassy carbon electrode was used as work electrode in acetic acid/acetate buffer (pH = 4.5). The voltammetric characterization was performed from -1.0 to 1.5V for the electrochemical profile of manganese. The following conditions were used to determine the analyte: deposition potential of + 1.2V for 90s, conditioning potential of -0.5V for 30s, amplitude of 100mV, frequency of 60Hz, step of deposition of 2mV. A linear response range (10 - 250 µg L⁻¹), repeatability with 9.7% standard deviation was obtained in the optimized condition. The LD was estimated as 0.06 µg L⁻¹ (99.7% confidence level). Free manganese was determined directly in tea infusions after simple dilution. For total manganese determination, the samples were submitted in a heating digestion (HNO₃ and H₂O₂, (4:1)) prior the measurements. Three black tea infusion samples were analyzed by the proposed procedure for free and total manganese determination and alternatively, a cloud point procedure was employed to compare the results. In these samples, free manganese concentration 1.09 (104%); 0.92 (92%); and 0.93 mg L⁻¹ (98%) and total manganese were 3.28 (96%); 3.05 (93%); and 2.43 mg L⁻¹ (91%).

¹ Matsubara, S.; Rodriguiz-Amaya, D. B. Teores de catequinas e teaflavinas em chás comercializados no Brasil. **Ciência e Tecnologia de Alimentos**, v. 26, n. 2, p. 401–407, 2006.

² Yalçin, S.; Filik, H.; Apak, R. Speciation analysis of manganese in tea samples using flame atomic absorption spectrometry after cloud point extraction. **Journal of Analytical Chemistry**, v. 67, n. 1, p. 47–55, 2012.

³ Naradi, E.P., Evangelista, F.S., Tormen, L., Saintpierre, T.D., Curtius, A.J., Souza, S.S., Barbosa, J.R., The use of inductively coupled plasma mass spectrometry (ICP-MS) for the determination of toxic and essential elements in different types of food samples. **Food Chemistry**, 112, p. 727 – 732, 2009

Agradecimentos/Acknowledgments

[CNPq, CAPES and FAPEMIG]

Área: AMB

Nº de Inscrição: 00715

A new and simple visual technique based on passive sampler and reaction with formation of dye for determination of H₂S in ambient air

Marcus A.S. Catai(IC)*, Arnaldo A. Cardoso(PQ)¹, Carolina G. Rocha (PG)¹.

marcuscatai@gmail.com; acardoso@iq.unesp.br

¹Departamento de Química Analítica, Instituto de Química, UNESP, Araraquara-SP, Brasil

Palavras Chave: Amostrador-passivo, Ácido sulfídrico, Reação colorimétrica.

Highlights

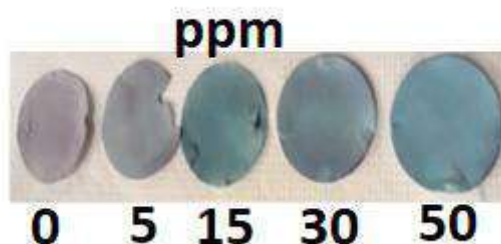
A new effective and simple technique based on passive sampler is presented for the determination of ambient H₂S concentrations using a visual procedure. It does not require an energy source, and no sample treatment is necessary post-sampling, so that the H₂S concentration can be known immediately, in situ, at the end of the sampling period.

Resumo/Abstract

O H₂S é um gás, tóxico e corrosivo e odor desagradável. De acordo com a Segurança Ocupacional e Administração Saudável dos EUA (OSHA), o limite de exposição permissível (durante 8 horas) é de 10 ppm. Concentrações de 20 ppm são o limite para problemas críticos de saúde. Em ambientes de trabalho a exposição humana ao H₂S, pode ocorrer durante a extração de petróleo e por trabalhadores no interior de galerias subterrâneas de cidades. A determinação previa de H₂S é importante sob o ponto de vista da higiene ocupacional. Um procedimento interessante, para fazer isso de maneira simples, utilizando equipamento portátil, de baixo custo e de fácil manuseio é a utilização de amostrador passivo.

Foi montado um amostrador passivo com a a superfície coletora (filtro de celulose) impregnada com suspensão básica de hidróxido de zinco. O H₂S é coletado na forma de sulfeto de zinco sobre o filtro de celulose. A superfície do filtro é tratada posteriormente com solução ácida de N,N-dimetil-p-fenildiamina (N,N) e cloreto férrico. O produto dessa reação é um composto de cor azul e é conhecido com nome comercial de azul de metileno.

A intensidade de cor formada é proporcional à concentração média do analito (H₂S) presente durante o período de amostragem (Fig 1). A determinação do H₂S pode ser feita diretamente por comparação visual ou mesmo por digitalização da imagem obtida. Neste caso pode-se usar uma câmara fotográfica simples embutida em celular e utilização de software Digital Image-Based (DIB). Como vantagem o método não requer fonte de energia e a reação química feita no filtro amostrado pode ser feita no local da amostragem. A concentração de H₂S pode ser conhecida imediatamente, in situ, no final do período de amostragem



Agradecimentos/Acknowledgments

Trabalho foi financiado pela FAPESP 15/23265-5

Activation energy of the light driven glycerol electrooxidation reaction on CdS photoanodes

Cristian Hessel (PG),^{1*} Marcos A. S. A. Junior (PG),¹ Nickson Perini (PG),¹ Elton Sitta (PQ).¹

hessel.cristian@gmail.com

¹Departamento de Química, UFSCar São Carlos - SP.

Palavras Chave: Glycerol, Photoelectrochemical cell, Cadmium sulfide, Photo-electrooxidation.

Highlights

- CdS thin film-based photoanode for alcohol photo-electrooxidation;
- Residual glycerol as an alternative anodic reaction for PECs;
- Kinetic study of glycerol photo-electrooxidation.

Abstract

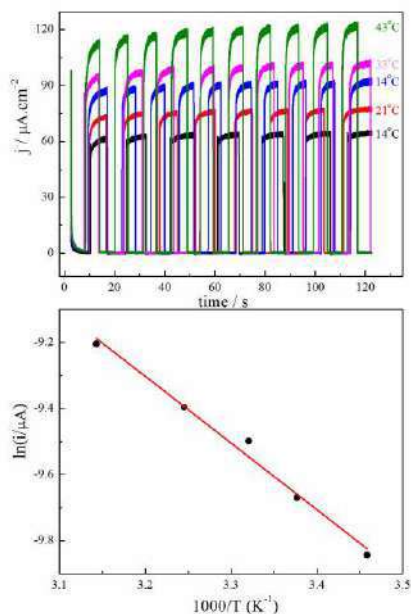


Figure 1: a) Chronoamperometric curves taken at 0.6 V_{RHE} in an On-Off 100 mW cm⁻² light irradiation; b) Arrhenius plot in the temperature range of 14-43°C.

In the last decades, the rapid growth in the world energy demand has led to a series of critical environmental issues, and as a consequence, in a need to develop new sustainable clean energy sources. As an alternative, photoelectrochemical H₂ production from water is one of the most promising approach to overcome the emission of greenhouse gasses from the abusive use of fossil fuels. CdS, cadmium sulfide, is one of the most important chalcogenides applied to water splitting, which has a band gap of 2.4 eV that suits very well with the solar spectrum. However individual CdS photocatalytic activity for the water splitting is not so efficient due to the fast charge carrier recombination.* Moreover, CdS possesses a strong reduction ability for H⁺ to H₂, which still makes this material interesting as a cocatalyst with another materials for water splitting. Unfortunately, the use of water as electron source (oxygen evolution reaction) is diffculted due to high overpotential and sluggish kinetic. Thereby organic molecules, as glycerol, oxidation appears as an alternative anodic reaction once it has high power density, renewability and low cost. Also, here in Brazil we have an enormous production of residual glycerol from biodiesel industry. With all, in this work we focused in the glycerol electrooxidation reaction(GEOR) catalyzed by FTO/CdS under visible light irradiation and from 14 to 43°C temperature range. The CdS film was deposited by chemical bath deposition using cadmium sulfate and thiourea solutions, and characterized by Raman spectroscopy and SEM. The system was set up using the 3 electrodes configuration, with reversible hydrogen electrode, a platinum plate and

the FTO/CdS as reference, counter and working electrodes, respectively. The measurements were performed in KOH 0.1 mol L⁻¹ and glycerol 1.0 mol L⁻¹ under 100 mW cm⁻² light irradiation. Cyclic voltammetry has shown a shift in the anodic process onset, from 0.55 V_{RHE} to 0.35 V_{RHE}, when adding 1.0 mol L⁻¹ glycerol. On/Off irradiation curves (Figure 1) at 0.6 V revealed the maximum photocurrent of ca 120 μA cm⁻² at 0.6 V and 43 °C. The oxidation currents were stable during 120 s, and no current was observed in the dark. Also, the higher temperature the higher photocurrent, following the Arrhenius equation and resulting in an apparent activation energy (E_a) of 16.8 kJ mol⁻¹. This low E_a value suggests that the photo-GEOR has an associative adsorption or surface diffusion step as the RDS. Moreover, this value agrees with the E_a reported for GEOR in Pt.**

* CHEN, W. et al. Appl. Surf. Sci. 444 (2018) 485–490.

** HOLM, T. et al. Electrochim. Acta 222 (2016) 1792-1799.

Acknowledgments

The authors thank to FAPESP (2013/07296-2) and CNPq (430426/2018) for financial support. C.H. thanks to CAPES and M.A.S.A.J (2017/15144-9). and N.P. thank to FAPESP for scholarships

Área: HIS

Nº de Inscrição: 00717

Scientific glassblowing in Brazil: an historical record.

Wladmir Teodoro da Silva*(TM)¹, Carlos A.L. Filgueiras(PQ)¹.

wladmirt@hotmail.com; calfilgueiras@gmail.com

¹ Departamento de Química, Instituto de Ciências Exatas, Universidade Federal de Minas Gerais.

Keywords: Scientific Glassblowing, Glass, History of Science, Innovation.

Highlights

Validation of research methodology for a mapping of scientific glassblowing in Brazil and the production of an historical record by means of the application of a questionnaire and its analysis.

Abstract

Glassblowing is the field of activity that deals with the development of different types of research glassware, with a direct influence on the course of research. Scientific expertise gave glassblowing conditions to innovate in a systematic way in the development of glass instruments that led to scientific discoveries and the widening of human knowledge. Glassblowing began in Brazil in 1637 with the Dutch settlers in the northeast of the country. Count Johann Maurits of Nassau brought to Recife four glassblowers, who installed the first glass shop in Brazil. In 1812 the Royal Glass Factory was opened in Bahia as the first of its kind in Brazil, in which glass was produced manually for windows, cups, beakers, vases and other vessels. Glassblowing activity in Brazil expanded, becoming relevant in several areas, such as in the arts, civil construction, food vessels, scientific glassware used in teaching activities, research and development. The first official record of a glassblowing laboratory attached to a research center, however, dates only from the 1960's at the Universidade Federal da Paraíba. Nevertheless, as glassblowing had been performed elsewhere much earlier, it is believed that this activity was practiced widely in other research centers in the country. As a hint to this assertion, the medical school of Bahia dates from 1808 and modern universities in their present form date from the 1920's. After some 380 years after the inception of glassblowing in Brazil, only a few research centers in the country maintain this activity. Moreover there is neither a comprehensive record nor any mapping of this activity and its contributions to science and technology. The present work aims to search for a method that will allow to fill those gaps, using a questionnaire, followed by its analysis. Thus it is hoped to be possible to establish an historical record of the activity as well as the identification of the research institutions which conduct such activity, with the number of professionals in the area, how this came about, and the future perspectives for the area in different institutions. The sequence used here in order to establish the questionnaire was centered on the definition of the themes, the formulation of the questions and their order, and the application of pre-tests for possible corrections.

Agradecimentos/Acknowledgments

Universidade Federal de Minas Gerais (UFMG), Instituto de Ciências Exatas (ICEx), Departamento de Química (DQ), Programa de Pós-graduação em Inovação Tecnológica e Propriedade Intelectual, Laboratório de Hialotecnica do DQ,

The Dimroth rearrangement in synthesis of 1*H*-1,2,3-triazole and 2*H*-1,2,3-triazole derivatives

Thais de B. da Silva (PG),¹ Kathya N. K. Ji (IC),¹ Luana da S. M. Forezi (PQ),¹ Vinicius R. Campos (PQ),¹ Fernando de C. da Silva (PQ),¹ Vitor F. Ferreira (PQ).^{2*}

thaisbrito@id.uff.br; vitorferreira@id.uff.br

¹Departamento de Química Orgânica, UFF; ²Departamento de Tecnologia Farmacêutica, UFF

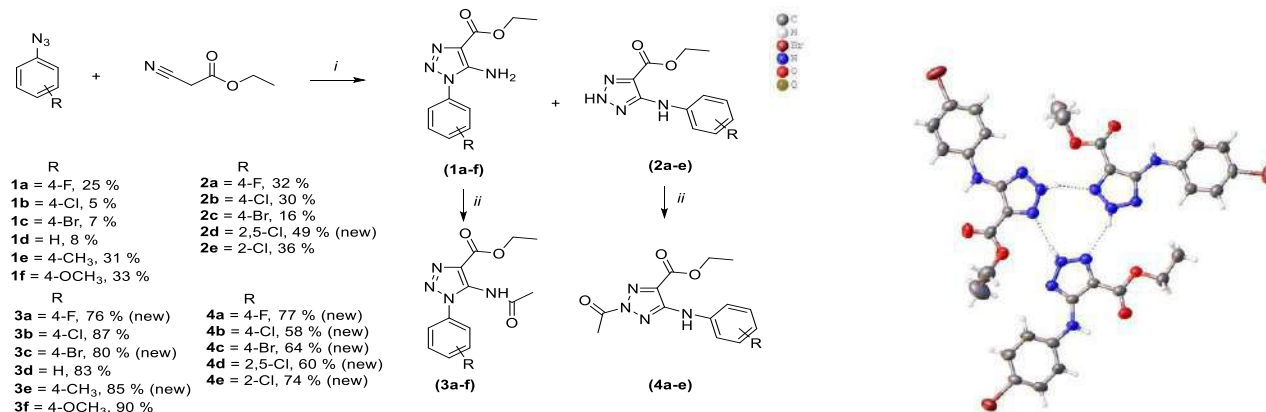
Keywords: Dimroth rearrangement, 2*H*-1,2,3-Triazole, 1*H*-1,2,3-Triazole

Highlights

This work describes a synthesis of twenty two 1,2,3-triazole derivatives. Some of these triazoles were obtained by Dimroth rearrangement during the reaction of arylazides with ethyl cyanoacetate.

Resumo/Abstract

The Dimroth rearrangement is known since 1909 and it is prevalent in 1,2,3-triazoles when endocyclic and exocyclic nitrogen atoms switch place. In this work this rearrangement was studied in a reaction to obtain ethyl 5-amino-1*H*-triazole-4-carboxylates (**1a-f**) and ethyl 5-(phenylamino)-2*H*-1,2,3-triazole-4-carboxylates (**2a-e**), from the reaction between phenylazides and ethyl cyanoacetate in the presence of sodium ethoxide under reflux for 3 hours.^{1,2} The derivatives (**2a-e**) were formed by Dimroth rearrangement. The derivatives (**1a-f**) e (**2a-e**) have the same melting point and the same molecular weight, but different H¹ and C¹³ NMR spectra. In order to elucidate the chemical structures of the derivatives (**2a-e**) X-ray crystallography of derivative **2c** was performed and then the chemical structure of these derivatives could be confirmed proving that it was consistent with the mechanism of the reaction. Then the derivatives (**1a-f**) e (**2a-e**) were reacted with acetic anhydride, pyridine and DMAP as the catalyst at room temperature for 24 hours to further insight into the structure



i) EtOH/EtONa, reflux, 3 h; ii) acetic anhydrid, pyridine, DMAP, 24 h, r.t

References

- 1- Hoover, J. R. E.; Day, A. R., *J. Am. Chem. Soc.* **1956**, *78*, 5832.
- 2- Ferrini, S. et al., *J. Org. Chem.*, **2015**, *80*, 2562-2572.

Agradecimentos/Acknowledgments

CAPES, CNPq, FAPERJ and FIOCRUZ.

Bifuncionalização seletiva de óxido de grafeno para mimetização de nanoenzimas: modificação de grupos epóxis e carboxílicos.

Yane H. Santos (PG),¹ Aldo J. G. Zarbin (PQ),¹ Elisa S. Orth (PQ)^{1*}

yane.honorato@hotmail.com; elisaorth@gmail.com

¹Departamento de Química, UFPR

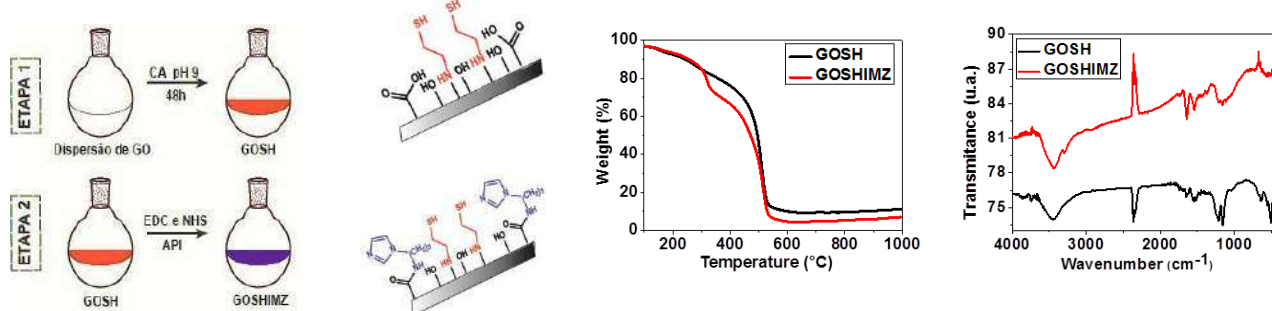
Palavras Chave: funcionalização covalente, óxido de grafeno, mimetização, enzimas, detoxificação, organofosforados

Highlights

- Funcionalização seletiva dos grupos oxigenados (epóxis e carboxílicos) do óxido de grafeno para formação de amins secundárias e amidas, visando mimetizar nanoenzimas com propriedades catalíticas promissoras.

Abstract

O desenvolvimento de nanomateriais que possuem funções amplas e aplicações direcionadas é cada vez mais emergente. Dentre os nanomateriais, existe o óxido de grafeno (GO) que além de suas excelentes propriedades eletrônicas, possuem diferentes grupos oxigenados na superfície de sua estrutura, como carboxílicos, álcoois e epóxis. Estes grupos podem ser funcionalizados formando ligações covalentes com diferentes compostos, gerando materiais com potencial para aplicação nanoenzimática.¹ Entretanto existem desafios em realizar a funcionalização destes grupos de forma controlada e seletiva, pois exigem que os parâmetros de sínteses sejam específicos e a identificação dos grupos funcionalizados eficientes.² Tratando-se de nanoenzimas, estudos promissores baseado no uso de nanomateriais para este fim mostram vantagens como maior estabilidade e melhor viabilidade de síntese quando comparado as enzimas naturais. Até o momento são reportados alguns nanomateriais de GO para aplicação catalítica, entretanto a combinação de grupos por meio de sínteses seletivas para modificar grupos oxigenados específicos ainda é desafiadora. Diante disto, o trabalho visa a bifuncionalização controlada do GO realizando abertura dos anéis epóxis com grupo cisteamina, formando amins secundárias e, em seguida, a funcionalização dos grupos carboxílicos com imidazol, formando amidas. A síntese foi realizada em duas etapas: para abertura dos anéis epóxis e funcionalização da cisteamina (CA) foi realizada em condições brandas variando o pH do meio, enquanto para funcionalização dos grupos carboxílicos com 1-(3-aminopropil) imidazol (API) foi realizada utilizando N-(3-dimetilaminopropil)-N'-etilcarbodiimida (EDC) e N-hidroxissuccinimida (NHS).



Os materiais foram caracterizados por análise termogravimétrica e FTIR, onde os primeiros resultados já indicam resultados promissores quanto à bifuncionalização. A análise termogravimétrica mostra que a perda de massa referente à funcionalização, em torno de 215 e 430 °C, presente em GOSH sugere a eficiência da síntese utilizada, assim como para o GOSHIMZ, já que ocorre um aumento da perda neste material. No FTIR é possível verificar bandas de amins secundárias nos espectros de GOSH em torno de 1000 cm^{-1} e para GOSHIMZ observam-se bandas de estiramento N-H e C=O de amida em 3290 e 1640 cm^{-1} . Portanto, trata-se de uma síntese inovadora para funcionalização de GO e da formação de material com propriedades adequadas para aplicação em sistemas catalíticos como nanoenzimas.

Reference

- ¹Hostert, L., Campos, R.B., Fonsaca, J.E.S. et al; Pure and Applied Chemistry (2018), 10, 1593.
²Kasprzak, A, Zuchowska, A., Poplawska, M.; Beilstein J. Org. Chem (2018), 14, 2018.

Agradecimentos/Acknowledgments

UFPR, CNPq, CAPES, L'Oréal-UNESCO-ABC, Fundação Araucária, INCT de Nanomateriais de Carbono.

Can covalent functionalization at nanocarbons always be a successful approach? Insights from polymeric nanocomposites

Naiane Naidek (PG),* Aldo J. G. Zarbin (PQ), Elisa S. Orth (PQ) naianenaidek@gmail.com

Department of Chemistry, Universidade Federal do Paraná (UFPR), CP 19032, CEP 81531-980, Curitiba, PR, Brazil

Keywords: Functionalization, Graphene oxide, Carbon nanotubes, Covalent, Non-covalent.

Highlights

- Covalent and non-covalent design for nanocomposites based on nanocarbons and polymers
- Potential applications for covalent and non-covalent nanocarbons composites

Abstract

Covalent and non-covalent functionalization of carbon nanomaterials has been a strategic tool to modulate the properties of the materials. The former is based on the functionalization (i) directly at structure of the nanocarbons through a covalent bond or (ii) by the targeted functionalization on oxygenated groups of oxidized nanocarbons. Whereas the latter, is based by van der Waals, π - π interactions and hydrogen bonds. Non-covalent composites possess weak interactions and the groups are not effectively linked to the nanocarbon surface. While the addition of molecules covalently linked avoid leaching of the final nanocomposite, this approach may also alter the extended π system due the formation of sp^3 carbons changing the electronic properties, which can sometimes compromise the application. The exploitation of covalent and non-covalent bonds between the components may increase their potential applications as sensors, supercapacitors, etc. Herein, we present results related to the covalent and non-covalent functionalization of graphene oxide (GO), carbon nanotubes (CNT) (powder and thin films). A (i) direct covalent bond with polymer monomers on the carbon structure was carried out with CNT and (ii) a targeted functionalization on the carboxylic groups from GO (formation of an amide bond). Lastly, the materials were polymerized. Non-covalent nanocomposites were synthesized chemically giving GO/polypyrrole derivatives.

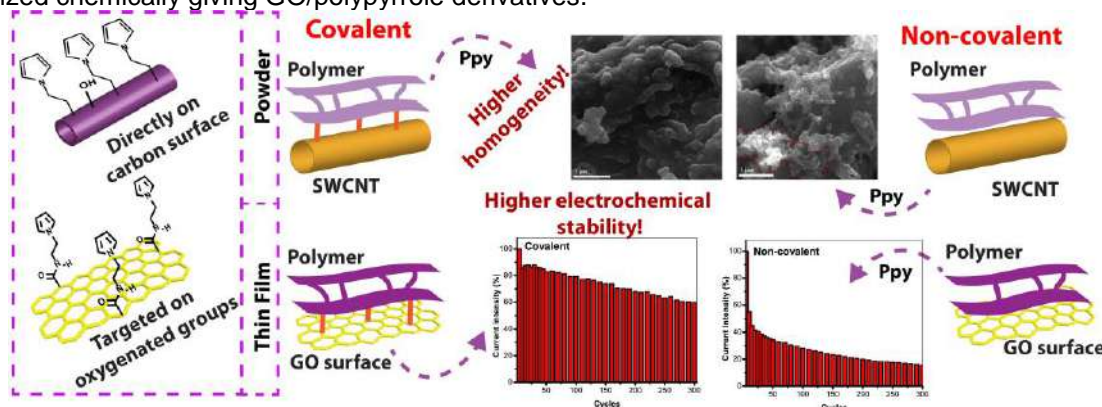


Figure 1. Schematic representation of covalent and non-covalent nanocomposite studied

The final results show that the covalent GO nanocomposites in powder shows an increase on the electrochemical stability (remaining stable for 300 cycles) over the non-covalent nanocomposite (stable only for 20 cycles). However, carrying out the same analysis with the nanocomposite in thin films form, it's not observed the increase in the electrochemical stability. For all covalent samples (CNT and GO) a more homogeneous morphology was observed, indicating that the anchored monomers guaranteeing a stronger interaction. Overall, the covalent functionalization in nanocomposites may not be always a successful approach, however the design of covalent and non-covalent nanocomposites shed light to promising potentials applications for supercapacitors.

References: (1) J Polym Sci A1 2018, 56, 579–588 (2) J Mater Chem 2010, 20, 4385. (3) J Mater Chem A 2017, 5, 9591.

Acknowledgments

- UFPR, CNPq, CAPES, PhosAgro/UNESCO/IUPAC, Fundação Araucária, INCT de Nanomateriais de Carbono e L'Oréal-UNESCO-ABC

Evaluation of asbestos chrysolite in cement fiber water tanks

Dayane Moraes de Souza (IC),¹ Danielle Caroline Schnitzler (PQ)².

dayanesouza@alunos.utfpr.edu.br; daniellec@utfpr.edu.br

^{1,2}Departamento Acadêmico de Química e Biologia, UTFPR

Palavras Chave: *Asbesto, Chrysotile, Water Tanks of Fiber-cement.*

Highlights

Fiber with carcinogenic potential present in water tanks. Its waters were analyzed by (SEM) coupled (EDS) and infrared spectroscopy for compared with standard asbestos showing certain similarities between them.

Abstract

Asbestos is a mineral with carcinogenic potential, he has resistivity to fire, chemical and microbiological attacks. The chrysotile $Mg_3Si_2O_5(OH)_4$ fibers are used in construction because its affinity with the cement, making it flexible and durable. Currently asbestos water tanks can be found in many homes and institutions, which is a problem since asbestos is among the class of wastes that are classified as dangerous for human health and CONAMA resolution n°307 of 2002. The research evaluated the wear of water tanks by the possible presence of asbestos fiber in background sediments of the water tanks. Therefore, we collected water samples from two water tanks (i) UTFPR Curitiba, (ii) a commercial post located in the Boqueirão neighborhood Curitiba. For the water tank (ii) was also collected samples of bottom sediment. The four water samples were filtered on 0.45 μm cellulose acetate membrane while the bottom sediment sample was dried at room temperature and triturated. Then all samples were characterized by Scanning Electron Microscopy (SEM), coupled (EDS) (JEOL/JSM 6360 LV). The water samples showed rubbish similar in appearance to asbestos, it can be seen that the water samples had some visual similarities with the asbestos standard, however, the results of EDS were not satisfactory due to the methodology of preparation of the sample used that did not allow a complete analysis in EDS performance. The background sediment was also characterized by IR (Varian/640-IR), the sample was macerated with KBr, we can see a band that can be characterized because the binding Mg-OH near 434 cm^{-1} and the bands between $1200\text{-}900\text{ cm}^{-1}$ relative the vibrations of Si-O. All samples were compared to a chrysotile standard, but as the sample preparation method proved insufficient for a validation of asbestos in the samples, this methodology will be improved and executed briefly. All the samples were compared with a chrysotile standard, however the methodology used will be improved to obtain better results.

Comentado [D1]: Assim, qual a conclusão que você chegou nesse momento? Lemvre-se que eles pediram uma conclusão também.

References

CONSELHO NACIONAL DO MEIO AMBIENTE. **Resolução CONAMA n° 307**, de 5 de julho de 2002.

Formatado: Fonte: 10 pt

MARQUES, Vinicius Martins; GOMES, Luciana Paulo; KERN, Andrea Parisi. Avaliação ambiental do ciclo de vida de telhas de fibrocimento com fibras de amianto ou com fibras de polipropileno. **Ambient. constr.**, Porto Alegre, v. 16, n. 1, p. 187-201, Jan. 2016.

Formatado: Fonte: 10 pt

Acknowledgments

Thanks to Universidade Tecnológica Federal do Paraná (UTFPR), CME-UFPR, CNPq, Capes, Ministério Público do Trabalho do Estado do PR and Laboratório de Estudos em Matrizes Ambientais, Sedimento, Solo e Água (LEMASSA).

Síntese, caracterização e atividade antimicobacteriana de complexos de cobre(II) com ácido 2-mercaptonicotínico

Janaina do C. Almeida (PG)^{1*}, Fernando R. Pavan (PQ)², Isabel C. Silva (PG)², Wendell Guerra (PQ)¹.

janaina.almeida@ufu.br

¹Instituto de Química, UFU; ²Faculdade de Ciências Farmacêuticas, UNESP

Palavras Chave: Complexos de cobre(II), Ácido 2-mercaptonicotínico, Atividade antituberculose, *Mycobacterium tuberculosis*.

Highlights

Synthesis, characterization and antimycobacterial activity of copper(II) complexes with 2-mercaptonicotinic acid. Three new Cu(II) complexes with 2-MNA were synthesized and characterized. The activity of complex I was higher than those of the free ligands, presenting good antimycobacterial activity.

Resumo/Abstract

Complexos metálicos são utilizados como fármacos no tratamento de diversos tipos de doenças¹. O cobre é um elemento traço essencial para a função de diversas enzimas, cujos complexos apresentam uma série de efeitos biológicos². Portanto uma ampla gama de aplicações médicas para complexos de cobre têm sido alvo de investigação³. Neste trabalho, complexos do tipo $[\text{Cu}(2\text{-MNA})(\text{N-N})\text{ClO}_4]$ e $[\text{Cu}(2\text{-MNA})_2]$, onde N-N = 2,2'-bipiridina ou 1,10-fenantrolina foram preparados. Os complexos caracterizados por análise elementar, condutividade molar, FT-IR, UV-Vis e HRESIMS têm suas estruturas propostas apresentadas na Fig. 1, em que o íon Cu(II) liga-se ao ácido desprotonado 2-MNA através dos átomos de oxigênio e enxofre. A concentração inibitória mínima (MIC) dos complexos contra *M. tuberculosis* (H₃₇Rv) foi determinada (Tabela 1). Os complexos I e II foram mais ativos do que os ligantes livres, sendo que o complexo I apresenta atividade antimicobacteriana promissora.

Figura 1. Estrutura dos complexos de Cu(II) com 2-MNA.

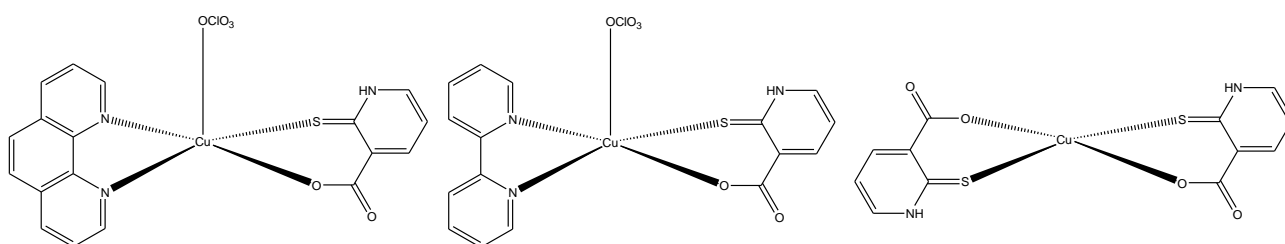


Tabela 1. Atividade *anti-M. tuberculosis* para ligantes e complexos.

| Composto | MIC ₉₀ (μM) |
|---|------------------------|
| phen | 4,334 |
| bipy | 112,636 |
| 2-MNA | >161 |
| $[\text{Cu}(2\text{-MNA})(\text{phen})\text{ClO}_4]$ I | 3,017 |
| $[\text{Cu}(2\text{-MNA})(\text{bipy})\text{ClO}_4]$ II | 30,962 |
| $[\text{Cu}(2\text{-MNA})_2]$ III | >67,408 |
| Rifampicina | 0,057 |

[1] F. Trudu, F. Amato, P. Vanhara, T. Pivetta, E.M. Peña-Méndez, J. Havel, J. Appl. Biomed. 13 (2015) 79.

[2] S. Medici, M. Peana, V.M. Nurchi, J.I. Lachowicz, G. Crisponi, M.A. Zoroddu, Coord. Chem. Rev. 284 (2015) 329.

[3] C. Santini, M. Pellei, V. Gandin, M. Porchia, F. Tisato, C. Marzano, Chem. Rev. 114 (2014) 815.

Área: ANA

Nº de Inscrição: 00723

Desenvolvimento e aplicação de um sistema de foto-oxidação para o estudo das alterações da composição química do petróleo

Milton N. N. Oliveira (IC),¹ Rayane M. Nascimento (IC),¹ Jobson A. Silva (IC),¹ Jandyson M. Santos (PQ),¹

netomilton499@gmail.com; jandyson.machado@ufrpe.br

¹Departamento de Química, UFRPE;

Palavras Chave: Derrames de petróleo, Óleo bruto, Foto-oxidação, Biomarcadores, Impacto ambiental.

Highlights

Development and application of a photo-oxidation system to study of the changes in petroleum chemical composition

- Study of chemical changes in crude oil biomarkers induced by pilot photo-oxidation system for the simulation of oil spills;
- We were able to identify changes in the diagnostic ratios of biomarkers after periods of photo-oxidation exposition of a crude oil.

Resumo/Abstract

A extração extensiva, transporte e uso de petróleo no mundo, resulta inevitavelmente no impacto ao meio ambiente. Com isso, atividades envolvendo óleos brutos tornaram-se uma atividade de risco e um problema global, onde acidentes envolvendo o aparecimento de óleo no meio ambiente têm ocorrido. Assim, estudos que visam compreender as alterações químicas que biomarcadores de petróleo podem sofrer em um ambiente de derrame vêm ganhando atenção. Esse estudo tem como objetivo realizar a construção e aplicação de um sistema de foto-oxidação para simulação em laboratório de derrames de petróleo em ambiente aquático e terrestre, visando o monitoramento das mudanças químicas dos biomarcadores, acompanhadas temporalmente pela técnica de cromatografia gasosa acoplada à espectrometria de massas (CG/EM). Para simular os derrames, foi realizada a construção de um sistema piloto de foto-oxidação, buscando obter condições reais onde esses derrames podem ocorrer, para tal, uma caixa de simulação foi construída com lâmpadas do tipo branca, azul e ultravioleta, referente aos comprimentos de onda que compreendem a radiação solar, na faixa de 350-800 nm, além da instalação de um sistema de circulação de ar e termômetro. Para as simulações de exposição, uma amostra de petróleo foi misturada com solo 1:40 (*m/m*) ou com água do mar 1:80 (*m/v*), onde durante o processo de exposição na caixa de simulação, alíquotas do óleo foram retiradas em 1, 3, 6, 12, 24, 36 e 72 horas. As alíquotas foram analisadas por CG/EM (modelo TQ8040, Shimadzu co., Japan) utilizando ionização por impacto de elétrons, buscando uma análise com base na comparação do óleo bruto inicial e suas alíquotas após as exposições, onde foram avaliadas as possíveis mudanças químicas de biomarcadores de petróleo e suas razões de diagnósticos. Avaliando os cromatogramas, foi possível notar que há uma redução na área dos *n*-alcanos de baixa massa molecular, principalmente *n*-C₁₂ e *n*-C₁₃, já nas primeiras horas de exposição, devido a processos de evaporação. Para a razão CPI (índice preferencial de carbono), utilizada para informações sobre o ambiente deposicional do petróleo, não houve alteração em seus valores durante os tempos de exposição do óleo em nenhum dos ambientes expostos, seja no terrestre ou aquático, apresentando valores de CPI≈1,05. A razão pristano/fitano (Pr/Ft), que é utilizada como indicador de oxidação do ambiente deposicional, diminuiu com os tempos de exposição para ambos os ambientes, esse comportamento é associado ao aumento das áreas absolutas de ambos biomarcadores, porém, com aumento mais pronunciado para o Ft. Para as razões Pr/*n*-C₁₇ e Ft/*n*-C₁₈, que são empregados para avaliar o grau de biodegradação de óleos, não foi observada alterações significativas para a exposição a água do mar, porém, houve uma leve redução na exposição com solo. Esses dados preliminares mostram que há uma importante alteração na composição química de biomarcadores do petróleo após derrames simulados em ambiente terrestre e aquático, podendo este trabalho servir como suporte a estudos de biorremediação de ambiente impactado por derrames envolvendo a indústria do petróleo. Como perspectiva, estão sendo realizadas as avaliações das mudanças composicionais de biomarcadores clássicos da classe dos esteranos e terpanos.

Agradecimentos/Acknowledgments

CNPq, CAPES, CLQM/UFS, LABMAQ/UFRPE, PRPPG/UFRPE

Área: MAT **Nº de Inscrição:00724**
Propriedades Catalíticas Tipo Fenton Heterogêneo de g-C₃N₄

Wanessa L. de Oliveira (PG)^{1*}, Lucas F. O. Silva (IC)², Meiriele A. Ferreira (PG)¹, Henrique A. J. L. Mourão (PQ)³, Honória F. Gorgulho (PQ)⁴, João P. de Mesquita (PQ)¹.

wanessalimaoliveira@gmail.com;

¹Departamento de Química, UFVJM; ²Departamento de Farmácia, ³UFVJM, Instituto de Ciência e Tecnologia, UFVJM,

⁴Departamento de Ciências Naturais, UFSJ.

Palavras Chave: Nitreto de carbono grafítico, Fenton heterogêneo, Catálise, Radical hidroxila.

Highlights

Fenton catalytic properties of g-C₃N₄ - The g-C₃N₄ were evaluated for their structure, chemical and surface texture. Fenton catalytic reactions. Catalytic activities of g-C₃N₄.

Resumo

Nitreto de carbono grafítico (g-C₃N₄) é a nova sensação no campo de foto-dispositivos¹, devido à ampla disponibilidade de seus constituintes, baixo custo, facilidade de preparação e estrutura de banda posicionada adequadamente para a foto-oxidação e redução de moléculas de água². Por outro lado, devido a problemas com o uso da reação tradicional de Fenton, ou seja, a necessidade de acidificação e a formação lodo e uso de quantidades estequiométricas de sais de Fe(II)^{3,4}, o desenvolvimento e aplicação de novos materiais como catalisadores na formação de radicais para processos de descontaminação tem sido foco de alguns estudos. Desta maneira, neste trabalho nós mostramos o uso g-C₃N₄ como catalisador para reações do tipo Fenton heterogêneo, a princípio ainda não relatado na literatura.

Os g-C₃N₄ foram obtidos através da policondensação da melamina em diferentes temperaturas finais de condensação de 300, 350, 400, 450, 500, 550 e 600 °C. Todos os materiais foram caracterizados por diferentes técnicas incluindo DRX, FTIR, Titulação potenciométrica e CHN-O. As atividades catalíticas tipo Fenton (sob luz ambiente) foram avaliadas a partir da degradação do corante índigo carmim (10 mg L⁻¹) na presença de 15 mg de g-C₃N₄ e 25 µL de H₂O₂ (34% m/m). A degradação foi monitorada com a Espectroscopia UV-Vís em intervalos de 10 minutos.

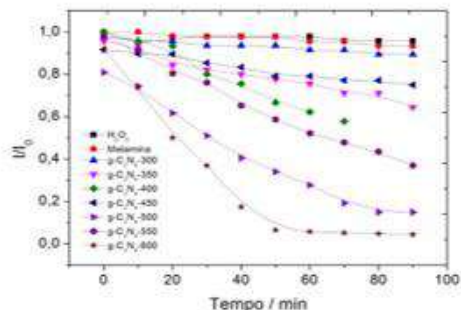


Figura 1 - Cinética de degradação do índigo carmim pelos materiais obtidos a partir da policondensação da melamina g-C₃N₄.

A partir dos padrões de difração verificou-se que a estrutura da melamina é destruída a partir de 350 °C com a formação da estrutura grafítica iniciando em 450 °C. A partir de 500 °C os típicos padrões de difração tipicamente observados para os g-C₃N₄ foram obtidos. Por meio das técnicas de FTIR, CHN-O e titulação potenciométrica foi possível observar que todas as amostras apresentaram significantes quantidades de oxigênio na estrutura presente em diferentes grupos funcionais, tais como -OH e C=O. Na Figura 1 são mostradas as cinéticas de degradação do corante índigo carmim pelos diferentes materiais. Observa-se que as maiores taxas de degradação são obtidas para as amostras de g-C₃N₄, sendo a preparada a 600 °C a mais eficiente. A relação entre as constantes cinéticas da reação com a quantidade de

grupos funcionais oxigenados e nitrogenados sugere que a formação dos radicais ocorre via reação redox do H₂O₂ com estes grupos funcionais.

Desta maneira, conclui-se que os g-C₃N₄ que foram obtidos a partir da policondensação de melamina (500-600 °C), mostraram uma alta atividade catalítica na degradação do corante IC na presença de H₂O₂. Acreditamos que a formação dos radicais oxidantes está relacionada aos grupos funcionais oxigenados e nitrogenados da superfície em associação com a estrutura única do g-C₃N₄.

Referências

- ¹ Wang, X., et al. *Nature Materials*, **2008**. **8**: p. 76.
- ² Wen, J., et al., *Applied Surf Sci*, **2017**. 391: p. 72-123.
- ³ Bokare, A.D. and W. Choi. *Journal of Hazardous Materials*, **2014**. 275: p. 121-135.
- ⁴ Garrido-Ramírez, E.G., B.K.G. Theng, and M.L. Mora. *Applied Clay Science*, **2010**. 47(3): p. 182-192.

Agradecimentos

Agradecimentos: CAPES, FAPEMIG, CNPQ, UFVJM e PPGQ.

Área: ANA

Nº de Inscrição: 00725

Application and characterization of zero-valent iron supported on attapulgite for the removal of metronidazole in water using oxone

Rafael M. Coelho (PG)^{1*}, Débora Vilela Franco (PQ)², Edivaldo dos Santos Filho (PQ)², Leonardo Morais da Silva (PQ)¹

rafaelmendes.itabira@hotmail.com

¹Departamento de Química, UFVJM; ²Instituto de Ciência e Tecnologia, UFVJM

Key words: Attapulgite, Drug, Water, Clay.

Highlights

Remediation of contaminated water through advanced oxidative processes. Use of zero-valent iron for PMS activation, generating sulphate radicals. Degradation of emerging organic compounds.

Introduction

Drugs present a notable danger in aqueous medium, especially to those that have in their molecular structure the nitro group. As a proposal for the remediation of contaminated water, the present work aims at the degradation of nitroderivative drugs, especially metronidazole (MTZ), with the use of attapulgite (ATP) supported zero-valent iron (FZV) particles, a clay found in abundance in the Northeast region of the Brazil ⁽¹⁾, in the presence of oxone or PMS.

Methodology

The synthesis of the composite is an adaptation of the studies developed by Petala et al. (2013) ⁽²⁾. Monitoring of MTZ degradation in aqueous medium was evaluated by UV-Vis and Chemical Oxygen Demand (COD). The characterization of these materials was performed by X-ray Diffraction (XRD) and Scanning Electron Microscopy (SEM). In the present work the following experimental aspects are evaluated: the concentration of MTZ in the medium (10 to 50 mg.L⁻¹) and the use of another support, in this case silica (SLC) was used.

Results and discussion

By the XRD analysis of the materials, it is possible to observe characteristic ATP peaks remaining in the ATP/FZV sample, but the peaks related to the FZV particles and also to some iron oxides appear. The ATP morphology of the SEM images resembles needles, whereas the ATP/FZV material has a porous appearance, strongly attached to the FZV particles, with some traces of the morphology of the support material. The removal studies showed that the compound ATP/FZV showed a 95% efficiency, while the composite obtained with SLC obtained a removal efficiency of 70%, being evident that the ATP exerts a favorable function to the process of removal of MTZ when compared to SCL, probably due to the presence of magnesium and aluminum in its structure, higher porosity and interaction with PMS. As can be seen from Table 1 as the drug concentration increases a decrease in MTZ removal efficiency occurs and can be explained by the inactivation of the active sites of the material due to high drug concentration.

Table 1. Removal efficiency due to influence of MTZ concentration.

| MTZ (mg.L ⁻¹) | 10 | 20 | 30 | 40 | 50 |
|---------------------------|------|------|------|------|------|
| Efficiency(%) | 95,7 | 95,1 | 94,9 | 82,1 | 81,7 |

Source: authors' collection.

According to Tab. 02, it is observed that the combined use of ATP / nFZV and PMS has resulted in removal of COD, indicating that the compound is degraded, mainly due to the formation of sulphate radicals (SO₄^{-•}) in the means.

Table 2. Chemical Oxygen Demand for the initial and final situations of the experiments

| DQO | ATP/nFZV | PMS | ATP/nFZV e PMS |
|---|----------|-------|----------------|
| DQO ₀ (mg O ₂ .L ⁻¹) | 89,6 | 116,3 | 107,0 |
| DQO _f (mg O ₂ .L ⁻¹) | 24,9 | 108,5 | 8,4 |

Source: authors' collection.

Conclusion

By the characterization techniques the distinctions between the two materials (ATP and ATP/FZV) became clear. The use of ATP as a support material makes all the difference in the removal process, in contrast to the results obtained using SCL. ATP/FZV showed good MTZ degradation activity together with PMS use, and may undergo inactivation at high concentrations of MTZ.

Acknowledgments

To GEQAm, UFVJM, CAPES and CNPq.

Bibliographic references

¹XAVIER, K. C. M. et al. Caracterização mineralógica, morfológica e de superfície da attapulgite de Guadalupe-PI. **HOLOS**. 2012.

²PETALA, E. et al. Nanoscale zero-valent iron supported on mesoporous silica: Characterization and reactivity for Cr(VI) removal from aqueous solution. **J. of Haz. Mat.** 2013.

Structural elucidation of a bioactive fucomannogalactan from edible mushroom *Hypsizygus marmoreus*

Ruberney S. Oliveira (PG),¹ Stelée M.P. Biscaia (PQ),² Daniel L. Bellan (PG),² Edvaldo S. Trindade (PQ),² Maria Carolina B. Di-Medeiros(PQ),³ Luciano M. Lião (PQ),³ Elaine R. Carbonero (PQ).^{1*}

elainecarbonero@gmail.com

¹ Departamento de Química, UFG-Regional Catalão; ² Departamento de Biologia Celular, UFPR; ³ Instituto de Química, UFG-Regional Goiânia.

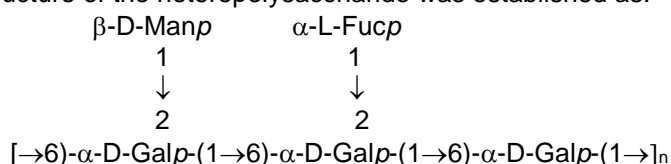
Palavras Chave: *Hypsizygus marmoreus*, Mushroom, Fucomannogalactan, Chemical Structure, Antimelanoma, B16-F10 cell.

Highlights

A fucomannogalactan was isolated from *H. marmoreus* mushroom. It consists of α -Galp (1→6) main chain, partially branched by α -Fucp and β -Manp units. FMG exhibited promising *in vitro* antimelanoma effects.

Resumo/Abstract

The fucomannogalactan (FMG), with a molecular weight of 17.1 kDa, obtained from fruiting bodies of *Hypsizygus marmoreus*, exhibited promising *in vitro* antimelanoma effects. FMG was not cytotoxic, nor altered cell morphology, but was able to reprogram B16-F10 murine melanoma cells by modifying colony formation ability and cell migration, without changing cellular proliferation. Monosaccharide composition analysis showed that FMG comprised fucose, manose, and galactose in the ratio of 1.00:1.08:3.17. Structural characterization of FMG was carried out using methylation analysis, partial acid hydrolysis, and NMR experiments. The results indicated that FMG contained α -(1→6)-linked galactopyranosyl main chain, partially substituted at O-2 with non-reducing ends of α -L-fucopyranose and β -D-mannopyranose. The predicted structure of the heteropolysaccharide was established as:



Agradecimentos/Acknowledgments

The authors would like to thank the YUKI Cogumelos Company (Owner: José Francisco Ramos Fernandes Viana) for supplying the biological material; Brazilian National Council for Scientific and Technological Development (CNPq: *Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico*) and Coordination for the Improvement of Higher Education Personnel (CAPES: *Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior*) for financial support.

Área: QPN

Nº de Inscrição: 00730

Phytochemical analysis and activities evaluation of the seed extracts of *Araucaria angustifolia*

Isabelle Cristina Neumann (IC),¹ Helena M. Russo (PG),² Vanderlan S. Bolzani (PQ),² Maria Luiza Zeraik (PQ)¹

zeraikml@uel.br; neumannisa0@gmail.com

¹Departament of Chemistry, Londrina State University (UEL), 86051-990, Londrina, PR, Brazil; ²NuBBE, Department of Organic Chemistry, Institute of Chemistry, São Paulo State University (UNESP), 14800-900, Araraquara, SP, Brazil;

Palavras Chave: *Araucaria angustifolia*, Pinhão seeds, Phenolic compounds, Chromatography, LC-MS, Antioxidant activity.

Highlights

12 phenolic compounds were identified in *Araucaria angustifolia* seeds (known as pinhão) by LC-MS. *Araucaria angustifolia* extracts showed antioxidant activity and high amount of phenolic compounds.

Abstract

Araucaria angustifolia (Araucariaceae) seeds, popularly known as *pinhão*, can be found in the southern region of Brazil and is very appreciated by the population, generally cooked and peeled for consumption of its pulp. It is estimated that about 10 tonnes of *pinhão*'s peel are discarded per year, generating a waste problem. The *pinhão*'s peel is rich in phenolic compounds, which shows reports of antioxidant activity, antimutagenic properties, antiviral activity and protection against ultraviolet radiation. This study aims the phytochemical study of the *pinhão*'s peel for the chemical profile identification and evaluation its antioxidant activity. *Pinhão* seeds were purchased from the city of Londrina, PR, and three extracts of different solvents (ethyl acetate, ethanol and methanol) were obtained. The quantification of total phenol content by the Folin-Ciocalteu method was performed, such as the evaluation of antioxidant activity by the DPPH radical method and chromatographic analysis by HPLC-UV/DAD and LC-MS/MS. All the extracts presented statistically similar total phenolic contents (around 340.0 µg mg⁻¹ gallic acid) and similar chromatographic profiles by HPLC-UV/DAD. The ethanolic extract of *A. angustifolia* peels presented the highest antioxidant activity, resulting in EC₅₀ 26.77 ± 1.63 µg mL⁻¹ after 90 min incubation. This result is explained mainly due to its greater polarity among the solvents used, which results in the extraction of polar compounds, providing extracts rich in phenolic compounds, responsible for the antioxidant activity. The chromatographic profile and mass spectra of the *A. angustifolia* extracts obtained by LC-MS showed the presence of 12 phenolic compounds that could be tentatively identified by comparing the fragmentation pattern with the previously reported in the literature^{3,4}: (epi)gallocatechin, prodelfinidine B3, proanthocyanidin dimer, (epi)catechin, quercetin-3-o-glucoside, eriodictiol-o-hexoside, GB-2, myricetin, quercetin and amentoflavone, which may be responsible for the antioxidant effect. Such type of studies may lead to the development of technological applications in the pharmaceutical and cosmetic areas.

References: ¹Cordenunsi, B. R. et al. Journal of Agricultural and Food Chemistry, v. 52, n. 11 p. 3412-3416, 2004. ²Auler, N. M. F. et al. Genetics and Molecular Biology, v. 25, n. 3, p. 329-338, 2002. ³Carrillo-Hormaza, L. et al. Journal of Functional Foods, v. 27, p. 503-516, 2016. ⁴Fraige, K. et al. Phytochemical Analysis, v. 29, p. 196-204, 2018.

Acknowledgments

The authors acknowledge Fundação Araucária, CNPq and FAPESP for the financial support.

Extractor solvent exploratory analysis for auxin biosynthesis from *Coffea arabica* L. leaves

Ieda S. Scarminio (PQ),¹ Pedro Henrique Hatumura (PG),^{1*} Miroslava Rakocevic (PQ),² Roy Edward Bruns (PQ),³ ieda@uel.br; pedro.hatu@gmail.com

¹Departamento de Química, UEL; ²Embrapa Informática Agropecuária, Campus da UNICAMP; ³Instituto de Química, Universidade Estadual de Campinas

Palavras Chave: Mixture design, Mass spectroscopy, Chemometrics, Phytohormone, Curve levels, IAA.

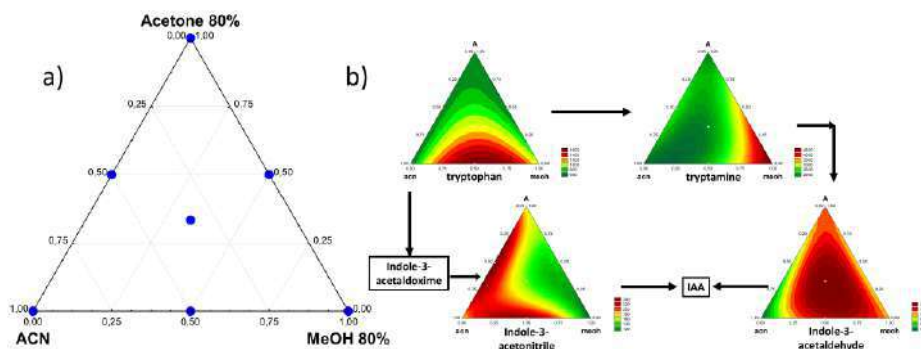
Highlights

The use of mass spectroscopy associated to chemometric techniques allows the search for an ideal extraction phase for the study of each pathway and the control of auxin biosynthesis.

Resumo/Abstract

Phytohormones are important in plant development role and protect plants from damage caused by environmental stress¹. Auxins are considered the most important phytohormones because they regulate cell division, expansion and differentiation². The phytohormone concentration should be tightly controlled because, in addition to regulating the plant tissue growth, high auxin concentrations may cause an inhibitory effect. This control is done by biosynthesis. Despite the identification of various pathways for auxin biosynthesis in different plants, the analysis of the control and importance of each pathway is still quite limited. The simplex-centroid mixture design is fundamental³ to the choice of the solvents and the composition of the mobile phase to obtain quality separations. The objective this work was to identify the best extractor solvents for auxin biosynthesis in *Coffea arabica* L. leaves extracts. Figure 1a) shows the simplex-centroid mixture design used for this analysis. Figure 1b) shows the contour levels predicted by the models using the signals acquired by mass spectroscopy analysis for each metabolite from auxin biosynthesis found in the extracts. The highest intensity for tryptophan was obtained with ACN-MeOH mixture whereas for tryptamine the largest intensity at the occurred for pure MeOH. The indole-3-acetonitrile model presented two maxima with highest intensities observed for the ACN-Acetone and ACN-MeOH mixtures. The 3-acetaldehyde model predicts a large high intensity area and only a small low concentration area, the position for pure ACN. The metabolites identified in the samples indicated that the tryptophan-tryptamine-indole-3-acetaldehyde-IAA pathway was the main route for auxin biosynthesis. In addition, lack of detection of the indole-3-acetic acid (IAA) signal pointed to the possibility that most of the IAA available in the plant was not in its free form, which was corroborated by the detection of several IAA conjugate signals.

Figure 1. Centroid-simplex mixture design with 3 components (a) and biosynthesis of auxin with the models of the metabolites found in the extract (b).



- (1) Pandey, G. K. *Mechanism of Plant Hormone Signaling under Stress*; Wiley-Blackwell: Hoboken, 2017.
- (2) Spiess, G. M.; Hausman, A.; Yu, P.; Cohen, J. D.; Rampey, R. A.; Zolman, B. K. Auxin Input Pathway Disruptions Are Mitigated by Changes in Auxin Biosynthetic Gene Expression in Arabidopsis. *Plant Physiol.* **2014**, *165*, 1092–1104.
- (3) Moreira, I.; Scheel, G. L.; Hatumura, P. H.; Scarminio, I. S. EFEITO DO SOLVENTE NA EXTRAÇÃO DE ÁCIDOS CLOROGÊNICOS, CAFEÍNA E TRIGONELINA EM *Coffea Arabica*. *Quim. Nov.* **2014**, *37* (1), 39–43.

Explorando a Reatividade do Radical Carbamoila Para Criação da Primeira Rota Sintética das Coixespirolactamas A e B.

Vinicius R. Nascimento (PG),¹ Leandro H. Andrade (PQ).¹

vrnascimento@usp.br;

¹Instituto de Química, Universidade de São Paulo, Av. Lineu Prestes 748, SP, 05508-000, Brasil;

Palavras Chave: Síntese Orgânica, Coixespirolactamas, Produto Natural, Fenton, Fotoquímica.

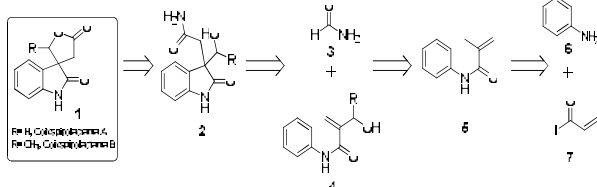
Highlights

Exploitation of Carbamoyl Radical Reactivity for Development of the First Synthetic Route to Coixespirolactams A and B. We report herein, for the first time, a facile and rapid synthetic route through the use of carbamoyl radical for chemical synthesis of 3,3'-spirooxindole γ -butyrolactones, a class of compound found in adlay seeds that has shown promising anticancer activity.

Resumo/Abstract

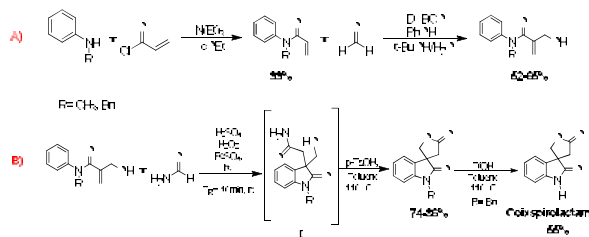
As coixespirolactamas são 3,3'-espiro-oxindol γ -butirolactonas encontradas em sementes da planta conhecida como lágrima do trabalho (*Coix lachryma-jobi L. var. ma-yuen Stapf*). Diversos estudos com extratos naturais revelaram que espirolactonas isoladas desta planta demonstram atividade biológica anti-inflamatória; inibitória e antiproliferativa para células tumorais de melanoma, pulmão, mama e colón.¹ Apesar das interessantes atividades biológicas relatadas na literatura, nota-se que não há metodologias desenvolvidas para síntese destes compostos naturais. Portanto, este trabalho tem como objetivo desenvolver uma metodologia rápida e eficiente para síntese de 3,3'-espiro-oxindol γ -butirolactonas e com isso tornar possível o acesso as coixespirolactamas naturais e seus derivados sintéticos.

A análise retrossintética (**Esquema 1**) permitiu imaginarmos que para a obtenção do composto **1** seria necessário a obtenção do **2**. Este composto **2** poderia ser preparado a partir da reação do radical carbamoila com N-acrilamidas **4**.²



Esquema 1: Estrutura da Coixespirolactama A e B e sua análise retrossintética.

Iniciamos o desenvolvimento da metodologia (**Esquema 2**) através da reação de acilação de derivados da anilina para síntese de acrilamidas. Em seguida, estas amidas foram submetidas a uma reação de Baylis-Hillman com formaldeído. Obtido então o composto chave de nossa rota sintética, aplicamos uma reação de foto Fenton em fluxo, produzindo de maneira rápida e limpa os oxindóis (**I**) precursores da espirolactona. Estes oxindóis foram então submetidos a uma reação de lactonização, para produzir as 3,3'-espiro-oxindol γ -butirolactonas em ótimos rendimentos. Por fim, uma destas espirolactonas foi desprotegida obtendo-se o produto natural **coixespirolactama A**.



Esquema 2: Rota desenvolvida para síntese de 3,3'-espiro-oxindol γ -butirolactonas e seus derivados.

A nossa proposta de rota sintética para as coixespirolactamas se mostrou extremamente eficiente. Nosso próximo desafio é utilizar a metodologia apresentada para a síntese de uma ampla variedade de compostos sintéticos derivados das coixespirolactamas.

¹ Lee, M.; Lin, H.; Cheng, F.; Chiang, W.; Kuo, Y. Food and Chemical Toxicology 46 (2008) 1933–1939.

² Correia, V. G.; Abreu, J. C.; Barata, C. A. E.; Andrade, H. L. Org. Lett. 2017, 19, 5, 1060-1063.

Agradecimentos/Acknowledgments

CAPES, CNPQ e FAPESP.

Synthesis and characterization of $[bis\text{-RuCl(dppb)(bipy)}-\mu\text{-M(pyterpy)}_2](\text{PF}_6)_4$ complexes, where $M = \text{Mn(II)}, \text{Co(II)}$ ou Ru(II) .

Rafael P. Machado (PG)*¹, Marília I. F. Barbosa (PQ)¹ and Antônio C. Doriguetto(PQ)¹

rafaelpmachado7@gmail.com;

¹Instituto de Química, Universidade Federal de Alfenas – UNIFAL-MG

Keywords: Terpyridines, Trinuclear complexes, Ruthenium, bipyridine

Highlights

Synthesis and characterization of Ru, Mn, Co-terpyridine complexes; supramolecular chemistry; Renewable fuels inspired by artificial photosynthesis.

Resumo/Abstract

Polypyridyl-Ru(II) complexes with N-donor ligands, such as bipyridine, 1,10-phenanthroline and terpyridine, have attracted a great interest over the past three decades, due to their peculiar photophysical, photochemical and electrochemical features [1]. Such properties make these species appealing in the fields of photocatalysis, dye sensitized solar cells (DSSCs) and artificial photosynthesis [2, 3]. In this sense, trinuclear complexes containing terpyridine ligand with Ru(II), Mn(II) and Co(II) were obtained and characterized, aiming their use in the cleavage of water molecule by light (artificial photosynthesis). The compounds were characterized by UV-Vis, IR, NMR of ¹H, ¹³C{¹H} and ³¹P{¹H}, mass spectrometry, elemental analysis, molar conductance and cyclic voltammetry. Figure 1 shows the proposed structures of obtained complexes.

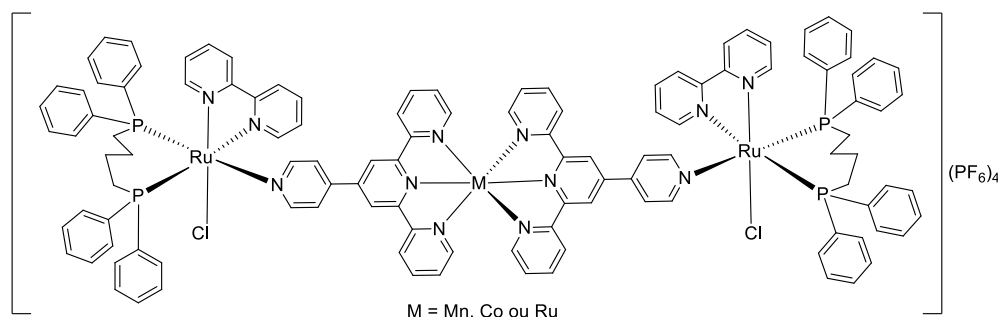


Figure1: Proposed structure for trinuclear complexes.

[1] - Belete B. Beyene, Chen-Hsiung Hung, *Photocatalytic hydrogen evolution from neutral aqueous solution by a water-soluble cobalt(II) porphyrin*, Sustainable Energy Fuels, 2018, 2, 2036.

[2] T.J. Meyer, Pure Appl. Chem. 58 (1986) 1193

[3] Michael S. Eberhart *et. al.*, *Completing a Charge Transport Chain for Artificial Photosynthesis*, J. Am. Chem. Soc. 2018, 140, 9823–9826.

Agradecimentos/Acknowledgments

UNIFAL-MG, CNPq, CAPES, FINEP e FAPEMIG

Imidazole as catalyst for the degradation of the pesticide Diazinon: unusual pH rate profile

Alex Roger Teixeira (PG),* Elisa S. Orth (PQ).

alex.roger.teixeira@gmail.com;

Departamento de Química, UFPR

Palavras Chave: (organophosphate, kinetic pH profile, catalysis, destruction).

Highlights

- Imidazole catalyzes the degradation of the pesticide Diazinon over a broad pH range.
- Peculiar high rate enhancements under pH 7.

Resumo/Abstract

Diazinon (DZN) is a sulfur organophosphorus pesticide widely applied as insecticide in residential and agricultural uses. Historically, DZN have been detected in surface and groundwater, posing risks to health and the environment because of its high stability and toxicity¹. In this context, many alternatives of destruction of the DZN and similar pesticides have been reported. The alkaline hydrolysis of DZN provides 2-isopropyl-6-metil-pyrimidin-4-ol (IMPOH) and thiophosphoric acid (Figure 1 - red). Imidazole (IMZ) is a promising catalyst since it is a very efficient nucleophile for the degradation of the sulfured pesticide methyl-parathion², similar to DZN. In this work, the results show that the reaction of DZN with IMZ occurs about 100 times faster than the reported spontaneous reaction (pH 5,0 and room temperature³). Moreover, an unusual high reactivity is observed under pH 7, since IMZ is known to be more reactive above pH 7.

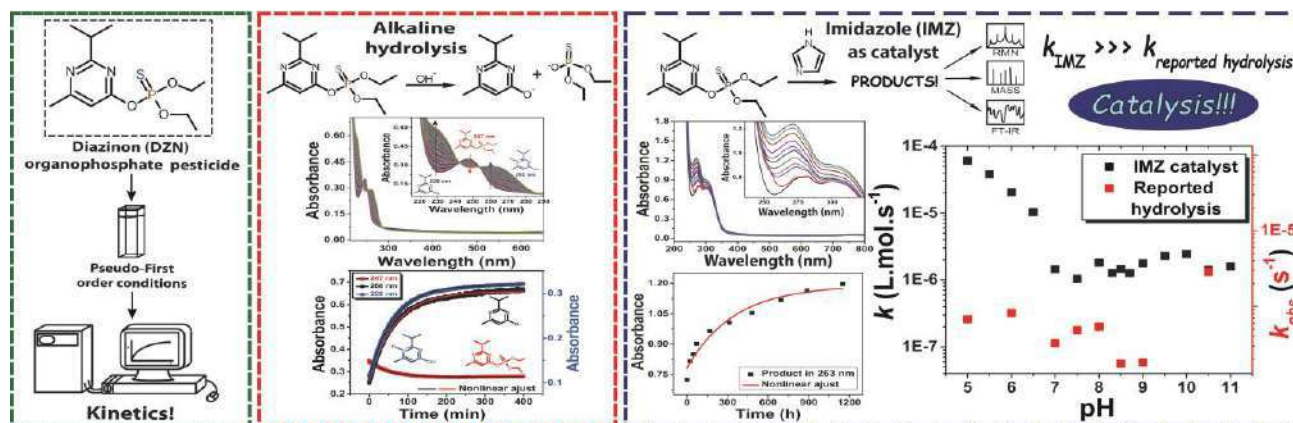


Figure 1 – Typical UV-Vis profile of the DZN reactions. All reactions in pseudo-first order conditions (green), alkaline hydrolysis (red) and reaction with the neutral species of IMZ (blue). For IMZ reaction, pH versus rate constant³ profile are show. (Product formation monitored in 263 nm; [IMZ] = 1,0 mol.L⁻¹; T = 25 °C).

Herein, other analyses are being carried out (UV-Vis, NMR and mass spectroscopy) to identify the possible intermediates, products and mechanism involved in this reaction. The product detected by UV-Vis suggest that IMZ attacks preferably the P=S center. This is a promising reaction, because not yet many studies involving the degradation of DZN under mild conditions is reported, although is wide use. Specifically this reaction has potential towards chemical detoxification and quantification of sulfur organophosphate pesticides.

Acknowledgments: UFPR, CAPES, CNPq, PhosAgro/UNESCO/IUPAC, Fundação Araucária and L'Oréal-UNESCO-ABC

References:

1. Wang, D. ; Singhasemanon, N. ; Goh, K. S. **Env. Mon. A.** (2017): 189-310
2. Silva, V. B. et al. **Chem. Eur. J.** (2018): 817-822
3. Chapman, R. A. ; C. M. Cole. **Jour. of Env. Sci. & H.** Part B. (1982): 487-504

Artificial hydrolase based on functionalized commercial polymer and cationic surfactant for degradation of organophosphate

Elder C. Leopoldino (PG), Andreza R. Michel (IC), Adriana P. Gerola (PQ), Bruno S. de Souza (PQ)

eldergmc@gmail.com; bruno.souza@ufsc.br

Department of Chemistry, Federal University of Santa Catarina, Florianópolis.

Keywords: Polymer, Imidazole, Catalysis, Organophosphate, Surfactant.

Highlights

A novel polymer (PECIM) was prepared in gram-scale via post-polymerization modification of a commercially available polymer.

PECIM is an effective catalyst for degradation of an organophosphate triester.

The reaction is 200 times faster in the presence of small amounts of CTAB.

Abstract

The use of reactive polymers for the development of new organocatalysts is a very attractive strategy.¹ Some aspects of enzymatic catalysis, such as the presence of catalytic groups in hydrophobic compartments, can be easily recreated in these macromolecules.² In the present work, poly(ethylene-alt-maleic anhydride) (PEMA), average Mw 100,000-500,000, was modified with 1-(3-aminopropyl)imidazole (APIM) to introduce imidazoles units into its structure, resulting in a polymer containing also carboxylate groups (PECIM). The novel polymer PECIM was characterized by infrared spectroscopy and ¹HNMR. The hydrolytic activity of the novel polymer was evaluated towards hydrolysis of diethyl-2,4-dinitrophenyl phosphate (DEDNPP) and compared to similar polymers reported elsewhere^{2,3} (Figure 1). Besides, the effect of cetyl trimethylammonium bromide (CTAB) on PECIM catalytic activity was investigated.

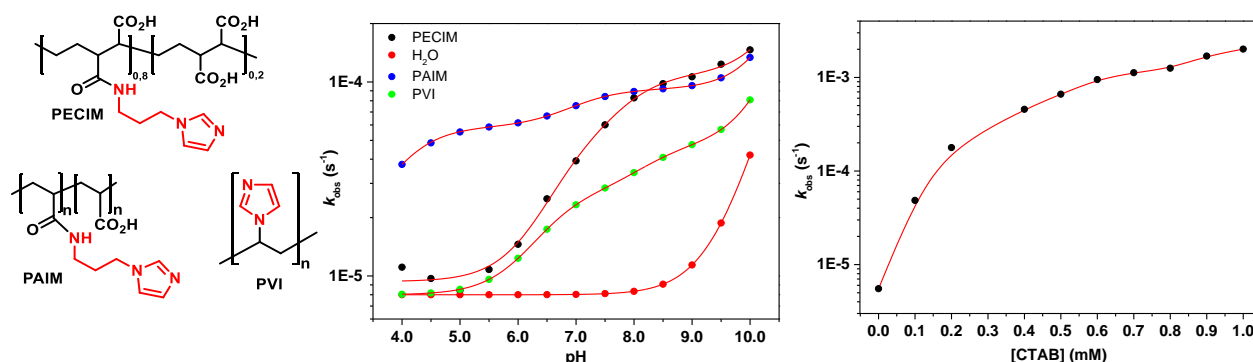


Figure 1. (Left) Structure of PECIM, PAIM² and PVI³. (Middle) pH rate profile for decomposition of DEDNPP at 10.0 mmol L⁻¹ PECIM (monomer concentration) (●●) at 25 °C, [KCl] = 1.0 mol L⁻¹. Reaction in the presence of PAIM² (●●) and PVI³ (●●), at 10 mmol L⁻¹, are shown for comparison using data from ref. 2 and 3. (Right) Effect of CTAB at 0.48 mmol L⁻¹ PECIM, without KCl.

As shown above, PECIM accelerates DEDNPP hydrolysis, and the catalytic activity is within the same order of magnitude of those of PVI and PAIM.²⁻³ Addition of small amounts of CTAB dramatically increased the observed constants for DEDNPP hydrolysis, with enhancements up to 250-fold.

1 Blasco, E. *et al.*; *Macromolecules* 2017, 50, 14, 5215-5252.

2 Gerola, A.P. *et al.*; *ACS Catal.* 2017, 7, 3, 2230-2239.

3 Orth, E.S.; Campos, R.B.; *J. Braz. Chem. Soc.* 2016, 27, 2, 285-294.

Acknowledgments

CNPq-Process 455181/2014-4, INCT-Catálise and PPGQMC-UFSC for financial support.

Área: EDU**Nº de Inscrição: 00737**

Contribuições do PIBID e a práxis pedagógica na formação inicial de estudantes de licenciatura em Química do Instituto Federal de São Paulo

Luana Araújo de Oliveira (IC),¹ Leandro de G. Ferreira (IC),¹ Paulo C. Bazon(FM),² Mayra T. Camilo (FM),² João Henrique S. Romero (PQ),¹.

luana.ara.oliveira@gmail.com

¹Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia de São Paulo, Câmpus Catanduva; ²Escola Estadual Barão de Rio Branco, Diretoria de Ensino do município de Catanduva.

Palavras Chave: Chemistry, Pibid, Praxis, Initial teacher training.

Highlights

Title: PIBID's contribution and the pedagogical praxis in the initial training for teachers of Chemistry at Federal Institute of São Paulo.

- ✓ Student experience report of the Institutional Scholarship Program in Pre-service teacher;
- ✓ Development of activities that articulated theory and practice;
- ✓ PIBID promotes pedagogical praxis, social transformation and strengthening of professional teacher identity.

Resumo

O trabalho é um relato de experiência dos bolsistas do Programa Institucional de Bolsa de Iniciação à Docência (PIBID) do curso de Licenciatura em Química do Instituto Federal de São Paulo (IFSP) - Câmpus Catanduva. As atividades foram realizadas em uma escola pública no município de Catanduva. O objetivo é descrever as atividades e as experiências dos pibidianos e os impactos na formação docente. Os licenciandos estão na primeira metade do curso, e realizaram as suas atividades em turmas de ensino médio e educação de jovens e adultos do período noturno. Ressalta-se que foi através do PIBID o primeiro contato como graduandos em uma escola. Após o período de ambientação e observação de aulas na escola, os licenciandos realizaram alguns grupos de discussão para proporem atividades e intervenções que melhorassem a motivação, participação e desempenho dos alunos durante as aulas de Química e Física. Entre as ações de destaque estão as adaptações de experimentos de Química e Física utilizando materiais de baixo custo, desenvolvimento de jogo didático de perguntas e respostas na forma de painel de 20 questões de 5 andares, onde cada andar contém quatro questões utilizando isopor como base e estrutura e, papel cartão para confeccionar os prismas que contem três faces, onde na primeira face está o número da questão, na segunda a pergunta ou desafio e na última face a solução do problema. Para o prisma girar no isopor utilizou-se palito de madeira. Outro recurso didático aplicado foi uma adaptação do supertrunfo® utilizando como tema central cientistas brasileiros. Nessas atividades os pibidianos realizaram vários levantamentos bibliográficos, e ainda, desenvolveram autonomia e criticidade. Para o desenvolvimento dos recursos didáticos e outras estratégias, os pibidianos tiveram a preocupação de realizar atividades que articulassem a teoria e a prática para o desenvolvimento de aulas mais dinâmicas e atrativas. Assim, as atividades desenvolvidas pelos licenciandos através do PIBID articulam-se com a práxis, pois, neste sentido, esta é entendida como a materialização do conhecimento capaz de promover a transformação social, constituído assim, de um espaço formativo das práticas docentes dos licenciandos¹. Dessa forma, as atividades proporcionadas pelo projeto PIBID envolvem a reflexão sobre o âmbito educacional, e se constitui, como uma estratégia para a melhoria da qualidade na formação de professores frente a realidade das salas de aulas². Os resultados alcançados pelo PIBID no IFSP Catanduva estão corroborando com a formação inicial dos estudantes e proporcionando reflexões inovadoras para a docência e ainda, revelam a importância desse projeto nos cursos de licenciatura, assim como o fortalecimento da identidade profissional docente.

1 SILVA, K. C. M. O.; MESQUITA, N. A. S. Práxis e Identidade Docente: Entrelaces no Contexto da Formação pela Pesquisa na Licenciatura em Química. *Química Nova na Escola*, v. 40, n. 1, p. 44-52, 2018.

2 GALIAZZI, M. C., MORAES, R. Educação pela pesquisa como modo, tempo e espaço de qualificação da formação de professores de ciências. *Ciência & Educação*, v. 8, n. 2, p. 237-252, 2002.

Acknowledgments

This research was supported by CAPES.

Área: INO

Nº de Inscrição: 00738

Studies of Second Coordination Sphere Effects with Copper (II) Complex containing an Intercalating Group

Bruna Luiza Auras (PG)^{1*}, Ademir Neves (PQ)¹[*bruna.auras@gmail.com](mailto:bruna.auras@gmail.com)¹Departamento de Química, UFSC. Laboratório de Bioinorgânica e Cristalografia.

Keywords: Mimetic models; Copper (II) Complexes, Second Coordination Sphere.

Highlights

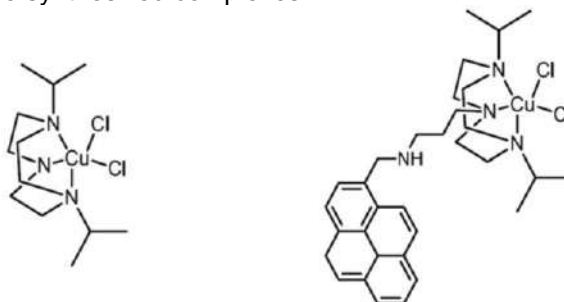
Synthesis of Copper (II) Complex as a mimetic model and studies of the Second Coordination Sphere effects using pyrene as intercalating agent.

Abstract

Mimetic models are used as auxiliary ways in the understanding of the enzyme mechanism action and with such, much can be explained about the first-sphere coordination of these biomolecules. Even so, much more information are necessary to explain with regard to the selectivity and specificity of these molecules. In this context, second coordination sphere studies emerge as a strategy, to explain the importance of these effects in the catalytic activity. An interesting strategy in the investigation of these effects is the insertion of aromatic polycyclic groups which contributed with hydrophobic and, also intercalating effects in molecules like DNA. Thereby, a new complex of Copper (II) was synthesized with a ligand derived from 1,4,7-triazacyclononane containing a pyrene unit with intent to evaluate the change in the kinetics involving the model substrate 2,4-BDNPP.

The complexes, shown in the figure 1, were synthesized and characterized in solution and, after these studies, they were subjected to kinetic tests using the model substrate 2,4-BDNPP (which is very common in the studies to the cleavage of the P-O bindings in phosphate esters).

Figure 1 Representation of the synthesized complexes



Firstly, the complexes were submitted to kinetic studies with variations of pH in order to determine the optimum pH of the reaction. For the complex without the pyrene unit, it was possible to determine the optimum pH 9.0 and for the complex containing the pyrene unit, pH 5.0. This difference shows evidence of the second-sphere effect caused by pyrene and by the uncoordinated amine to the metal center.

After determining the optimum pH, the complexes were evaluated in studies involving the variation of the concentration of the substrate where it was possible to observe that the complex containing the pyrene unit accelerated the reaction rate by 33 times and presented catalytic efficiency 12 times higher.

Therefore, complementary studies are underway in order to investigate the detailed mechanism of action these complexes in the hydrolysis of the model substrate and DNA.

Acknowledgments

The authors would like thank to UFSC, CNPq, CAPES and INCT-Catálise, for funding.

Área: ELE

Nº de Inscrição: 00739

Nanocomposites between carbon nanostructures and copper hexacyanometalates: preparation and characterization

Maria Karolina Ramos (PG)¹, Aldo J. G. Zarbin (PQ)^{*1}.

mariakarolina05@gmail.com; aldozarbin@ufpr.br

¹Chemistry Department, Federal University of Paraná - UFPR, Curitiba.

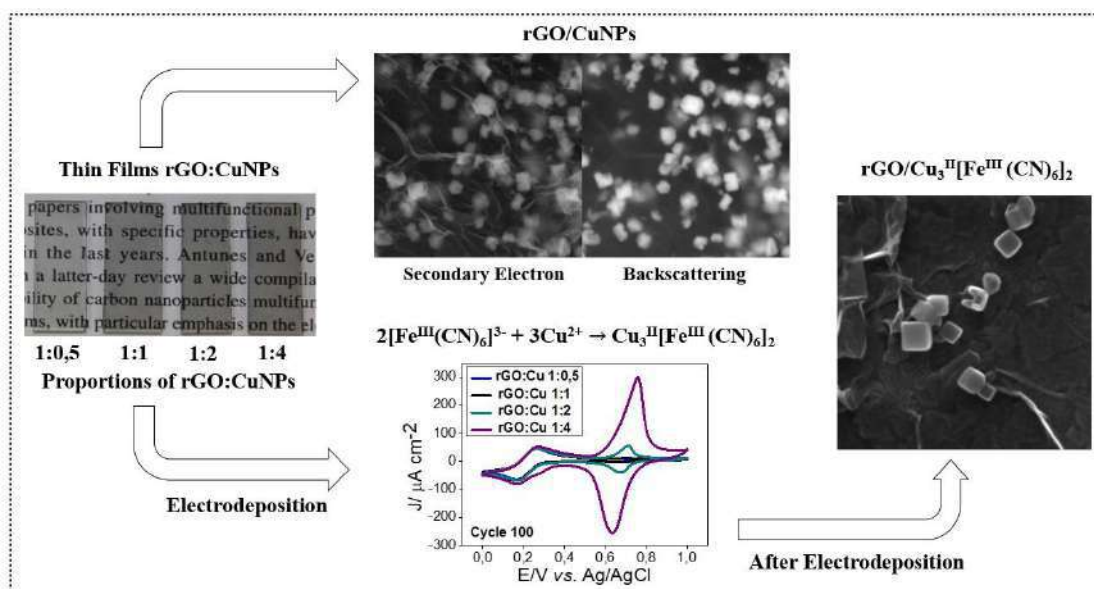
Key Words: Copper nanoparticles, Graphene oxide, Analogue of Prussian Blue.

Highlights

Production of thin films of a nanocomposite between graphene and copper nanoparticles by the synthesis in an interfacial system and electrodeposition of the copper analogue of Prussian Blue.

Resumo/Abstract

Copper hexacyanoferrate (CuHCF), a Prussian Blue analogue (PBA), has unique characteristics since it has the ability to present reversible redox reactions in various support electrolytes containing Li⁺, Na⁺, NH₄⁺, K⁺, among others¹. Studies show that this material has high stability and conductivity when a nanocomposite with structures of carbon is formed². To prepare this material, the synthesis of copper nanoparticles (CuNPs) was carried out using graphene as carrier, aiming at obtaining a homogeneous distribution, better control of size and shape. Nanoparticles have been widely used because of the versatility of their applications³, for example, it may be a precursor material for the synthesis of CuHCF. The reduced graphene oxide (rGO) has as its characteristic its extensive surface capable of strongly immobilizing the nanoparticles and later the PBA⁴. The nanocomposites between rGO and CuNPs were obtained through an interfacial synthesis using sodium borohydride (NaBH₄) as reducing agent. Each reaction was controlled for 30 minutes and different films with rGO/CuNPs ratios were obtained [1:0.5], [1:1], [1:2] and [1:4]; and each set of proportions was studied at four different reductant concentrations (120, 240, 480 and 960 mg). The results show that there is a control of size (50 to 200 nm), shape (spheres, cubes and distorted spheres) and particle species (Cu⁰ and Cu_xO_x) depending on the amount of NaBH₄. It was also observed a homogeneous distribution in all proportions of rGO:Cu studied. The average transmittance of the thin films is from 93% to 550 nm. These films were used for the electrodeposition of CuHCF, different parameters (pH, potential range and scanning speed) were studied and the ideal electrodeposition conditions were found: pH 2, 0.0 to 1.0 V and 50 mV s⁻¹.



¹ PAOLELLA, A. et al. *Journal of Materials Chemistry A*, v. 5, n. 36, p. 18919-18932, 2017;

² LUO, M. et al. *Journal of Solid State Electrochemistry*, v. 19, n. 6, p. 1621-1631, 2015;

³ GUO, M. et al. *Royal Society of Chemistry Advances*, v. 6, n. 56, p. 50587-50594, 2016;

⁴ NASROLLAHZADEH, M. et al. *Royal Society of Chemistry Advances*, v. 5, n. 14, p. 10782-10789, 2015.

Agradecimentos/Acknowledgments

CNPq, CAPES and INCT-Nanocarbon for financial support.

42ª Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química: Eixos Mobilizadores em Química

Hydrolytic activity of a bioinspired dinuclear Mn^{III}Mn^{II} complex

Edinara Luiz (PG),^{1*} Fernando Roberto Xavier (PQ),² Rosely Aparecida Peralta (PQ)¹

edinaraluiz@hotmail.com

¹Departamento de Química, UFSC;² Departamento de Química, UDESC.

Keywords: Manganese, Hydrolase, catalysis.

Highlights

A dinuclear and heterovalent manganese complex was synthesized. The complex was characterized by X-ray diffraction. Preliminary kinetic tests showed hydrolytic activity of the model substrate 2,4-BDNPP.

Abstract

The number of researchs related to DNA cleavage with the aim of finding new antitumor drugs has been increasing. One way to achieve this is to accelerate the breakage of phosphodiester bonds, which in biological systems are catalyzed by enzymes called hydrolases (or nucleases, when the P-O bond is in nucleic acid).¹ An example of a well-known hydrolase is purple acid phosphatase, which Neves et al. (2007) developed an excellent mimetic model,² using a similar ligand employed in this work, wich one also demonstrated good results as a catalytic mimetic of this enzyme when complexed with several metals.^{3,4}

Herein we evaluate the use of a dinuclear manganese (Mn^{III}Mn^{II}) metal complex in the hydrolysis of the model substrate 2,4-bdnpp. Hence, it was possible to synthesize and characterize the complex by several techniques, such as single crystal x ray diffraction (Figure 1).

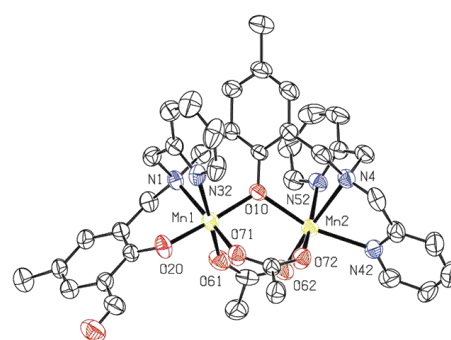


Figure 1 - Crystalline structure of the cation complex.

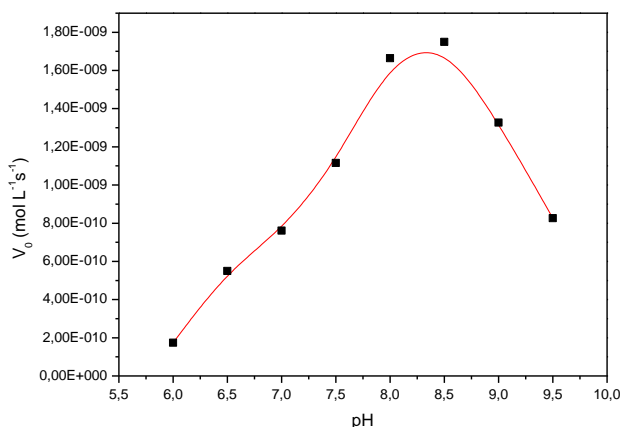


Figure 2 - pH profile plot of complex with substrate excess.

To evaluate the ability of this complex as a catalyst in the cleavage of P-O bonds, kinetic assays using bis-2,4-dinitrophenylphosphate (BDNPP) are underway. The analysis is performed by UV-Vis spectrophotometry, where the wavelength of 400 nm is monitored, observing the increase of the band referring to 2,4-dinitrophenolate, the product released in the hydrolysis. For more appreciable results, a study of pH effect under substrate excess was performed and the data were treated by the initial rates method. In the graph shown in Figure 2 it is possible to observe that the complex shows more evident catalytic activity between pHs 7-9. The determination of the initial rates as a function of substrate concentration will be performed at pH 7.5 (biological pH with higher catalytic activity) to better understand the catalytic behavior and obtain kinetic values.

¹ Xavier, F.R; Neves, A. *Polyhedron*. **2016**,109, 59.

² Neves, A. et al. *Am. Chem. Soc.* **2007**, 129, 7486.

³ Souza, B. de et al. *Inorg. Chem.* **2013**, 52, 3594.

⁴ Silva, G. A. dos S. *Dalton trans.* **2017**, 46, 11380.

Acknowledgments

UFSC, CNPq, Capes and FAPESC

Área: MED

Nº de Inscrição: 00741

Synthesis and promising antitumoral evaluation of 2-pyridinylhydrazone derivatives

Gabriela Elias Pereira (IC),^{1,2} Alessandra Campbell Pinheiro (PQ),¹ Cristiane França da Costa (PQ),¹ Marcus Vinícius Nora de Souza (PQ).^{1*}

gabriela.e.97@gmail.com; marcus.nora@far.fiocruz.br

¹Laboratório de síntese de substâncias no combate a doenças tropicais - SSCDT, Farmanguinhos/FIOCRUZ;

²Instituto de Química, UFRJ

Keywords: *cancer, hydrazone, pyridine, 2-pyridinylhydrazones*

Highlights

- The cytotoxic potential against four cancer cell lines of 2-pyridinylhydrazone derivatives have been investigated;
- The most active compound, picolinaldehyde 2-pyridinylhydrazone, exhibited an IC₅₀ value of 0.96µM, showing comparable cytotoxic effect to doxorubicin against human prostate cancer cell line.

Abstract

Fourteen 2-pyridinylhydrazones derivatives have been synthesized and evaluated for their cytotoxic potential against four cancer cell lines using the MTT assay. For the synthesis of planned 2-pyridinylhydrazone derivatives it was employed commercial 2-pyridinylhydrazine and appropriate benzaldehydes, previously selected by their cytotoxic activities against cancer cell lines in earlier studies of our group, in ethanol at room temperature for 3-48 hours. The compounds were obtained in 37-89% yields.

Selected compounds defined as at least moderately active at this preliminary test were tested *in vitro* against four human cancer cell lines: HCT-116 (colon), PC3 (prostate), SF-295 (glioblastoma) and HL-60 (leukemia) using the MTT assay.

The most active compound, picolinaldehyde 2-pyridinylhydrazone, exhibited an IC₅₀ value of 0.96µM, showing comparable cytotoxic effect to doxorubicin against human prostate cancer cell line. The sub-micromolar range activity of this derivative is a desirable feature for further development of this compound.

The structure-activity relationship (SAR) analysis indicated that the number, the positions and the type of substituents attached into the aromatic ring are critical for the biological activity. In the case of the most active compound of this series, the position of the nitrogen into the ring seems to be critical for the biological activity, which could be related with its potential to form coordination complexes.

Agradecimentos/Acknowledgments

The authors are grateful to the Brazilian agency CNPq (Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico) for fellowships and financial support.

Área: ORG

Nº de Inscrição: 000742

Bent-shaped liquid crystals derived from (1*E*,4*E*)-1,5-bis(4-hydroxyphenyl)penta-1,4-dien-3-one core.

Matheus Julian Cruz Gomes¹ (IC), **Eduard Westphal**^{1*} (PQ).

matheus.julian.gomes@gmail.com; eduardw@utfpr.edu.br

¹Departamento Acadêmico de Química e Biologia, UTFPR, Curitiba, Brasil

Palavras Chave: Liquid Crystal, Bent-shaped, Organic Synthesis, Enone, Aldol condensation.

Highlights

Bent-shaped liquid crystals show intermediate properties between solid and liquid state, a complex molecular arrangement and potential applicability in devices with fast switching response.

Resumo/Abstract

Liquid crystals (LCs) are substances that show simultaneously fluidity - characteristic of liquid state - and molecular organization and anisotropy - characteristic of the solid state. This combination results in unique properties, which cannot be found in any other state, making LCs very interesting in scientific and technological field.¹ Among the LCs, a group known as bent-shaped have received increasing attention due to its specific molecular structure, which can generate new and complex forms of molecular organization and properties, like ferroelectricity.² Therefore, the objective of this work was to synthesize and investigate new bent-shaped LCs derived from the (1*E*,4*E*)-1,5-bis(4-hydroxyphenyl)penta-1,4-dien-3-one core (**Figure 1**).

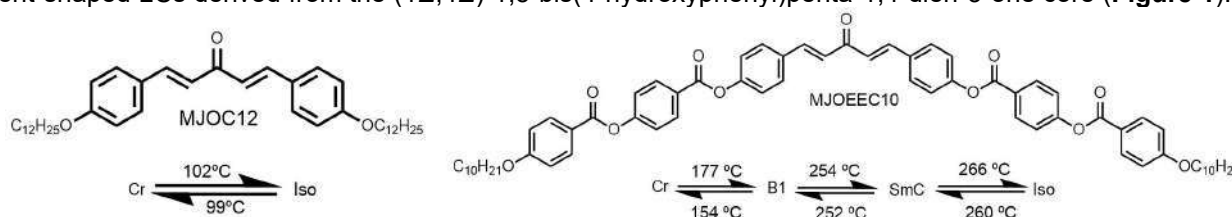


Figure 1: Structure of **MJOC12** and **MJOEEC10**, their phase transitions and respective temperatures.

This core was synthesized through an aldol condensation between 4-hydroxybenzaldehyde and acetone in acid medium. A direct alkylation reaction of the core generated the product **MJOC12**, while the esterification generated **MJOEEC10**, both having their structure and purity confirmed by ¹H NMR. The thermal stability of the products was investigated through TGA measurements. For both products, good results were found, with decomposition process starting at temperatures above 240 °C (**MJOC12**) and 280 °C (**MJOEEC10**). Subsequently, the liquid-crystalline properties of the products were investigated by POM and DSC, being the results summarized in **Figure 1**. It was possible to observe that the compound **MJOC12** did not present liquid crystalline characteristics, melting directly to the liquid state at 102 °C. On the other hand, the product **MJOEEC10** presented a complex polymorphism, with a SmC mesophase at high temperatures and a B1 at lower temperatures. This behavior is typically observed in bent-shape liquid crystals, demonstrating the success in planning this kind of materials. Since only the longest molecule (**MJOEEC10**) presented liquid-crystalline behavior, it is demonstrated that a minimum size of the bent aromatic core is required for stabilization of mesophases. Currently, new molecules with different sizes and number of terminal chains are being prepared to investigate their influence over the thermal and liquid crystalline properties.

¹ J. W. Goodby, P. J. Collings, T. Kato, C. Tschierske, H. F. Gleeson and P. Raynes, Handbook of Liquid Crystals, 2nd Ed., Wiley-VCH, Weinheim 2014.

² R. A. Reddy and C. Tschierske, J. Mater. Chem., 2006, 16, 907-961.

Acknowledgments



Green synthesis of 2,3-diphenylquinoxalines.

Lucas Bustamante (IC),¹ Diogo Müller de Oliveira (IC),¹ Luiz Antonio Mazzini Fontoura (PQ),^{1*} Dennis Russowsky (PQ)²

bustamante.farma@gmail.com; lmazzini@uol.com

¹Centro de Pesquisa em Produto e Desenvolvimento (CEPPED), Universidade Luterana do Brasil (ULBRA), Departamento de Química Orgânica, Universidade Federal do Rio Grande do Sul (UFRGS).

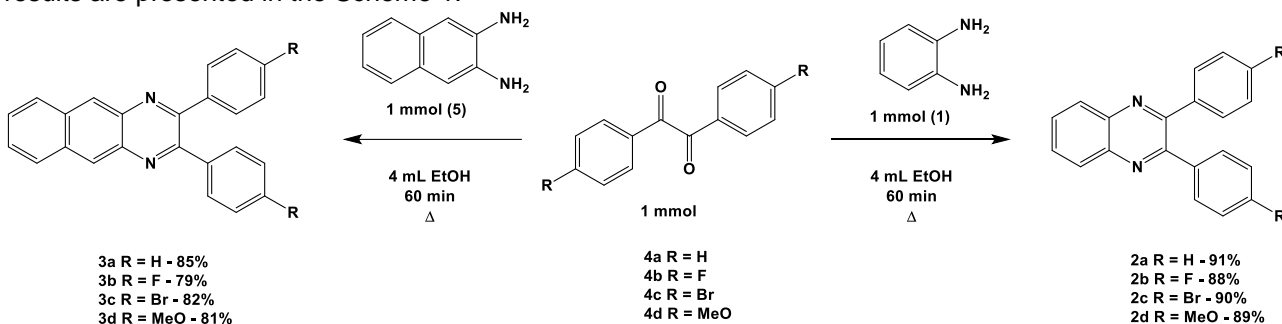
Palavras Chave: quinoxaline, benzo[g]quinoxaline, benzil, heterocycles, green chemistry.

Highlights

2,3-diphenylquinoxalines are synthesized under mild and green conditions, short time, and high yield. Uncatalyzed preparation of quinoxalines in green experimental conditions.

Abstract

Quinoxalines are aromatic heterocycles structurally consisting of a phenylene ring condensed to a pyrazine moiety. This class of compounds has been calling attention due to the pharmacological activities and has been applied as antimicrobial, antiproliferative, and antidepressant. Quinoxaline can be synthesized from *o*-phenylenediamine (**1**) or its derivatives and a 1,2-diketone, often in the presence of a catalyst.^{1,2} Here, we described the uncatalyzed syntheses and the characterization of 2,3-diphenylquinoxaline (**2a**), 2,3-diphenylbenzo[g]quinoxaline (**3a**), and derivatives from benzils (**4a-d**). The experimental conditions and the results are presented in the Scheme 1.



Scheme 1 – Green synthesis of 2,3-diphenylquinoxaline (**2a**) and derivatives.

Reactions were carried out under ethanol mild reflux for 60 min, and the products isolated by filtration after water addition. Products structures were confirmed by ¹H and ¹³C NMR, COSY, HSQC, IR, and MS.

¹Ajani, O. O.; *European J. Med. Chem* **2014**, *85*, 688.

²Pereira, J. A.; *European J. Med. Chem* **2015**, *97*, 664.

Acknowledgments

FAPERGS, CNPq

A 8-step approach towards the synthesis of 3-Hydroxykynurenine

Thiago dos Santos (PG),¹ Valter E. Murie (PG),¹ Giuliano C. Clososki (PQ)¹.

gclososki@cfcrp.usp.br; thiagosantos@usp.br

¹Núcleo de Pesquisa em Produtos Naturais e Sintéticos, Faculdade de Ciências Farmacêuticas, Universidade de São Paulo – Ribeirão Preto, SP 14040-903, Brazil

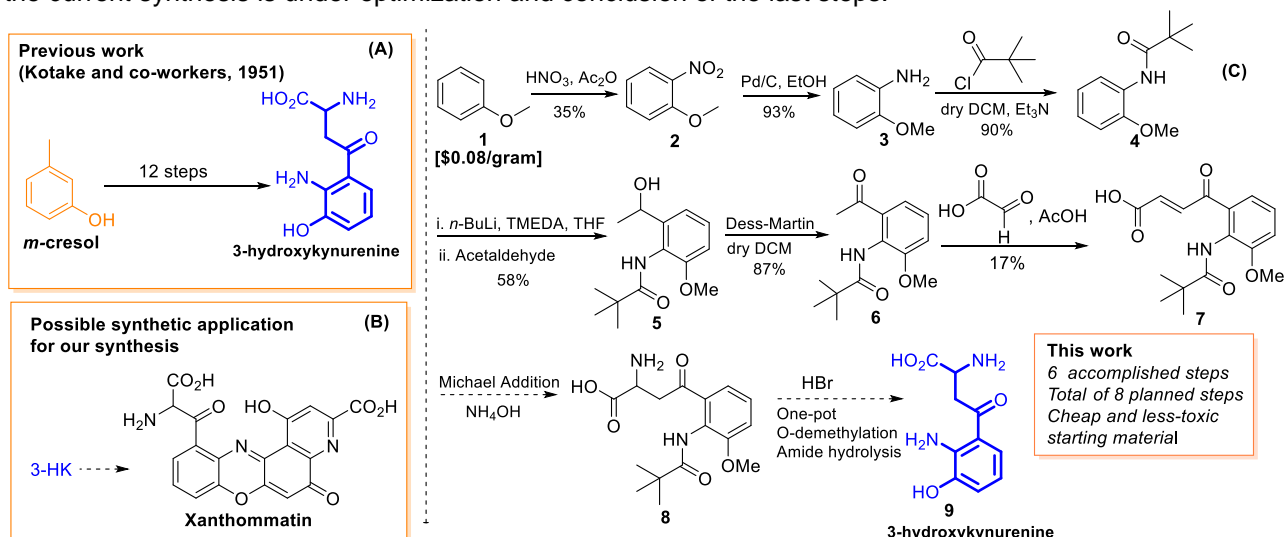
Keywords: Total synthesis, 3-hydroxykynurenine, regioselective metalation, trypanocidal activity, Xanthommatin.

Highlights

Total synthesis of 3-Hydroxykynurenine. 3-HK displays trypanocidal activity. 8-step synthetic route. Key-intermediate for the synthesis of Xanthommatin.

Abstract

Derived from the catabolism of tryptophan, 3-Hydroxykynurenine (3-HK) is an important neuroactive compound with antioxidant properties, blocking lipid peroxidation and inhibiting peroxy radical-mediated oxidation of phosphatidylcholine, and prooxidant ones (ROS production).¹ Additionally, 3-HK displays trypanocidal activity at micromolar range against trypomastigotes and amastigotes forms of *Trypanosoma cruzi*.² The first report of the total synthesis of 3-HK starting with *m*-cresol in twelve steps comes from Kotake and coworkers in 1951 (**Scheme 1a**).³ Considering the biological potential of 3-HK with interest in its derivatives and appliance for the synthesis of Xanthommatin (**Scheme 1b**), a natural pigment present in arthropods and cephalopods of medicinal interest, we have devoted efforts to develop a shorter and reasonable-yield synthesis of this kynurenine (**Scheme 1c**). Starting with anisole **1**, a cheap and commercially available reagent/natural product, nitration was performed followed by palladium catalyzed reduction to amine **3** that further was reacted with pivaloyl chloride to furnish the desired amide **4**. An organolithium intermediate was then selectively generated and trapped with acetaldehyde leading to **5**. After, Dess-martin reagent was applied for the oxidation of **5** into the acetophenone **6** that embraced an enolization in acidic conditions in the presence of glyoxylic acid to obtain **7**. With only two steps away from accomplishing the planned route, a Michael addition will be considered with NH₄OH as NH₃ source, and bromidic acid for the one-pot O-demethylation and amide hydrolysis of **8**. All in all, the current synthesis is under optimization and conclusion of the last steps.



Scheme 1. Concise synthetic approach upon 3-HK synthesis

Acknowledgments

The authors acknowledge the important support from CNPq, CAPES, FINEP and FAPESP.

Área: ELE

(Inserir a sigla da seção científica para qual o resumo será submetido. Ex: ORG, BEA, CAT)

Nº de Inscrição: 00748

(Inserir o número de inscrição do autor que fez a submissão)

Determinação voltamétrica sequencial de cinco metais aplicada à análise de águas superficiais

Lara M. Martos (PG) e Cristiane L. Jost (PQ)*

*cristiane.jost@ufsc.br

Departamento de Química, UFSC.

Palavras Chave: Metais, Águas superficiais, Voltametria

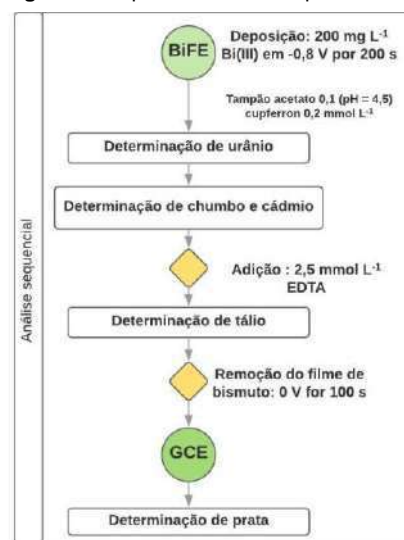
Highlights

Este trabalho descreve um método fácil, seletivo e sensível para a multi-deteção em etapas de urânio, cádmio, chumbo, tálio e prata, em águas de superfície, por voltametria.

Resumo

Amplamente utilizados em lavouras, os fertilizantes fosfatados são fontes de nutrientes para o solo; porém, como são naturalmente ricos em metais, também ocorre a incorporação desses ao meio ambiente comprometendo a qualidade do solo e de águas e causando danos ao ecossistema. A continuada aplicação desses insumos pode acarretar em um aumento na concentração e na redistribuição de elementos tóxicos ao meio ambiente. Esses elementos podem ser transferidos para a cadeia alimentar através do consumo de plantas cultivadas no solo contaminado e até mesmo da ingestão de águas contaminadas em locais próximos a essas lavouras. Uma vez que a presença de metais tóxicos está relacionada à composição do fertilizante, é de extrema importância a conscientização e o desenvolvimento de métodos que sejam capazes de permitir a determinação desses metais de forma simples e rápida, com baixo custo, elevada sensibilidade e seletividade. Neste sentido, se desenvolveu um método onde urânio, cádmio, chumbo, tálio e prata foram determinados em etapas de multi-deteção pelo emprego de apenas uma alíquota de amostra, implicando em uma menor quantidade de resíduos. Ainda, envolvendo um princípio de Química verde, optou-se por utilizar um eletrodo *eco-friendly*, o eletrodo de filme de bismuto *ex situ*. Os passos para a determinação dos cinco metais tóxicos em uma análise sequencial são resumidos na Figura 1. O método de multi-deteção passou pelo processo de validação e a exatidão foi comprovada com sucesso utilizando materiais de referências certificados para fertilizantes – SRM 693 – e para água – SRM 1643e. O método foi aplicado a amostras de água de superfície da Lagoa de Ibituba (Imbituba-SC), Lagoa do Peri (Florianópolis-SC) e Rio Iguaçu (Curitiba-PR). As amostras analisadas atendem à legislação para águas doces de Classe 3 do CONAMA. O método proposto se apresenta como uma alternativa economicamente acessível e promissora na determinação de urânio, cádmio, chumbo, tálio e prata em águas contaminadas fornecendo características como baixos limites de detecção, seletividade, exatidão, precisão e possibilidade de determinação *in loco*.

Figura 1: Etapas da análise sequencial.



Agradecimentos

As autoras agradecem ao Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq) - MCTI/CNPq/Universal 14/2014 n. 446757/2014-4 e à Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior (CAPES) pelo suporte financeiro.

Área: ANA

Nº de Inscrição: 00749

Análise de Componentes Principais para Avaliação da Solubilidade de Fe, Zn, Cu, Mn, K, Mg e Ca em Extratos Aquosos de Amostras de Café Convencionais e Orgânicos

João B. S. Espinelli Junior (PG) ¹, Guilherme V. B. M. Duarte da Silva (IC) ¹, Renan Branco Bastos (IC) ¹, Eliana B. Furlong (PQ) ² e Rodolfo Carapelli (PQ) ¹.

junior.espinelli@yahoo.com.br

¹Laboratório de Eletro Espectro Analítica, Escola de Química e Alimentos, Universidade Federal do Rio Grande

²Laboratório de Análise de Micotoxinas e Ciência de Alimentos, Escola de Química e Alimentos, Universidade Federal do Rio Grande.

Palavras Chave: PCA, Minerais, Café, Cultivo Orgânico

Highlights

Principal Component Analysis for Solubility Evaluation of Fe, Zn, Cu, Mn, K, Mg and Ca in Aqueous Extracts of Coffee

- Evaluation of solubility of Fe, Zn, Cu, Mn, K, Mg and Ca;
- Evaluation of the influence of the crop in solubility of elements;
- Identification of the elements responsible for characterizing the crop;

Resumo/Abstract

Diferentes variáveis como terra, região de plantio, manejo e condições climáticas influenciam a qualidade da bebida produzida a partir do grão de café, bebida consumida mundialmente e que pode ser considerada uma importante fonte de minerais essenciais ao consumo humano. Neste trabalho através da análise de componentes principais, realizou-se a avaliação da diferença dos modos de manejo convencional e orgânico no perfil de minerais em extratos aquosos de cafés 100% arábicos torrados e moídos. A determinação dos elementos foi realizada simulando o preparo doméstico da bebida, utilizando-se 12 amostras originárias de manejo convencional e 9 de manejo orgânico. A determinação dos elementos procedeu através de espectrometria de absorção atômica com atomização por chama. O desempenho analítico foi garantido através de um estudo de fortificação que apresentou valores entre 90 e 110%. A análise de componentes principais indicou a influência do manejo no perfil dos minerais presentes nos extratos aquosos, sendo que os elementos Fe, Mn, K, Mg e Ca apresentaram maiores concentrações nas amostras orgânicas. Fatores como formação de complexos solúveis e menores teores de fosfato podem justificar essa observação. O elemento Zn demonstrou comportamento intermediário entre os grupos sugerindo uma maior relação deste elemento com compostos formados durante as reações de Maillard do que com o processo de manejo da planta. Por fim o Cu demonstrou ser caracterizador do cultivo convencional, comportamento associado a contaminação de fertilizantes e pesticidas por este elemento.

AVALIAÇÃO DO MÉTODO DE CALIBRAÇÃO PARA DETERMINAÇÃO DO TEOR DE HISTAMINA EM AMOSTRAS DE PESCADO

Daniele Z. Valim (IC) ^{1*}, João B. S. Espinelli Junior (PG) ¹, Michele M. de Souza (PQ) ¹, Rodolfo Carapelli (PQ) ¹.

danizarnottvalim@gmail.com

Laboratório de Eletro Espectro Analítica, Escola de Química e Alimentos, Universidade Federal do Rio Grande

Palavras Chave: *Pescado, Histamina, Amina biogênica, Fluorescência.*

Highlights

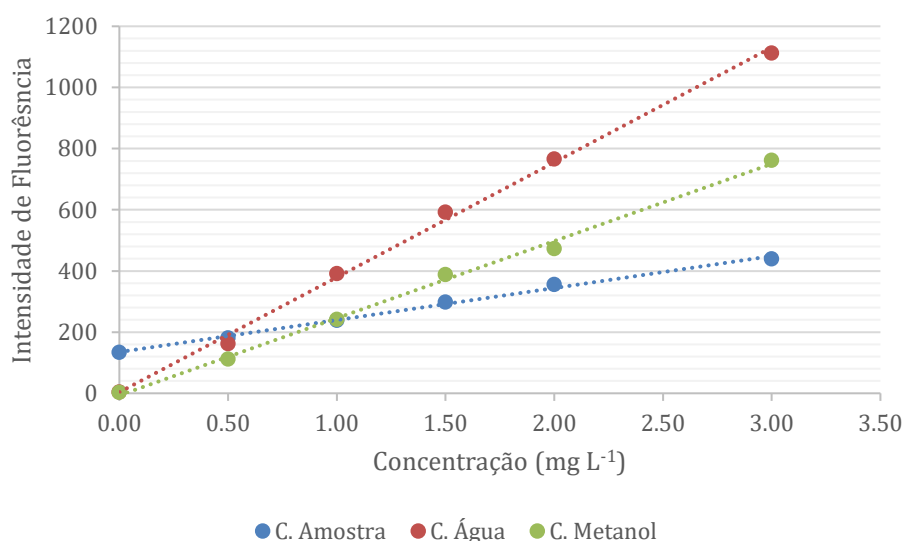
Content histamine's evaluation in fish samples from artisanal fishing in south region of Rio Grande do Sul.

- Content histamine's evaluation in different kind of fish species obtained in fishermen's cooperatives, based on the limit established in the Brazilian legislation, by Molecular Fluorescence Spectrometry.

Resumo/Abstract

Aminas biogênicas, são compostos formados principalmente pela atividade bacteriana sobre os aminoácidos determinadas através de espectrofluorimetria, porém sofre influência da variabilidade da matriz, tornando necessário avaliar o método de quantificação. O objetivo deste trabalho é avaliar o efeito da matriz através da determinação de histamina por adição de padrão em amostras de pescado. A extração das aminas biogênicas foi realizada na proporção 1 : 10 (m v⁻¹) com metanol. Para quantificação se utilizou uma curva de calibração 0 a 3 mg L⁻¹. O efeito de matriz nas amostras, apontou valores de 72,1 ± 2,8% à 91,7 ± 0,7% frente uma curva em água, uma curva compatibilizada no solvente extrator, os valores foram entre 58,5 ± 4,1% à 87,6 ± 1,0%. Comparando-se o efeito de matriz para calibração com curvas em água e metanol (figura 1) pela análise de variância ao nível de 95% de significância é constatado que independente do solvente utilizado para construção de curvas de calibração externa não é possível a determinação de aminas biogênicas nas amostras. Estudos de fortificação em amostras de linguado e peixe rei, utilizando adição de padrão como meio de calibração demonstraram recuperações de 88 a 105% o que demonstra o bom desempenho da quantificação por adição de padrão nas amostras. A aplicabilidade do método também foi avaliada pela análise de amostras comerciais de linguado, abrótea, peixe rei e traíra que apresentaram valores entre 10 e 600 mg kg⁻¹ de aminas biogênicas.

Figura 1. Comparação entre as Curvas de Calibração Construídas na Amostra, em Água e Metanol



Área: AMB

Nº de Inscrição: 00752

Evaluation of 2,4 D drift occurrence through foliar determination of the herbicide and metabolites by LC-MS/MS and GC-MS/MS

Osmar Damian Prestes (PQ),¹ Lucila Cendon Ribeiro (PG),¹ Pimpennelli Jonco dos Santos (PG),¹ Magali Kemmerich (PQ),¹ Marisa Demarco (PG),¹ Martha Bohrer Adaime (PQ),¹ Renato Zanella^{1*}(PQ)

¹Laboratory of Pesticides Residues Analysis, Chemistry Department, Federal University of Santa Maria, 97105-900 Santa Maria, RS - Brazil

Palavras Chave: Pesticides drift, Sample preparation, LC-MS/MS, GC-MS/MS

Highlights

Easy and effect sample preparation method for 2,4 D and metabolites determination. LC-MS/MS and GC-MS/MS analyses provided satisfactory selectivity and sensitivity. The compounds showed method LOQ values of 10 µg kg⁻¹.

Resumo/Abstract

Nowadays, aiming to achieve high productivity, repeated applications of pesticides is a current practice; however, inappropriate application, especially of herbicides, can lead to crop damages. The occurrence of drift during application or volatilization can affect other crops, increasing the amount of damage. Monitoring of pesticide residues in plants is increasing and over the last years about 25% of the analyses provided by the Laboratory of Pesticide Residues Analysis from the Federal University of Santa Maria, in Brazil, were related to pesticide residues analyses, especially of herbicides, in different plants. Therefore, it is very important to develop very sensitive and selective methods of analysis for determination of pesticides and related metabolites in different plants. One of the more problematic herbicide is the 2,4-D that is widely used in several crops, such as soybean and wheat, as well as in pastures. Field studies and observations indicate that 2,4-D drift can cause damage to other crops, such as grapes, even though several kilometers from the site of application. In some cities of Rio Grande do Sul (RS), Brazil, grape producers have observed that the leaves of the vines have presented characteristic lesions of 2,4-D drift. Since the production of grapes are being highly affected by the occurrence of pesticide drift, the objective of this work was to develop and validate a method for the determination of 2,4-D and metabolites (methyl ester and butyl ester) in grape leaves. The proposed method is based on a modified QuEChERS procedure for sample preparation followed by the determination of the compounds using liquid chromatography coupled to tandem mass spectrometry (LC-MS/MS) and gas chromatography coupled to tandem mass spectrometry (GC-MS/MS). The developed method was validated following the SANTE guideline and is efficient and reliable for the determination of these compounds in grape leaves at low levels. More than 60 samples from different RS cities were analyzed, and the 2,4-D concentration ranged from 10.5 to 46.7 µg kg⁻¹, evidencing the drift occurrence of this herbicide.

Agradecimentos/Acknowledgments

UFSM, CAPES, CNPq and Agilent Technologies

Área: ORG

(Inserir a sigla da seção científica para qual o resumo será submetido. Ex: ORG, BEA, CAT)

Nº de Inscrição: 00753

(Inserir o número de inscrição do autor que fez a submissão)

Synthesis and photophysics of differently substituted 2,5-diaryl selenophenes

Helena D. de Salles (PG)¹, Douglas B. Paixão (PG)¹, Felipe L. Coelho (PQ)¹, Daniel S. Rampon (PQ)² and Paulo H. Schneider (PQ)^{1*}

h_salles@yahoo.com.br; paulos@iq.ufrgs.br

¹Institute of Chemistry, Universidade Federal do Rio Grande do Sul – UFRGS, Brazil; ²Departament of Chemistry, Universidade Federal do Paraná – UFPR, Brazil

Keywords: selenophene, superbasic media, cyclization, fluorescence.

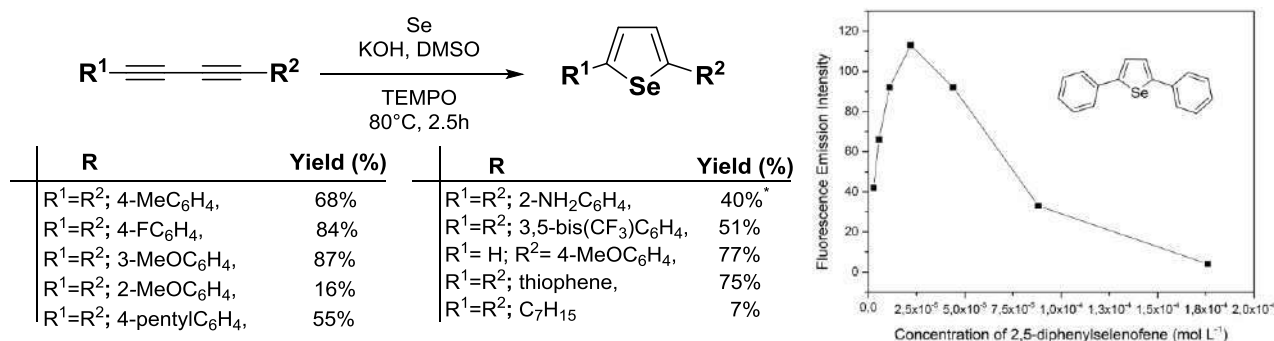
Highlights

One-pot cyclization from elemental selenium and diynes.
DMSO/KOH superbasic media leading to 2,5-diaryl selenophenes.
Photophysical properties suggest fluorescence emission dependent on aggregation.

Resumo/Abstract

Thiophene is a widely studied heterocycle, found in the structure of biologically active compounds which has also applications on optical materials such as OLEDs and fluorescent sensors.¹ On the other hand, there are only few reports about the analogue heterocycle selenophene, concerning its synthesis, biological activity and optical properties.² Herein we report a simple approach for the synthesis of a series of 2,5-dissubstituted selenophenes from diynes in superbasic media and their optical properties.

Starting from previously prepared 1,4-diphenyl-1,3-butadiyne, it was reacted with elemental selenium in DMSO/KOH media at different temperatures. Optimized conditions yielded the corresponding 2,5-diphenylselenophene in 84% at room temperature, after 4h. Similar results were obtained in higher temperatures and reduced times, using a free radical scavenger (TEMPO). When aryl substituted diynes were used, the temperature was raised to 80°C for solubility reasons. The photophysical study of the 2,5-dissubstituted selenophenes in dichloromethane revealed an aggregation-caused quenching (ACQ) effect which is influenced by substituents. The compounds present absorption maxima located in UV-Vis region and fluorescence emission in the blue to green region.



Scheme 1. Reaction scope (left) and fluorescence emission in different concentration (right).

¹ S. C. Rasmussem, S. J. Evenson, C. B. McCausland *Chem. Comm.* **2015**, 51, 4528

² D. S. Rampon; L. A. Wessjohan; P. H. Schneider *J. Org. Chem.* **2014**, 79, 5987.

Agradecimentos/Acknowledgments



Área: FIS

Nº de Inscrição: 00755

Hidrogéis compósitos de goma arábica reforçados com fibra de madeira para liberação de fósforo

Samantha E. S. Artifon (IC),¹ Cassiele T. Cesco (IC)¹, Derval dos S. Rosa (PQ)², Alexandre T. Paulino (PQ)¹

Emails: samantha.artifon@gmail.com; alexandre.paulino@udesc.br

¹Departamento de Engenharia de Alimentos e Engenharia Química, UDESC, Br. 282, Km 574, Pinhalzinho, SC - Brasil.

²Universidade Federal do ABC, Centro de Engenharia, Modelagem e Ciências Sociais Aplicadas, Avenida dos Estados, 5001 – Bloco A, Campus Santo André, Santo André, SP – Brasil.

Palavras Chave: *Hibrogel, Fósforo, Eucalipto, Pinos.*

Highlights

Arabic gum-based hydrogel reinforced with wood fiber was synthesized. Controlled release studies of phosphorus from Arabic gum-based hydrogel were satisfactory. Wood fiber improves the mechanical resistance of an Arabic gum-based hydrogel.

Resumo/Abstract

A liberação de insumos agrícolas a partir de hidrogéis têm sido de grande interesse para a agricultura. As vantagens do uso de hidrogéis constituídos de polissacarídeos naturais estão relacionadas à atoxicidade, biodegradabilidade, alta capacidade de absorção de água em um curto intervalo de tempo e capacidade de liberação controlada.¹ A liberação de insumos contendo NPK é de suma importância pois essa formulação contém os três principais nutrientes para as plantas: nitrogênio, fósforo e potássio. O hidrogel constituído de goma arábica, polissacarídeo biodegradável encontrado em abundância na natureza, é um veículo viável para os processos de liberação. O hidrogel constituído de goma arábica foi sintetizado pela solubilização de goma arábica purificada em água deionizada, modificação do polissacarídeo purificado com metacrilato de glicidila e posterior reação de reticulação em presença de acrilamida, usando persulfato de potássio como iniciador. Foram adicionadas durante as sínteses diferentes quantidades de fibras de eucalipto e/ou pinos para aumentar a resistência mecânica e formação de um compósito. Inicialmente, foram testados 5 e 10 % de fibras. O encapsulamento de NPK no hidrogel foi realizado in situ para posteriores estudos de liberação controlada de fósforo. A liberação controlada de fósforo a partir do hidrogel foi realizada em dissolutor e a concentração de fósforo em solução aquosa foi determinada pelo método do ácido ascórbico de acordo com o procedimento descrito no Standard Methods, protocolo 4500-P E. Esse método colorimétrico é baseado na reação do molibdato de amônio em meio ácido com íons ortofosfato, que forma o complexo fosfomolibdato, reduzido pelo ácido ascórbico e catalisado pelo tartarato duplo de antimônio de potássio. A determinação de fósforo foi realizada em um comprimento de onda de 880 nm.² A presença das fibras no hidrogel não alterou a capacidade de liberação do fósforo. A taxa de liberação de fósforo aumentou com o aumento do tempo, atingindo o equilíbrio de liberação após 1440 min. Com isso, conclui-se que a inserção de 5 ou 10 % de fibras nas sínteses dos hidrogéis constituídos de goma arábica não interfere na taxa de liberação de fósforo. No entanto, a presença de fibras aumenta a resistência mecânica do compósito final. Observou-se que a cinética de liberação de fósforo a partir dos hidrogéis compósitos foi muito rápida nos primeiros minutos de contato, diminuindo com o aumento do tempo de liberação. Em geral, hidrogéis constituídos de goma arábica modificada e hidrogéis compósitos constituídos de goma arábica modificada, reforçados com fibras de madeira, são excelentes matrizes para os processos de imobilização e liberação controlada de nutrientes agrícolas em solos, além da possibilidade de umidificação de solos desertificados pela alta capacidade de absorção e liberação de água.

Agradecimentos/Acknowledgments

CAPES, CNPq, FAPESC

¹AOUADA, Fauze Ahmad. **Síntese e caracterização de hidrogéis de poli(acrilamida) e metilcelulose para liberação controlada de pesticidas**. 2009. 141 f. Tese (Doutorado) - Curso de Físico-química, Universidade Federal de São Carlos, São Carlos, 2009.

²DELLAGIUSTINA, Antônio. **Determinação das concentrações de nitrogênio e fósforo dissolvidos em diferentes locais do rio Itajaí-açu**. 2000. 92 f. Dissertação (Mestrado) - Curso de Química Analítica, Universidade Federal de Santa Catarina, Florianópolis, 2000.

42ª Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química: Eixos Mobilizadores em Química

Hidrogéis de goma-arábica modificada reforçados com fibras de eucalipto e pinos

Cassiele Taffarel Cesco (IC),¹ Samantha Emanuella Sghedoni Artifon (IC),¹ Derval dos Santos Rosa (PQ),² Alexandre Tadeu Paulino (PQ)^{2*}

cassi.taffarel@hotmail.com; alexandre.paulino@udesc.br*

¹Departamento de Engenharia de Alimentos e Engenharia Química; Br 282, km 574, CEP 89870-000, Pinhalzinho SC-Brasil; ²Universidade Federal do ABC, Centro de Engenharia, Modelagem e Ciências Sociais Aplicadas, Avenida dos Estados, 5001 – Bloco A, Campus Santo André, Santa Teresinha, CEP: 09210-580, Santo André, SP – Brasil.

Palavras Chave: hidrogel, goma-arábica, eucalipto, pinos.

Highlights

Modified Arabic-gum hydrogels reinforced with eucalyptus and pins fibers. Addition of eucalyptus and pins fibers in modified arabic-gum hydrogees for the improvement of mechanical resistance. Swelling tests and analyzes by SEM and by FTIR were made.

Resumo/Abstract

Hidrogéis são redes poliméricas tridimensionais hidrofílicas capazes de absorver grandes quantidades de água e fluidos biológicos. Esses materiais têm sido amplamente utilizados na liberação controlada de medicamentos, condicionamento do solo e tratamento de efluentes.² Hidrogéis podem ser sintetizados utilizando polissacarídeos como a goma-arábica, extraída a partir da Acácia. Este polissacarídeo pode ser eficientemente aplicado na síntese de hidrogéis.¹ Nesse trabalho, a síntese do hidrogel foi realizada solubilizando quantidades conhecidas de goma-arábica em água destilada à 60°C, sob agitação constante. O pH foi ajustado para 3,5 com ácido clorídrico com subsequente adição de metacrilato de glicidila. A reação foi mantida por 24 h. O polissacarídeo modificado (MGA) foi precipitado em etanol, seco em estufa à 60°C e solubilizado em água destilada contendo acrilamida e persulfato de potássio. Os hidrogéis foram sintetizados utilizando 5% e 10% de resíduos de eucalipto ou pinos. O hidrogel formado foi lavado em água destilada, cortado em peças e secos em estufa a 60°C. Os hidrogéis sintetizados passaram por testes de intumescimento em 4 meios: água destilada, água de abastecimento, solução tampão pH 4 e solução tampão pH 7. Os hidrogéis ficaram em contato com a solução até o tempo em que obtiveram seu equilíbrio, ou seja, que pararam de absorver o fluido do meio, com esse tempo variando de 3 minutos à 10084 minutos. No meio de água destilada, os hidrogéis que atingiram antes o equilíbrio foram ambos com adição de 5% de fibras, em torno de 2880 minutos. Para o meio de água de abastecimento e solução tampão pH 4, os hidrogéis que atingiram primeiramente seus tempos de equilíbrio foram os hidrogéis com 5% de fibra de eucalipto e o de 10% de fibra de pinos, sendo esse tempo de aproximadamente 4320 minutos e 5764 minutos respectivamente. Em meio solução tampão de pH 7, o hidrogel que atingiu antes seu tempo de equilíbrio foi o com 10% de fibra de pinos. Utilizou-se como referência os tempos de equilíbrio do hidrogel de goma-arábica sem adição de fibras, sendo seu tempo de equilíbrio em torno de 2880 minutos nos quatro meios. Percebeu-se que, mesmo o tempo de equilíbrio do hidrogel de goma-arábica sem adição de fibras ser menor, a quantidade de água absorvida pela peça foi aproximadamente o dobro das peças contendo a fibra. Além dos ensaios de intumescimento realizou-se análises por Microscopia Eletrônica de Varredura (MEV) e por Espectroscopia no Infravermelho (FTIR). As análises por MEV revelaram que as fibras diminuem a porosidade dos hidrogéis, diminuindo assim a capacidade de absorção de água da peça. As análises de FTIR confirmaram o processo de reticulação durante a síntese. Conclui-se que a adição das fibras de pinos e eucalipto durante a síntese dos hidrogéis melhorou a resistência mecânica das peças durante os testes realizados, aumentando a quantidade de fluidos biológicos nos quais podem ser aplicados.

Agradecimentos/Acknowledgments

Capes, CNPq, FAPESC.

¹WOLF, Mariane; GASPARIN, Bruna Carla; PAULINO, Alexandre Tadeu. Hydrolysis of lactose using β -d-galactosidase immobilized in a modified Arabic gum-based hydrogel for the production of lactose-free/low-lactose milk. **International Journal Of Biological Macromolecules**, [s.l.], v. 115, p.157-164, ago. 2018. Elsevier BV.

²PAULINO, Alexandre T. et al. Smart Hydrogels Based on Modified Gum Arabic as a Potential Device for Magnetic Biomaterial. **Macromolecular Chemistry And Physics**, [s.l.], v. 211, n. 11, p.1196-1205, 6 abr. 2010. Wiley.

42ª Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química: Eixos Mobilizadores em Química

Área: QPN

Nº de Inscrição: 334136

Estudo químico do extrato etanólico do caule de *Zeyheria montana* buscando atividade inibitória frente a enzima urease.

Matheus S. de Barros (IC),¹ Lorena R. F. de Sousa (PQ),¹ Richele P. Severino (PQ),¹ Tainara F. Rosa (PG),¹ Marcos H. F. Santos (PG).¹

matheus.si.barros@gmail.com; richeleps@yahoo.com.br

¹Unidade Acadêmica Especial de Química, Universidade Federal de Goiás – Regional Catalão, Av. Dr. Lamartine P. Avelar, Catalão, Goiás, Brasil.

Palavras Chave: *Zeyheria montana*, Bignoniaceae, Urease.

Highlights

Chemical study of ethanolic extract of *Z. montana* stalk in search of inhibitory activity against urease enzyme. The chemical composition of ethanolic extract of *Z. montana* stalk afforded saccharides, flavonoids and aromatic compounds. The extract showed 78% of inhibition against urease enzyme, responsible for virulence factor of *H. pylori* bacteria.

Resumo

Helicobacter pylori é uma bactéria encontrada nas mucosas estomacais, podendo provocar infecções e úlceras nos hospedeiros. Essa bactéria produz a enzima urease, que hidrolisa a ureia presente no suco gástrico em gás carbônico e amônia, sendo esta última capaz de capturar os prótons presentes no meio, tornando o interior da bactéria neutro e resistente ao meio ácido da parede estomacal. Na busca por inibidores da enzima urease, realizou-se o estudo químico de *Zeyheria montana* (Bignoniaceae), uma espécie endêmica do cerrado brasileiro, cujos os membros da família tem mostrado diversas atividades biológicas, tais como antitumoral e antimalárica. A espécie vegetal foi coletada no município de Caldas novas/GO e o extrato etanólico do caule foi obtido por maceração em solvente a temperatura ambiente. O extrato bruto (1,0 mg/mL) foi avaliado frente a enzima urease (0,5 mg/mL), sendo a inibição medida em um espectrofotômetro através da formação de azul de indofenol em 600 nm. A percentagem de inibição foi calculada realizando os experimentos em triplicata, sendo o controle negativo DMSO 2 %. A análise do perfil químico do extrato bruto foi realizada por HPLC e UPLC-MS, ambos em fase reversa. Os resultados mostraram um perfil cromatográfico majoritariamente polar, com bandas de absorção em 217 nm e 250 nm típico de compostos aromáticos. O perfil químico apresentou picos e fragmentos com relação massa carga semelhantes a sacarídeos, flavonoides e substâncias aromáticas, tais como lapachol e ácido 3-acetoxi-4,5-dimetoxibenzoico. O extrato bruto apresentou inibição promissora de 78% frente à enzima urease, mostrando-se promissor para continuidade dos estudos.

Agradecimentos

Fundação de Apoio à Pesquisa do Estado de Goiás – FAPEG e Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico – CNPq.

Área: BIO

Nº de Inscrição: 00758

Extraction and partial characterization of lectin from *Lecythis pisonis* Camb. barks

Vitor Gonzatto (IC),¹ Elaine P. Carvalho(IC),¹ Lidiane P. Albuquerque(PQ).^{2*}

vitorgonzatto313@gmail.com; lidianealbuquerque@ufpi.edu.br

¹Departamento de Química, UFPI; ²Departamento de Bioquímica e Farmacologia, UFPI

Palavras Chave: Extração, Lectina, Cascas, *Lecythis pisonis*.

Highlights

Lectins recognize carbohydrates present on cell surfaces resulting in a range of biological properties. This work reports the characterization of a lectin from of *Lecythis pisonis* barks.

Abstract

L. pisonis barks flour was homogenized with 0.15 M NaCl. After centrifugation, the supernatant corresponded to the extract. The extract was treated with ammonium sulphate at 60% saturation. After that, the fraction (F 0-60%) was dialyzed against distilled water followed by 0.15 M NaCl. Protein concentration was determined. The hemagglutinating activity (HA) was performed using a suspension of human erythrocytes (2.5% v/v) previously treated with glutaraldehyde. For HA inhibition assay, the fraction was incubated with monosaccharides prior to the addition of erythrocyte suspension. To determinate the effects of pH variation on fraction, the HA assay was performed using buffers solution pH 5.0, 6.0, 7.0, and 8.0. The effect of temperature on fraction HA was evaluated using sample previously heated for 30 min at 30–60°C. The extract yielded a protein concentration of 9.0 mg/mL. The protein concentration of the F 0-60% was 8.0 mg/mL. The lectin preparations showed affinity with type A⁺ human erythrocytes (Table 1), and, therefore, it was the erythrocyte chosen for the other characterization tests. With the HA inhibition with carbohydrates, the sample showed affinity with galactose, mannose, fructose and lactose (Table 2). F 0-60% remained with high HA between pH 4 and 6. However, there was abrupt loss in pH 7.0 and was abolished at pH 8.0 (Table 3). HA was maintained after heating at all temperatures tested. Other tests to prove the presence of lectin as well as the biological assay are in planning.

Table 1. The hemagglutinating activity for extract and fraction of *L. pisonis* barks.

| Erythrocytes | Extract | F 0-60% |
|--------------|------------------|-----------------|
| A | 64 ⁻¹ | 4 ⁻¹ |
| B | 32 ⁻¹ | 2 ⁻¹ |
| AB | 2 ⁻¹ | 2 ⁻¹ |
| O | 32 ⁻¹ | 2 ⁻¹ |

Table 2. HA inhibition assay for F 0-60% fraction.

| Monosaccharides | 0.2 M |
|-----------------|------------------|
| Glucose | 16 ⁻¹ |
| Galactose | 0 |
| Mannose | 2 ⁻¹ |
| Fructose | 2 ⁻¹ |
| Lactose | 2 ⁻¹ |

HA was performed with human type A⁺ erythrocytes: 4⁻¹

Table 3. The effect of pH variation on the F 0-60% HA.

| pH | HA (Type A ⁺ Human) |
|----|--------------------------------|
| 4 | 128 ⁻¹ |
| 5 | 128 ⁻¹ |
| 6 | 128 ⁻¹ |
| 7 | 2 ⁻¹ |
| 8 | 0 |

HA was performed with human type A⁺ erythrocytes: 4⁻¹

Área: EDU

Nº de Inscrição: 00761

Cientifi-CIDADE e o uso de redes sociais para a divulgação científica

Camila Orsi (IC)¹, Catarinie D. Pereira (PQ)¹, Karine P. Naidek (PQ)¹, Brenno R. M. Oliveira (PQ)^{1*}.

camilaa.orsi@edu.udesc.br; brenno.oliveira@udesc.br

¹ Universidade do Estado de Santa Catarina (UDESC) – R. Paulo Malschitzki, 200, Zona Industrial Norte – Joinville/SC.

Palavras Chave: Ensino de Química, Extensão, Divulgação da ciência, Redes Sociais.

Highlights

Cientifi-CIDADE and the use of social networks for scientific dissemination.
Results of an extension program. Social networks to disseminate science and the university.

Resumo/Abstract

Com o avanço tecnológico, o uso das tecnologias da informação e comunicação (TIC's) vem crescendo nas salas de aulas. Assim, o estudo sobre utilizar esses recursos no processo ensino-aprendizagem, bem como na divulgação científica, também tem crescido. França (2005) afirma que a busca por difundir o conhecimento científico para a população, de um modo que a sociedade aceite, aprove e compreenda é a essência do que se chama "divulgação científica". Dessa forma, as mídias sociais, em espaços da internet, podem se configurar como um importante instrumento de divulgação científica, capaz de aproximar a população dos conhecimentos científicos. Diante disso, o programa de extensão "Cientifi-CIDADE: popularizando a ciência e a universidade"; da Universidade do Estado de Santa Catarina (UDESC), busca promover a divulgação científica junto a alunos de ensino médio principalmente, a fim de desmistificar conhecimentos de senso comum a partir de um olhar químico, bem como tornar mais conhecido o espaço da universidade e tudo que ocorre nela, incluindo projetos e demais atividades. Para isso, em uma de suas ações, o programa explora o uso das redes sociais. Em 2018-1 foi consolidada a rede de amigos no Instagram e Facebook a partir de uma lista das escolas de ensino médio de Joinville-SC e região. As postagens foram feitas em 2018-2 seguindo um calendário de publicações, com os temas das séries criadas pela equipe do programa: a) Memes – imagens que abordam de forma humorada situações relacionadas à Química; b) Curiosidades – imagens e textos sobre assuntos cotidianos sob a perspectiva da ciência; c) #tbt – fotos das atividades realizadas (idas nas escolas; participação dos alunos na oficina oferecida pelo programa, etc); d) Acontece na UDESC – textos e imagens que divulgam eventos e projetos que ocorrem na universidade; e) Hoje conheci um cientista – vídeos de divulgação dos trabalhos dos professores do Departamento de Química da UDESC, que em uma entrevista mais descontraída tornam a imagem do cientista mais humanizada. No presente trabalho, buscou-se analisar a receptividade das publicações por parte do público, a partir de indicadores das próprias redes sociais. O canal no YouTube (Cientifi-CIDADE UDESC) possui 18 inscritos e nele foram realizadas 7 postagens, totalizando 171 visualizações. No Instagram, o perfil (@cientificidade_udesc) é seguido por 253 usuários; foram realizadas 23 publicações, com um total de 753 curtidas. Por fim, o perfil do Facebook (@Cientificidade.udesc.CCT) conta com 1136 amigos e 127 curtidas na página, com seguidores de 5 estados diferentes e 2 países (Brasil e Estados Unidos); foram realizadas 30 postagens, com um total de 906 curtidas e 194 compartilhamentos. As séries com mais curtidas e compartilhamentos são "Hoje conheci um cientista", "Curiosidades" e "#tbt", (Instagram e Facebook). As publicações de vídeos tiveram maior número de curtidas e compartilhamentos, mostrando grande repercussão. Os resultados revelam a boa receptividade por parte do público em relação as redes sociais utilizadas, especialmente pelo pouco tempo de existência dos perfis. Embora os números absolutos do Facebook sejam superiores aos atingidos com as outras redes sociais, ressalta-se que o Instagram também se mostrou eficaz, uma vez que a razão entre quantidade de seguidores e curtidas foi de aproximadamente 2,98 enquanto que no Facebook esse valor foi de 0,80. Nesse sentido, as redes sociais parecem ser uma boa ferramenta para explorar a divulgação científica. Espera-se no ano de 2019, dar continuidade ao trabalho, incluindo novas séries, aumentando o alcance das publicações e desenvolvendo investigações sobre a aprendizagem proporcionada por esses canais de comunicação.

FRANÇA, M.S. J. Divulgação ou jornalismo? Duas formas diferentes de abordar o mesmo assunto. In: VILAS BOAS, S. (Org.). Formação e informação científica. São Paulo: Summus, 2005.

Agradecimentos/Acknowledgments

À Pró-Reitoria de Extensão, Cultura e Comunidade da Universidade do Estado de Santa Catarina.

Área: INO

(Inserir a sigla da seção científica para qual o resumo será submetido. Ex: ORG, BEA, CAT)

Nº de Inscrição: 00762

(Inserir o número de inscrição do autor que fez a submissão)

Investigação de um Complexo Cobalto(III)-Esculetina como Plataforma de Entrega Controlada de Fármacos em Ambiente Hipóxico

Marcos Vinícius Palmeira de Mello (PG),¹ Mauricio Lanznaster (PQ)^{1*}

mvpmmello@id.uff.br; ml@id.uff.br*

¹ Instituto de Química, Universidade Federal Fluminense, 24020-141, Niterói, RJ

Palavras Chave: Cobalto(III), Metalofármaco, Hipóxia, PDAH, Câncer, Cumarina.

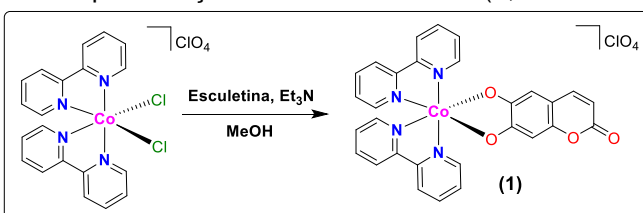
Highlights

Investigation of Cobalt(III)-Esculetin Complex as a Platform for Drug Delivery in Hypoxic Environment

A novel Co^{III}-esculetin complex was obtained, with a quasi-reversible Co³⁺/Co²⁺ redox process. Reactivity in normoxic and hypoxic tumor cells was simulated using different reducing agents and O₂ concentrations.

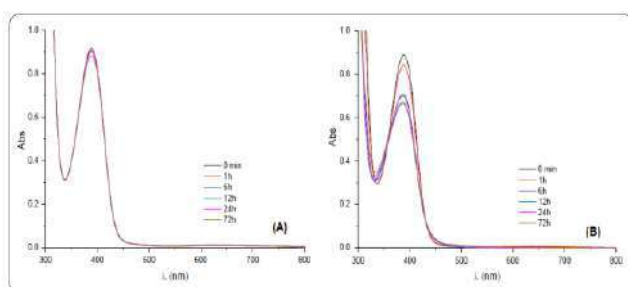
Resumo/Abstract

Regiões hipóxicas limitam tratamentos anticâncer como a quimio- e radioterapia em certos tipos de tumores sólidos.¹ No entanto, células em hipóxia podem ser utilizadas como alvos para o desenvolvimento de pró-drogas ativadas por hipóxia (PDAHs), capazes de atingir o ambiente hipóxico tumoral, liberando um fármaco seletivamente.^{2,3} Complexos de cobalto tem sido estudados como potenciais PDAHs, devido a seus dois estados de oxidação acessíveis. A coordenação do fármaco ao Co³⁺, inerte, inibe sua toxicidade e permite seu transporte pelo corpo, e a liberação do fármaco ocorre seletivamente no ambiente hipóxico, onde o metal é reduzido a sua forma +2, lábil.^{2,3} Este trabalho descreve o estudo de um novo complexo de cobalto(III)-esculetina como possível plataforma biorredutível para liberação de fármacos. O complexo **1** foi obtido pela reação entre a esculetina (6,7-dihidroxicumarina) e o complexo precursor [CoCl₂(bipy)₂]ClO₄ (Esquema 1). O complexo foi caracterizado por espectroscopias na região do IV e RMN¹H, espectrometria de massas (ESI-MS) e sua composição confirmada por análise elementar de CHN. A análise eletroquímica por voltametria cíclica (VC) em acetonitrila mostrou um processo *quasi* reversível para o par Co³⁺/Co²⁺ com E_{1/2} igual a -0,69 vs. Fc/Fc⁺.⁴ O monitoramento da solução de **1**



por espectroscopia UV-Visível em tampão PBS pH 7,4 a 37 °C sem adição de agente redutor evidenciou alta estabilidade do complexo durante 72 h (Figura 1A). Mudanças espectrais foram observadas após a adição de 10 equivalentes de agente redutor, sugerindo a possível redução do centro metálico com a consequente liberação do ligante cumarínico. Além disso, foi observado ainda que tal liberação ocorreu de modo mais eficiente com ácido ascórbico (AA) em comparação a outros redutores como ditionito de sódio, cisteína e glutatona (Figura 1B).

Figura 1. Espectros UV-Vis de **1** em tampão PBS monitorados por 72 h em pH 7.4 a 37 °C sob atmosfera inerte, (A) sem adição de agente redutor e (B) após adição de AA (10 eq).



(1) Lippard, S. J.; Graf, N. *Adv. Drug Deliv. Rev.* **2012**, 64, 993; (2) Lanznaster, M.; *et al. J. Inorg. Biochem.* **2014**, 132, 37 ; (3) Renfrew, A. Bryce, N. S.; Hambley, T. *Chem. Eur. J.* **2015**, 21, 15224; (4) Gagne, Robert. *et al. Inorg. Chem.* **1980**, 19, 2854.

Agradecimentos/Acknowledgments

CAPES, CNPq, LaReMN-UFF, LAME-UFF

Blocks for buildings with resistance to combustion from the incorporation of industrial waste

Polyana Baungarten (IC),¹ Ana Carolina de Aguiar (IC),¹ Bruno Afonso Büchele Mendonça IC,² Thiago de Alcântara Bragila (PG),³ Gabriel O. Cremona Parma (PQ),³ Rachel Faverzani Magnago(PQ).^{3*}

polyanabaungarten@gmail.com; rachelfaverzanimagno@gmail.com

¹Engenharia Química, Unisul; ²Engenharia Civil, Unisul; ³Programa de Pós-Graduação em Ciências Ambientais, Unisul.

Palavras Chave: Polyurethane, Waste, Flammable.

Highlights

SEM showed closed-cell for all composites. The material presents deceleration and extinction of the flame, in contrast to traditional materials. Input reduction of non-renewable sources.

Resumo/Abstract

Polyurethane (PU) is used in the building industry as thermal and acoustic insulation due to its excellent performance. However, PU has no fire resistance and its combustion can release toxic and lethal gases, which restricts its use. Therefore, the purpose of this study was to prepare PU and cement composites by the incorporation of flame-retardant substances (Figure 1) to ascertain the horizontal and vertical flammability and the mechanical resistance of compression. During the polycondensation reaction between polypropylene glycol and toluene-2,6-diisocyanate (2,4-TDI / 2,6-TDI, 80/20) was incorporated sludge from glass lapidation, sludge from aluminum anodising and sand, besides cement. The MEV exhibited preferably closed alveoli for the 4 specimens. The best result of the horizontal flammability test was for sand composite, flame extinction time of 3.17 s. For vertical flammability the specimen with glass sludge was not classified as non-flammable. In the mechanical strength test, the best result was for PU / cement of 0.8186 MPa, while values of 0.2785, 0.2766 and 0.1813 MPa for the sand, slurry and sludge specimen of aluminum, respectively. In general, the loads reduced the flammability because they formed a vitrified layer in the combustion and the reduction of the resistance due to reduction of the quantity of cement.

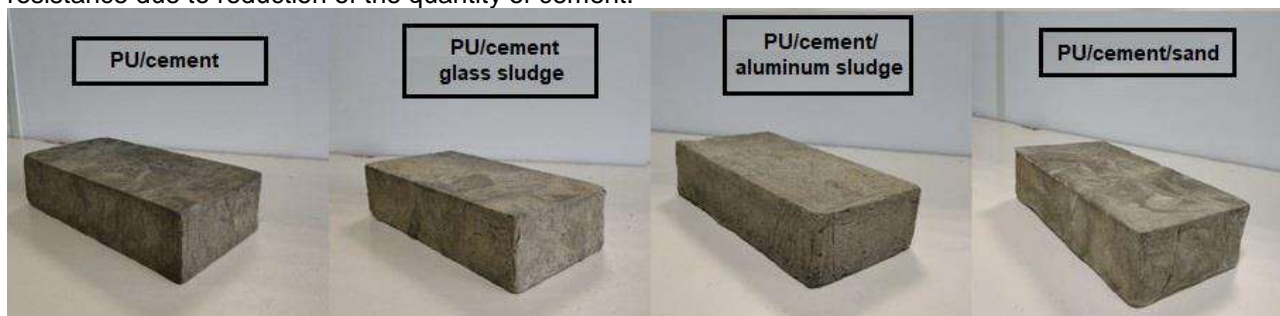


Figure 1: PU test cups with cement and glass sludge, aluminum slurry and sand, respectively.

Reference

Marques, D.V. et al., 2018. Recycled Polyethylene Terephthalate-Based Boards For Thermal-Acoustic Insulation. J. Clean. Prod. 189, 251-252.

Direct C-H Photocatalyzed Arylation of Diazines with Aryldiazonium Salts

Rodrigo C. Silva (PG),¹ Timothy J. Brocksom (PQ),¹ Kleber T. de Oliveira (PQ).^{1*}

* kleber.oliveira@ufscar.br

¹ Departamento de Química, Universidade Federal de São Carlos, UFSCar, São Carlos – SP, 13565-905, Brazil

Keywords: Photocatalysis, Arylation, Aryldiazonium Salts, N-Heteroarenes, Metal-free.

Highlights

A visible light-promoted photoarylation reaction of N-Heteroarenes with aryldiazonium salts in water has been developed without the need for photocatalysts.

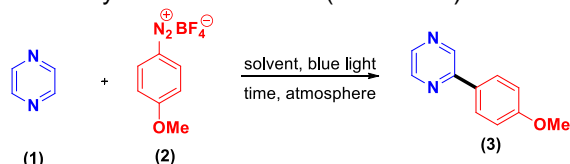
Introduction

Aryl-diazines moieties are widely found in biologically active compounds. Some blockbuster drugs contain these fragments in their structures e.g. Rosuvastatin and Imatinib.

Direct functionalization of electron-deficient N-heteroarenes through radical substitution is one of the most straightforward methods for synthesizing arylated diazines.¹ Recently, König *et al.*² reported a photocatalyst free approach in the photoarylation of aniline, suggesting the occurrence of electron donor-acceptor complexes (EDA) in the process.

Results and Discussion

Herein, we have studied the photoarylation of pyrazine (**1**) with *p*-methoxyaryldiazonium salt (**2**) under blue light irradiation (455 nm, LED, 120 W) in photocatalyst free conditions (Scheme 1).



Scheme 1: arylation of the (**1**) with (**2**) by blue light.

Initially, we built a photoreactor equipped with a timer, 4 blue LED chips (455 nm – 30 W each), and sensors of luminosity and temperature. This system was controlled by the Arduino platform (Figure 1).



Figure 1: (A) photoreactor (B) control system.

The first results are shown in Table 1, revealing: (i) the reaction does not occur in absence of light (entry 1 and 2), (ii) the reaction was not sensitive to reaction atmosphere (entry 2 and 3), (iii) a great excess of (**1**) was necessary to increase reaction yields (entry 3 to 5), and (iv) the best solvent was water (entry 4 to 8).

Table 1: Screening of reaction conditions^a

| Entry | (1) (mmol) | (2) (mmol) | Solvent | Atm | Yields ^b (%) |
|----------------|------------|------------|--------------------|--------|-------------------------|
| 1 ^c | 0.75 | 0.10 | H ₂ O | Argon | 2 |
| 2 | 0.75 | 0.10 | H ₂ O | Argon | 20 |
| 3 | 0.75 | 0.10 | H ₂ O | Oxygen | 18 |
| 4 | 1.50 | 0.10 | H ₂ O | Oxygen | 43 |
| 5 | 3.00 | 0.10 | H ₂ O | Oxygen | 59 |
| 6 | 1.50 | 0.10 | DMSO | Oxygen | 15 |
| 7 | 1.50 | 0.10 | DMF | Oxygen | 4 |
| 8 | 1.50 | 0.10 | CH ₃ CN | Oxygen | 29 |

^aReaction conditions: 0.10 mmol of (**2**), in 0.3 mL of solvent, 14 h at room temperature and 455 nm LED irradiation (120 W). ^bDetermined by ¹H NMR. ^cNo Light.

These results have motivated us to optimize this protocol in batch and start studies under continuous flow conditions, aiming at better efficiency in the process.

Conclusion

A batch visible light-promoted coupling of diazines with *p*-methoxyaryldiazonium salt in water by a possible EDA photocatalyzed approach is presented. Further studies are under development for improvements in the methodology and to gain mechanistic insights.

Acknowledgments

FAPESP (2018/00106-7 and 2018/00879-6) CNPQ and CAPES.

¹ JACS, 132, 13194-13196, 2010. ² OL, 19, 5976-5979, 2017.

Área: ANA

Nº de Inscrição: 00766

Hydrocarbon semi-quantification in petroleum by comprehensive two-dimensional gas chromatography: a rapid assessment

Dayane M. Coutinho (PG)*, Pedro A.C. Machado (IC), Daniela França (PG), Vinícius B. Peireira (TM), Bárbara M.F. Ávila (PQ), Gabriela Vanini (PQ), Débora A. Azevedo (PQ)

dmc@pos.iq.ufrj.br

Laboratório de Geoquímica Orgânica Molecular e Ambiental (LAGOA), Instituto de Química, UFRJ

Palavras Chave: *hydrocarbon classes, crude oil, semi-quantification, comprehensive two-dimensional gas chromatography.*

Highlights

Semi-quantification of hydrocarbon classes in crude oils is achieved.
Chemical characterization in crude oils was performed by GC × GC-TOFMS.
The repeatability and accuracy of group-type semi-quantification were evaluated.

Resumo/Abstract

The molecular characterization of crude oils by the semi-quantification of hydrocarbons is valuable, since it allows the prediction of the best application of this complex matrix in all the steps of the petroleum industry.¹ An essential step concerning the development of analytical methods is the estimation of the laboratory efficiency to evaluate precision and other parameters of the method. Therefore, there are few studies reporting precision and appropriate accuracy using GC×GC.³

This study consists in the qualitative and semi-quantitative chemical composition of main hydrocarbon classes in Brazilian crude oils with different °API and the evaluation of the repeatability and accuracy using comprehensive two-dimensional gas chromatography coupled to time-of-flight mass spectrometry (GC×GC-TOFMS).

A set of crude oil samples with different API gravity (°API) were analyzed via GC×GC-TOFMS aimed at the detection, identification and semi-quantification of hydrocarbon classes by total ion chromatogram (TIC). Thus, after the delimitation of the regions for each class, the summed area, culminating in a rapid hydrocarbon group-type semi-quantification, which allows application of this classification from a sample to others that contain similar profile by making only a few adjustments. The detailed group-type semi-quantification provides specific data and observations of the oils, as samples with small °API differences can present different profiles of class concentration. The recovery was excellent for the *n*-alkanes (95% to 106%) and for other hydrocarbon classes, the recovery was considered acceptable in the mean error of ± 30% for the most of them. The associated error was higher for the classes at lower concentration, such as diaromatics in petroleum P01 and P02. However, higher errors are expected given these classes presented low concentration. On the other hand, the most abundant classes have shown good precision, with RSD lower than 14%.

Thus, oils were differentiated semi-quantitatively, even when presenting similar °API. The analyses of different petroleum samples have shown that the chromatographic method is repetitive and exact for the semi-quantification of hydrocarbon classes using a single oil drop by GC×GC-TOFMS.

1 Bissada *et al.*, *Organic Geochemistry*, 95, 2016

2 Fernandes *et al.*, *Talanta*, 144, 2015

Agradecimentos/Acknowledgments

The authors thank CAPES, CNPq, FAPERJ, PETROBRAS and PIBIC UFRJ.

Área: AMB

(Inserir a sigla da seção científica para qual o resumo será submetido. Ex: ORG, BEA, CAT)

Nº de Inscrição: 00767

(Inserir o número de inscrição do autor que fez a submissão)

A highly sensitive electrochemical method for the determination of bioavailable lead in atmospheric aerosol

Habdias de A. Silva Neto (PG),¹ Thiago M. G. Cardoso (PG),¹ Wendell K. T. Coltro (PQ),¹ **Roberta C. Urban (PQ)²**

habdiasneto@hotmail.com; roberta.urban@ufscar.br

¹Instituto de Química, UFG; ²Departamento de Química, UFSCar.

Keywords: Portable sensors, Screen-printed electrodes, Environmental chemistry, Atmospheric aerosol.

Highlights

Screen-printed carbon electrodes were used to determine bioavailable Pb in atmospheric aerosol samples. Square-wave anodic stripping voltammetry offered great sensitivity, accuracy, and reliability. The reported method successfully demonstrated the ability to monitor Pb concentrations during dry and rainy seasons.

Abstract

Atmospheric aerosol or particulate matter (PM) has a huge potential to affect health and climate. The adverse effects of PM exposure on human health depend on their size and composition. Toxic metals, such as lead, are some of the constituents.¹ Conventional methods to detect lead include atomic absorption and flame emission spectroscopy, which require high cost and bulky instrumentation, generate noticeable amounts of residues and need trained technicians or users. In this current study, a practical, portable and low-cost electrochemical method is reported to determine the bioavailable lead in the PM using unmodified screen-printed carbon electrode (SPCE) based on square wave anodic stripping voltammetry. The proposed approach has provided excellent sensitivity ($21 \pm 1 \mu\text{A}/\mu\text{g L}^{-1}$) with the detection limit of $0.023 \mu\text{g L}^{-1}$, low interference from other metals (lower than 9.5%) and accuracy of ca. 90%. Moreover, the use of SPCE exhibited good stability allowing to quantify lead in atmospheric PM collected at Goiania city (GO - 2016). The achieved concentrations of lead ranged from 0.04 to 0.21 ng m^{-3} (average $0.13 \pm 0.05 \text{ ng m}^{-3}$; $n = 10$ - **Figure 1**). This average concentration was smaller than those determined in other towns of Brazil, Alenquer (PA)² and Araraquara (SP)³. Certainly, this lower concentration may be related to the difference in the extraction method procedure. Based on the reported data, the unmodified SPCE device has successfully demonstrated great selectivity and sensitivity for environmental analysis, making possible the monitoring of the bioavailable lead in PM samples.

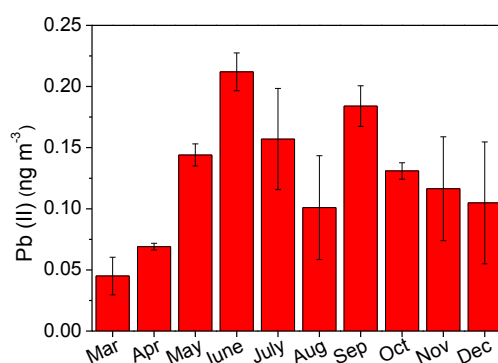


Figure 1. Concentrations of Pb (II) in PM samples ($n = 3$) collected in Goiania (GO) over 24 hours periods between March and December 2016.

¹ L. Megido *et al.*, Chemosphere. 177 (2017) 284–291.

² C. Gonçalves *et al.*, Atmos. Res. 182 (2016) 102–113.

³ C. Gonçalves *et al.*, Air Qual. Atmos. Heal. 10 (2017) 483–496.

Acknowledgments

This study was supported by CNPq (grants no. 308140/2016-8 and 426496/2018-3) and CAPES (grant no. 3363/2014). SECIMA is acknowledged for providing the particulate matter samples.

Chitosan-based hydrogel for adsorption of Cd²⁺: Equilibrium isotherm, kinetic and thermodynamic studies

Pâmela B. Vilela (PG)^{1*}, Caroline A. Matias (PG)¹, Amanda Dalalibera (IC)¹, Alexandre T. Paulino (PQ)^{2#}
*pamelabeccalli@gmail.com; #alexandre.paulino@udesc.br

¹Programa de Pós-Graduação em Ciências Ambientais, CAV/UEDESC, Av Luiz de Camões, 2090, Lages – SC

²Departamento de Engenharia de Alimentos e Engenharia Química, CEO/UEDESC, Br 282, Km 574, Pinhalzinho – SC

Keywords: Cadmium, Adsorption, Chitosan, Hydrogel.

Highlights

Adsorption of Cd²⁺ to chitosan-based hydrogel was performed; FT-IR, SEM and EDX analyzes confirmed the adsorption process; The mechanism adsorption was confirmed by equilibrium isotherm, kinetic and thermodynamic studies; This chitosan-based hydrogel is a promising adsorbent for heavy metal removal.

Abstract

Environmental pollution involving cadmium is a serious global problem due to its high toxicity, persistence, non-biodegradability and bioaccumulation capacity¹. Hydrogels are potential adsorbents that can be efficiently employed for the adsorption of heavy metals, including cadmium². The aim of this study was to determine the adsorption efficiencies of Cd²⁺ in a chitosan-based hydrogel. The adsorption in the hydrogel network was confirmed by Fourier-transform infrared spectroscopy (FT-IR), scanning electron microscopy (SEM) coupled to energy-dispersive X-Ray spectroscopy (EDX). The adsorption mechanism was evaluated by non-linear Langmuir, Freundlich, Redlich-Peterson and Sips isotherms, first and second order and Elovich kinetic models, and thermodynamic studies. Figures 1A-B show the hydrogel surfaces before (A) and after (B) adsorption of Cd²⁺. The EDX spectra (Figure 3) shows characteristic cadmium peaks from 0.25 to 3.75 KeV. The mapping results indicated homogeneous Cd²⁺ distributions (pink points) on the chitosan-based hydrogel surface. The Cd²⁺ interactions with anionic groups in the hydrogel network were confirmed by FT-IR spectra.

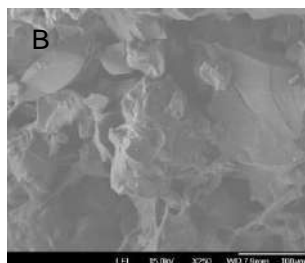
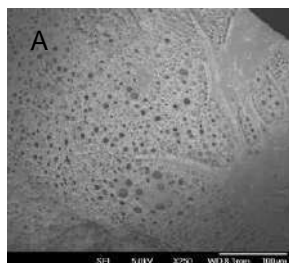


Figure 1. SEM images of the chitosan-based hydrogel before (A) and after (B) adsorption of Cd²⁺.

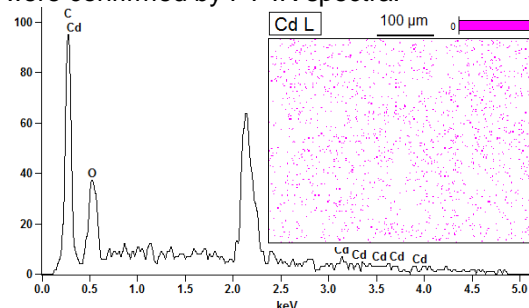


Figure 2. EDX spectra with mapping of the surface after Cd²⁺ adsorption.

The best fit for the adsorption of Cd²⁺ was found using the Redlich-Peterson isotherm, indicating that the adsorption process was governed by monolayer formation and multi-site interactions occurring concomitantly². The maximum adsorption capacities were 175.01, 213.52 and 234.84 mg g⁻¹ at 278, 293 and 313 K, respectively. The adsorption capacities increased with the increase of temperature due to the increase in the Cd²⁺ mobility and diffusion through the hydrogel porous structure³. The best kinetic fit was found with the pseudo-second order kinetic model, indicating that a chemical reaction controls the adsorption process rate⁴. Thermodynamic results indicated favorable and spontaneous adsorption processes with endothermic nature. Finally, the chitosan-based hydrogel synthesized in this work could efficiently be employed as alternative adsorbent for the adsorption and removal of cadmium from water and wastewater.

Acknowledgments

The authors thank the Brazilian fostering agency, CAPES – Brazil, for the master scholarship, and the Brazilian fostering agency, CNPq – Brazil (Grant N° 312356/2015-3) for the financial support.

[1] C.F. Carolin, P.S. Kumar, A. Saravanan, G.J. Joshiba, M. Naushad. Environ. Chem. Eng. 2017, **5**, 2782-2799.

[2] P.B. Vilela, A. Dalalibera, E.C. Duminelli, V.A. Becegato, A.T. Paulino. Environ. Sci. Pollut. Res. 2018.

[3] T. Calvete, E.C. Lima, N.F. Cardoso, J.C.P. Vaghetti, S.L.P. Dias, F.A. Pavan. J. Environ. Manage. 2010, **91**, 1695-1706.

[4] H. Sharififard, Z.H. Shahraki, E. Rezvanpanah, S.H. Rad. Bioresour. Technol. 2018, **270**, 562-569.

Synthesis of L-cysteine-derived arylamides and their S-nitrosothiols as potential protease inhibitors

Aline S. Serralbo (PG)¹, Gabriela Maria (IC)², Luiz S. Longo Jr. (PQ)², Adriana K. C. A. Reis (PQ)^{1*}

aline_sserralbo@hotmail.com; adrianakarla.amorim@gmail.com

¹Departamento de Química, Universidade Federal de São Paulo

²Departamento de Ciências Farmacêuticas, Universidade Federal de São Paulo

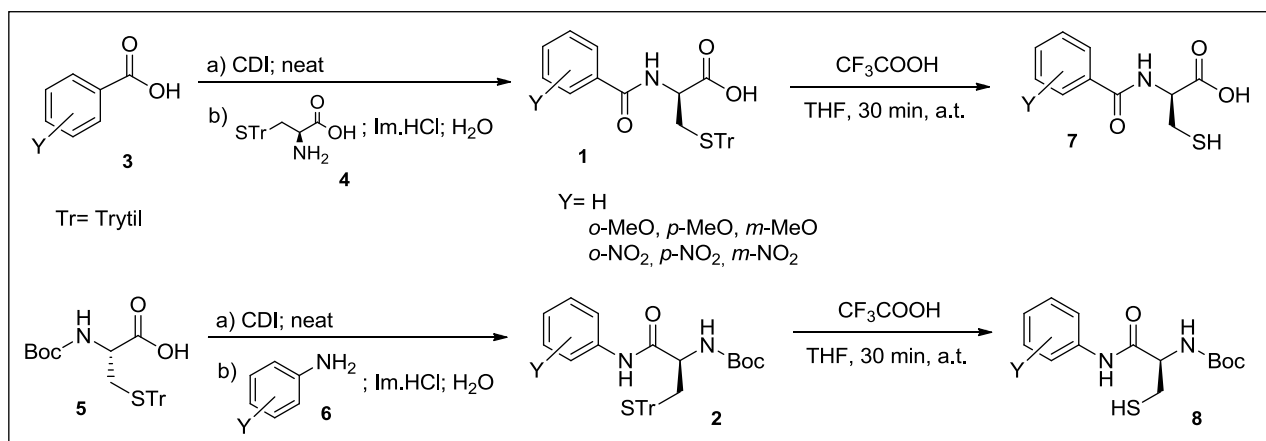
Keywords: Organic Synthesis, Arylamides, Coupling Reagents, S-nitrosothiols, Protease Inhibitors.

Highlights

HIV-protease and renin are homologous proteases with many structural similarities. The synthesis of L-cysteine-derived arylamides and their S-nitrosothiols derivatives using more sustainable methodologies is studied for the development of potential inhibitors bearing dual activity towards these proteases.

Abstract

HIV-1 protease and renin are proteases that play important pathophysiological roles in the evolution of AIDS and hypertension, respectively¹. As patients on highly active antiretroviral therapy (HAART) are at a high risk of developing hypertension², this work aims to synthesize new arylamides with structural similarity with commercial antiretroviral agent Nelfinavir, aiming to obtain new prototypes of renin and HIV-1 protease inhibitors. Two series of arylamides were synthesized starting from L-cysteine derivatives followed by their deprotection with TFA (**Scheme 1**). Alternative greener methodologies were used, employing the coupling reagent CDI in neat conditions, followed by the addition of S-trytil-L-cysteine or arylamines as nucleophilic reagent. The methodologies employed proved to be quite efficient with yields between 80%-90%. It is also noteworthy that the method is clean, easy to handle, as well as free of toxic solvents. Finally, the compounds prepared will undergo *in vitro* assays for inhibitory activity of renin and HIV-1 protease initially.



Scheme 1. Simplified routes for the synthesis of L-cysteine-derived arylamides (series 1 and 2).

References: 1) BRIK, A.; WONG, C. H.; *Org. Biomol. Chem.* 2003, 1, 5; 2) NICHOLSON, L. K. *et al. Nat. Struct. Biol.* 1995, 2, 274.

Agradecimentos/Acknowledgments

UNIFESP, FAPESP, CNPq, CAPES.

Área: ELE

Nº de Inscrição: 00772

All Conducting Polymer based supercapacitors

Thiago.T.Obana (PG),¹Vitor L. Martins (PQ), Roberto M. Torresi (PQ)**ttobana@iq.usp.br**

¹ Dept. de Química Fundamental, Instituto de Química, Universidade de São Paulo, 05508-000 São Paulo (SP), Brazil

Palavras Chave: *energy storage, supercapacitors, conductive polymers, water in salt, ionic liquids*

Highlights

The effects of solvent and electrolyte. Different asymmetric electrochemical supercapacitors based in chemically synthesized conducting polymers. High energy and power densities.

Resumo/Abstract

Electrochemical capacitors (EC) store energy not only by means of faradaic and non-faradaic process but also by the combination of both. Some EC, which employs high-surface conductive carbon based materials, retains electrical energy present at electrode-solution interface; whereas others EC make use of charge transfer reactions at electro-active materials (Pseudocapacitors). Such materials can be transition metals oxides (MnO_2 and RuO_2) or conducting polymers (CP) such as polypyrrole (PPY), polyaniline (PANI), poly(3,4-ethylene dioxythiophene) (PEDOT) and polycarbazole (PCz) derivatives¹.

Even though the storage nature of such ECs, high specific surface is desirable, aiming appreciable amounts of retained energy, thus use such materials in nanostructured form is required. CPs are generally attractive as they have high charge density and low cost (compared with the relatively expensive metal oxides), also, it is possible to develop devices with low equivalent series resistance (ESR), high power, and high energy¹.

Fortunately, CPs in nanostructured form can be chemically and electrochemically synthesized for the use as EC active materials. However, for some practical issues, in order to achieve ECs with relevant amounts of stored energy, electrodes with large thickness ($\sim 100\mu\text{m}$) are suggested². Thus, for that purpose, the use of chemically synthesized CPs as active material is a suitable choice. Also, it is possible to combine different CPs in order to expand EC operating voltage. Factors like electrolyte nature (aqueous, organic or ionic liquids) and salts can be combined in order to optimize the ECs conditions.

Thus, in this work, pseudocapacitors with asymmetric configuration were studied employing PPy or PEDOT as negative electrode and PCz as positive electrode. The effect of parameters like electrolyte (organic, aqueous, ionic liquid and water in salt) were studied. For instance, at organic solvent ($0,1 \text{ mol L}^{-1} \text{ LiClO}_4$ acetonitrile/dichloromethane) were obtained, for PEDOT/PCz-based, an EC with a specific capacitance of 30 F g^{-1} (for $0,01 \text{ A g}^{-1}$) operating at 2,0 V. On the other hand, in water in salt electrolyte, the same system worked at $\sim 2,5 \text{ V}$. These data show how the electrolyte plays an important role in the optimization of CP based EC.

[1] Snook, G. A., Kao, P. & Best, A. S. Conducting-polymer-based supercapacitor devices and electrodes. *J. Power Sources* **196**, 1–12 (2011).

[2] Balducci, A., Belanger, D., Brousse, T., Long, J. W. & Sugimoto, W. Perspective—A Guideline for Reporting Performance Metrics with Electrochemical Capacitors: From Electrode Materials to Full Devices. *J. Electrochem. Soc.* **164**, A1487–A1488 (2017).

Agradecimentos/Acknowledgments

FAPESP, CAPES and CNPq

Área: ANA

(Inserir a sigla da seção científica para qual o resumo será submetido. Ex: ORG, BEA, CAT)

Nº de Inscrição:00773

(Inserir o número de inscrição do autor que fez a submissão)

Biocarvão como adsorvente alternativo na remoção de ácidos naftênicos em água

Mariana da S. Messias¹ (IC), Maria Eduarda C. V. Nascimento² (IC), Roberta M. Santos³ (PG); Flaviana C. Damasceno⁴(PQ)*

flavydamasceno@yahoo.com; marianamesias2@gmail.com

¹Departamento de Química, UFS – São Cristóvão - SE

Palavras Chave: Ácidos naftênicos, Petróleo, Biocarvão, Adsorção.

Highlights

Biochar as an alternative adsorbent for the removal of naphthenic acids in water.

Biochar, new sorting materials

Naphthenic acids in production water.

Resumo/Abstract

Os ácidos naftênicos são misturas complexas naturais do petróleo que apresentam em sua composição anéis de ciclopentano e ciclohexano fundidos simples ou com estruturas múltiplas com grupo carboxílico ligado a uma cadeia alifática ou a um anel cicloalifático. Vários estudos apontam a toxicidade desses compostos em ambientes aquáticos, assim como do potencial corrosivo nas tubulações das plantas de refino. No entanto, esses não são compostos monitorados quando se faz a análise da água de produção. Devido a sua difícil remoção, novos métodos de caracterização e tratamento estão sendo desenvolvidos, como o uso de biocarvão como adsorvente para a remoção de poluentes em água.

Nesse trabalho o biocarvão de vagem de feijão recebeu tratamento básico, e foi caracterizada por FTIR (Espectroscopia de Infravermelho com Transformada de Fourier) e MEV (Microscopia de Varredura Eletrônica). Essas análises permitiram acompanhar as alterações provocadas pelo tratamento aplicado ao material, assim como o perfil estrutural do material e a presença de grupos que podem auxiliar na remoção dos compostos de interesse. O potencial do biocarvão para atuar como agente na remoção de ácidos naftênicos de deu por meio de ensaios variando o tempo de contato em adsorvente e analito, sob agitação controlada e temperatura ambiente. A quantificação dos analitos que permaneceram na fase aquosa após exposição ao biocarvão se deu por GC/qMS no modo de monitoramento de íons selecionados do ácidos derivatizados.

Os ácidos monocíclicos (z=-2) presentes em fase aquosa após 40 minutos em contato com o biocarvão apresentaram 100% de remoção, enquanto que os demais ácidos naftênicos, que tem uma sua cadeia número maior de carbonos (C12 a C20) a adsorção ficou entre 78 e 91%.

Agradecimentos/Acknowledgments

PIBIC/UFS, Capes pelo auxílio financeiro.

LAC/UFS pelo fornecimento do biocarvão.

Área: ANA

Nº de Inscrição: 49083

Evaluation of for direct determination of thimerosal, an organic compound of mercury, by atomic fluorescence spectrometry

Maria Janaina de Oliveira (PG),* Francisco A. S. Cunha (PQ) e Josué Carinhonha C. Santos (PQ)

janaoliveiraqi@gmail.com

Instituto de Química e Biotecnologia, UFAL – Universidade Federal de Alagoas

Palavras chave: Thimerosal, Mercury, Vaccines, Direct determination, Atomic Fluorescence Spectrometry.

Highlights

Direct determination of thimerosal, an organic mercury compound, by direct conversion to inorganic mercury applying different oxidant. The method was applied in the determination of TM in vaccines by CV AFS.

Resumo/Abstract

O timerosal (TM) é um composto organomercurial, amplamente utilizado como agente antisséptico para evitar a contaminação microbiana em produtos biológicos e formulações farmacêuticas, incluindo vacinas, colírios e cosméticos.¹ Contudo, efeitos deletérios como transtornos do neurodesenvolvimento em crianças e casos individuais de reações alérgicas graves têm sido noticiados, assim, devido à sua toxicidade, seu uso tem sido não recomendado em muitos países. A determinação de TM é realizada principalmente empregando técnicas hífenadas como HPLC ou CG com detecção por fluorescência atômica, ou outros detectores, elevando o custo das análises.^{2,3} Desta forma, este trabalho apresenta o desenvolvimento de um método não cromatográfico, baseado na conversão direta de TM a mercúrio inorgânico devido a ação de diferentes oxidantes. O método foi aplicado na determinação de timerosal em amostras de vacinas por espectrometria de fluorescência atômica por vapor frio (CV AFS). Apesar da elevada sensibilidade da técnica de CV AFS, a resposta analítica frente ao mercúrio na forma orgânica é praticamente negligenciável. Neste sentido, a utilização de outras estratégias é necessária. Visando tornar o procedimento simples, se utilizou a decomposição oxidativa direta do TM. Naturalmente existe um equilíbrio entre EtHgCl e ácido tiosalicílico, logo, o etilmercúrio gerado pode ser convertido a mercúrio inorgânico, permitindo a geração de Hg^0 a partir da redução pelo $SnCl_2$ e consequente determinação por CV AFS de forma rápida, sensível, precisa, simples e com baixa geração de resíduos. As misturas complexante-oxidante utilizadas para conversão direta do TM a Hg inorgânico empregadas neste estudo foram KI-KIO₃, KBr-KBrO₃ e o Na₂S-KMnO₄. Os sistemas foram preparados em meio ácido (HCl ou HNO₃) variando as concentrações entre 5-20% (v/v). Foram obtidos recuperações na faixa de 76-86% para HCl 20% (v/v) e 92-105% para HNO₃ 5% (v/v), utilizando o sistema KBr-KBrO₃, enquanto que empregando Na₂S-KMnO₄ com HNO₃ 5% (v/v) como carregador se obteve de 72 a 115% de recuperação, com incerteza de 1, 3 e 21% ($n = 3$), respectivamente, para um nível de concentração de $10 \mu g L^{-1}$, empregado soluções padrões de TM. Para o sistema KI-KIO₃, não se observou conversão, evidenciada pela não variação da linha de base. Para níveis acima de 10% (v/v) de HNO₃ houve supressão do sinal da fluorescência. O método foi aplicado em amostras de vacinas, as quais foram diluídas a cerca de $10 \mu g L^{-1}$ considerando a concentração indicada pelo fabricante, e analisadas pela metodologia proposta. Os resultados mostram recuperações na faixa de 95 a 99% com incerteza máxima de 10% ($n = 3$), sem a necessidade de tratamentos adicionais nas amostras, como digestão por via úmida, por exemplo. Por fim, os resultados foram estatisticamente concordantes a um nível de 95% comprando os resultados obtidos com o processo de mineralização das amostras das vacinas, indicando a exatidão do método proposto.

¹G. Acosta et al., *Electrophoresis*, 2016, 37, 2531–2537.

²B. Campanella et al., *Anal. Chim. Acta*, 2013, 804, 66

³N. Siva, *Lancet*, 2012, 379, 2328.

Agradecimentos/Acknowledgments

CAPES, CNPq, PPGQB e IQB-UFAL.

PRÉ-CONCENTRAÇÃO DE Cr (III) EM MATRIZES AQUOSAS POR EXTRAÇÃO EM FASE SÓLIDA E DPX

Weida Rodrigues Silva (PG),¹ Bruno E. S. Costa (PG),¹ Nivia M. M. Coelho (PQ)¹
weidarodrigues@gmail.com

¹ Instituto de Química, UFU;

Palavras Chave: Cromo, Adsorção, Extração em fase sólida, Película prateada de café, DPX.

Highlights

Chromium was quantified in environmental samples at low concentrations using DPX system and bark of coffee seeds as solid phase extractor. Proposed method has led to minimizing reagent consumption and waste generation.

Resumo/Abstract

A técnica de extração em fase sólida (SPE) pode ser adaptada para o uso de ponteiros descartáveis, denominado pelo método DPX (disposable pipette extraction)¹ sendo largamente empregada nas etapas de pré-concentração dos mais variados analitos, podendo também ser aplicada na remoção de metais pesados². No procedimento por DPX, a fase sólida fica dispersa na ponta da pipeta, permitindo assim um contato imediato entre o analito aspirado na matriz aquosa e a fase extratora³. Como fase sólida, os biossorventes tornam-se uma alternativa promissora no emprego para remoção/recuperação de íons metálicos em matrizes aquosas². Neste contexto, o presente trabalho utiliza a película prateada do café (perisperma), um subproduto do processo de torra do grão como fase sólida na pré-concentração do íon Cr (III). Foi utilizada no estudo solução de Cr (III) 1,0 mg L⁻¹. Os parâmetros considerados para o pré-concentração foram: massa da fase sólida, volume de amostra, ciclos de extração, natureza do eluente, concentração e volume do eluente. Além da otimização das condições operacionais um estudo de íons que poderiam interferir na determinação de Cr (III) foi realizado. Foram testados 7 metais: Ca, Fe, K, Sr, Na, Ba, Mg. Para isto, foram adicionadas quantidade conhecida do interferente a ser estudado nas seguintes proporções em relação a concentração de 1,0 mg L⁻¹ de Cr (III): 1:0,5; 1:1; 1:10; 1:100; 1:1000. Após o procedimento o metal foi detectado por F AAS (Flame Atomic Absorption Spectrometer). Condições otimizadas, indicaram 25 mg de adsorvente, volume de amostra de 4 mL com 2 ciclos de extração, 1 ciclo de eluição com 200 µL de HCl 0,1 mol L⁻¹, como os melhores parâmetros de equilíbrio para a adsorção do analito. O estudo efetuado demonstrou a viabilidade do uso da película de café *in natura* para a extração e pré-concentração do Cr (III). O estudo de interferente na fase líquida mostrou que os íons estudados provocam alteração maior que 10% (fator de interferência) no sinal de absorvância do cromo nas etapas de extração e de eluição. Os resultados estão apresentados nas Tabelas 1 e 2 sendo o Na e Mg responsáveis pela interferência mais crítica na extração de Cr e o Fe e K na eluição, onde ocorreu interferência mesmo em baixas concentrações.

TABELA 1 – Fator de interferência dos íons da fase líquida na extração Cr (III)

| Interf. | Razão cromo: interferente | | | | |
|---------|---------------------------|------|------|-------|--------|
| | 1:0,5 | 1:1 | 1:10 | 1:100 | 1:1000 |
| Ca | 1,18 | 1,37 | 1,40 | 1,56 | 2,49 |
| Fe | 1,62 | 1,46 | 2,72 | 2,52 | 2,76 |
| K | 1,43 | 2,25 | 2,25 | 3,17 | 2,60 |
| Sr | 1,27 | 1,25 | 1,25 | 1,49 | 1,64 |
| Na | 2,01 | 0,88 | 0,88 | 0,57 | 3,61 |
| Ba | 0,84 | 2,15 | 2,15 | 2,15 | 1,88 |
| Mg | 3,31 | 2,48 | 2,48 | 1,29 | 1,57 |

TABELA 2 – Fator de interferência dos íons da fase líquida na eluição Cr (III)

| Interf. | Razão cromo: interferente | | | | |
|---------|---------------------------|------|------|-------|--------|
| | 1:0,5 | 1:1 | 1:10 | 1:100 | 1:1000 |
| Ca | 1,03 | 1,32 | 1,34 | 1,28 | 0,10 |
| Fe | 1,31 | 1,43 | 2,67 | 0,09 | 0,10 |
| K | 1,34 | 1,43 | 0,23 | 0,11 | 0,09 |
| Sr | 0,89 | 1,03 | 0,61 | 0,04 | 0,00 |
| Na | 0,73 | 0,65 | 0,87 | 0,88 | 0,00 |
| Ba | 0,77 | 0,90 | 0,16 | 0,03 | 0,03 |
| Mg | 0,76 | 1,08 | 0,76 | 0,04 | 0,03 |

¹PINTO, M. A. L.; QUEIROZ, M. E.C. Scientia Chromatographica 2015; 7(2).

²ZANIN, K. D.; CARAMAO, E. B.; GARCIA, R. C.; RIOS, A. Química Nova, 26 (2003) 193-196.

³BORDIN, D. C. M.; ALVES, M. N. R.; CAMPOS, E.G.; MARTINS, B. S. Journal of separation science, v. 39, n. 6, p. 1168-1172, 2016.

Agradecimentos/Acknowledgments

IQ-UFU, FAPEMIG, CAPES, CNPq

Área: ORG

Nº de Inscrição: 00776

Estudo preliminar de membranas de poliuretano com sílica a partir de biomassa

Vitoria de Godoy Saciloto (IC),¹ Igor Fagundes Valezan (IC),¹ Maria Julia Enzirio (IC),² Rachel Faverzani Magnago (PG).^{3*}

vitoriasaciloto@gmail.com;

¹Engenharia Química; ²Engenharia Ambiental e Sanitária; ³Programa de Pós-graduação em Ciências Ambientais, UNISUL

Palavras Chave: Membranas, Policaprolactona-triol, Diisocianato hexametileno, Biomassa, Sílica.

Highlights

Preliminary study of polyurethane membranes with silica from biomass. The combinations of silica in polyurethane membranes presented more mechanic stress results and water absorption.

Resumo/Abstract

A utilização das membranas na área da saúde cresce a cada dia, podendo ser utilizada em curativos, implantes para tecidos, liberação de fármacos, entre outros. As combinações de compostos inorgânicos à membranas são feitas para potencializar seu efeito e aumentar sua resistência, sabendo disso, produziu-se membranas de poliuretano a partir de policaprolactona-triol, diisocianato hexametileno, glicerol e sílica. A sílica (Tabela 1) foi extraída da cinza obtida da queima de cascas de arroz, batata, laranja, bergamota e limão.

Tabela 1. Teor de cinzas e sílica.

| Amostras | Batata 100g; Laranja 50g | Batata 75g; Laranja 50g | Batata 100g; Bergamota 50g | Batata 75g; Bergamota 50g | Batata 100g; Limão 50g | Batata 75g; Limão 50g |
|-------------------|-----------------------------|----------------------------|-------------------------------|------------------------------|---------------------------|--------------------------|
| Teor de cinza (%) | 4,38 | 4,33 | 4,12 | 4,06 | 4,38 | 4,70 |
| Sílica (%) | 6,69 | 7,44 | 11,06 | 14,93 | 9,90 | 7,50 |

As membranas foram produzidas com 1,00g de policaprolactona-triol, 0,36g de hexametileno diisocianato, 10% de glicerol e sílica com granulometria de 0,036mm para três composições diferentes. Na Tabela 2 tem-se os resultados médios de seis amostras dos testes de absorção de água, perda de massa (ASTM D570-98, 2018) e resistência mecânica.

Tabela 2. Absorção de água, perda de massa e resistência mecânica.

| Amostras | Sem sílica | 2,5% de sílica | 5,0% de sílica |
|-----------------------------------|------------|----------------|----------------|
| Absorção de água (%) | 14,30 | 11,86 | 14,98 |
| Perda de Massa (%) | 3,40 | 3,80 | 2,53 |
| Resistência mecânica máxima (MPa) | 1,68 | 2,34 | 1,10 |

Através dos resultados observa-se que a casca de bergamota foi a melhor fonte de sílica. As membranas com 5,0% de sílica apresentaram baixa homogeneidade. A maior absorção de água foi a composição com 5,0% de sílica, pois a sílica possui alta afinidade com a água. As membranas com 2,5% de sílica apresentaram menos imperfeições na superfície, maior perda de massa e melhor resistência mecânica.

Referências

Elnaz Bagheri, et. al. Silica based hybrid materials for drug delivery and bioimaging. Corel (2018).
Tanja Pivec, et al. Polyurethanes for Medical Use. Tekstilec (2017).

Evaluation of the behavior of asbestos tiles from different environments

Lincoln G.S. de Aquino (IC),^{1*} Danielle C. Schnitzler (PQ).²

lincoln.1997@alunos.utfpr.edu.br; daniellec@utfpr.edu.br

^{1,2} Departamento Acadêmico de Química e Biologia, UTFPR

Palavras Chave: (Fibras de amianto, Telha de Fibrocimento, Técnicas de Caracterização).

Highlights

Asbestos is a mineral fiber widely used in the industry due to its technical features that gives it great resistance. In Brazil asbestos is found in fiber cement tiles and water tanks, these products have been used for several years by the population. The degradation of the tiles, allied to the weather caused by the place where these materials are present, can release asbestos fibers putting the human being at risk;

Tiles from different environments were analyzed to find favorable situations that allow the release of fibers to the environment, the tiles were washed with a rain simulation and with ultra pure water to compare the possible influence of pH. Characterization techniques were used for the identification and quantification of asbestos fibers from chrysotile type.

Abstract

Asbestos is a mineral fiber used on tiles manufacturing, harmful to health¹. Nowadays the commercialization of products containing asbestos is banned, but due to its durability, many products are still found. This study is made of samples of tiles from different regions, verifying the influence of age, pH and site of the tiles. Samples were collected in: (i) Itapoá-SC; (ii) Agricultural Settlement, Lapa-PR; (iii) residential, Piraquara-PR; (iv) UTFPR, Curitiba (v) commercial point, Curitiba. The samples of (iii), (iv), (v) and parts of (i) and (ii) were crushed in a mortar and analysed in MEV-EDS (JEOL / JSM 6360 LV) and Infrared Spectroscopy Varian / 640- IR) Tiles from (i) and (ii) were split (0.46 m² on average). Half was washed with ultrapure water and the other, washed with 500 mL of synthetic rain of pH 5.5. The wash water was filtered through a 0.45 µm membrane, totalizing 20 samples. MEV-EDS measurements such as membranes were supported and metalized with gold. After analysis were found countless sources of silky fibers and curves of the functionality of Chrysotile². A punctual analysis (ESD) resulted in peaks of magnesium and silicon also typicals. For IR analysis, samples were macerated with KBr (16 accumulations), in these were found bands usual of the mineral in 434 cm⁻¹ concerning to Mg-OH³ bond and between 1200-900 cm⁻¹ (Si-O vibration). Thereby, it can be concluded that the population may be exposed to fibers due to its amount on samples.

References

[1] MENDES, R. Asbesto (amianto) e doença: revisão do conhecimento científico e fundamentação para uma urgente mudança da atual política brasileira sobre a questão. Cad. Saúde Pública, Rio de Janeiro, v. 1, n. 17, p.7-29, fev. 2001.

[2] BERNSTEIN, D. M. Amianto Crisotila: A Biopersistência da Crisotila Brasileira. Goiânia: Crisotila Brasil, 2005. 55 p.

[3] ACCARDO, G.; CIOFFI, R.; COLANGELO, F.; D'ANGELO, R.; DE STEFANO, L.; PAGLIETTI, F. Diffuse Reflectance Infrared Fourier Transform Spectroscopy for the Determination of Asbestos Species in Bulk Building Materials. Materials 2014, 7, 457-470.

Acknowledgments

Acknowledgments to Ministério Público do Trabalho do Estado do Paraná, CME-UFPR, UTFPR and LEMASSA.

Área: CAT

(Inserir a sigla da seção científica para qual o resumo será submetido. Ex: ORG, BEA, CAT)

Nº de Inscrição: 00778

(Inserir o número de inscrição do autor que fez a submissão)

Supramolecular aggregates of cetyltrimethyl ammonium, polyacrylic acid and alkyl imidazole applied in dephosphorylation reactions

Willian Demos* (PG),¹ Adriana. P. Gerola (PQ),¹ Faruk Nome (PQ).^{1†}

[wdemos@hotmail.com](mailto:w demos@hotmail.com);

¹ Chemistry Department, Federal University of Santa Catarina, Florianópolis, Brazil; [†] In memoriam

Keywords: Micelles, Nanoreactors, Phosphate esters, Dephosphorylation reactions, Supramolecular aggregates

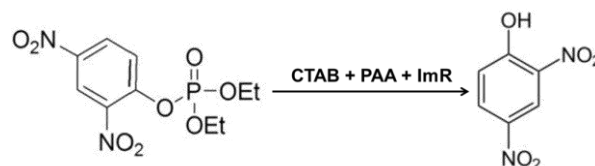
Highlights

Pre-micellar aggregates with hydrophobic microenvironments were observed for the PAA/CTAB/ImR system. The supramolecular complexes showed great catalytic activity against the hydrolysis of DEDNPP.

Abstract

Natural enzymes are capable of enhanced the hydrolysis of phosphate esters rate, but although these reactions are enough studied, due to their involvement in metabolic process, they are not still completely understood in molecular level. Based on that, mimicking artificial catalytic systems has demonstrated a great interest to develop catalytic systems for dephosphorylation reactions, where upon polymer and surfactant molecular structures have shown great efficiency and resourcefulness. Analogously, the imidazole group has propitiated an increase of dephosphorylation reactions rate, either by nucleophilic, acid or basic catalysis. So, based on it, this work investigated the physicochemical properties of supramolecular aggregates and its catalytic effect in dephosphorylation reactions, using Cetyltrimethylammonium Bromide (CTAB), Polyacrylic acid (PAA) and alkyl imidazole (ImR), **Scheme 1**.

Firstly, a conductivity study in pH 6.0 and 25°C was performed to verify if the values of CMC and CAC, both the CTAB and the aggregates formed between CTAB/PAA were influenced by alkyl imidazole, favoring the aggregation process between CTAB and PAA. To verify the polarity of the aggregates formed, fluorescent measurements were done with pyrene (py). The results obtained showed a decrease in the polarity of CTAB/PAA aggregates with the increase of the ImR quantity in the medium, proving the formation of microenvironments. The CTAB/PAA/ImR complexes were evaluated as catalysts in a dephosphorylation reaction of triester 2,4 dinitrophenyl phosphate (DEDNPP), varying both pH and the constituents' concentration (**Figure 1**). The obtained velocity constants, after mathematics settings,



were significantly elevated, suggesting a catalytic increase of 1.1×10^7 times for the hydrolysis reaction of the DEDNPP with the aggregate CTAB/PAA/ImR when compared to its hydrolysis in water.

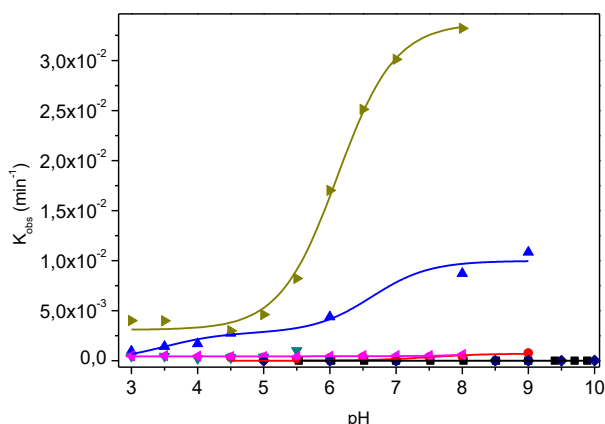


Figure 1: pH profile obtained for the DEDNPP dephosphorylation reaction in water (♦), in the presence of: CTAB (7.5×10^{-4} mol.L⁻¹) (■), ImR (2.5×10^{-4} mol.L⁻¹) (▼), CTAB (7.5×10^{-4} mol.L⁻¹) in the presence of PAA (1×10^{-4} mol.L⁻¹) (▲) and CTAB (7.5×10^{-4} mol.L⁻¹) in the presence of PAA (1×10^{-4} mol.L⁻¹) and ImR (2.5×10^{-4} mol.L⁻¹) (▶)

Acknowledgments

INCT Catalysis, UFSC, CNPq, Capes, FAPESC

Use of In(III) compounds obtained via improved synthetic methods in the catalytic coupling of epoxides with CO₂

Gabriel C. da S. Santana (IC),¹ Samuel Vaz (IC),¹ Bruno N. Cabral (PQ),^{1*} Rafael P. das Chagas (PQ)¹
gc15355@gmail.com; brunonoschang@ufg.com

¹Instituto de Química, Universidade Federal de Goiás, UFG

Keywords: *In(III) salen complexes, Cycloaddition reactions, Carbon dioxide*

Highlights

An improved method for the synthesis of tetrahaloindates and In(salen)X complexes was developed. The compounds were used as catalysts in the synthesis of cyclic carbonates from epoxides and CO₂.

Abstract

Carbon dioxide may be employed as an abundant, cheap, renewable, and non-toxic C1 building block. The thermodynamic stability of CO₂, however, hinders its use as a feedstock in industrial attractive processes. Therefore, the development of catalytic systems to chemically convert CO₂ to useful bulk commercial products is an important topic of research. One of the most studied reactions for this purpose is the synthesis of cyclic carbonate by cycloaddition of CO₂ to epoxides (Fig.1). This class of products finds several applications; from intermediate in organic synthesis to electrolytes in lithium batteries, among others.¹ Salen complexes of Cr(III) and Al(III) are well reported for the catalytic conversion of CO₂.² However, analogous In(III) complexes have not been studied for this purpose. The absence of relevant work with In(III) complexes can be understood due to the instability and laborious synthesis of the starting materials (indium trihalides). To circumvent those drawbacks, we proposed an improved methodology to synthesize stable tetrahaloindates directly from metallic indium. The reactions can be performed under an open atmosphere with high yields. The obtained compounds (Fig. 2) were later applied in homogenous catalysis for the cycloaddition of CO₂ with epoxides. A series of parameters were evaluated in the catalytic system and, as results show, the complexes are efficient in atmospheric pressure of CO₂. They could be used to transform diverse epoxides in carbonates, converting up to 89% of epichlorohydrin, using low catalyst and cocatalyst loads (compared to the literature).

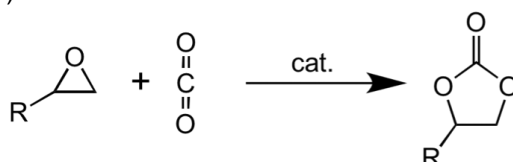


Figure 1. General cycloaddition reaction of CO₂ with epoxides.

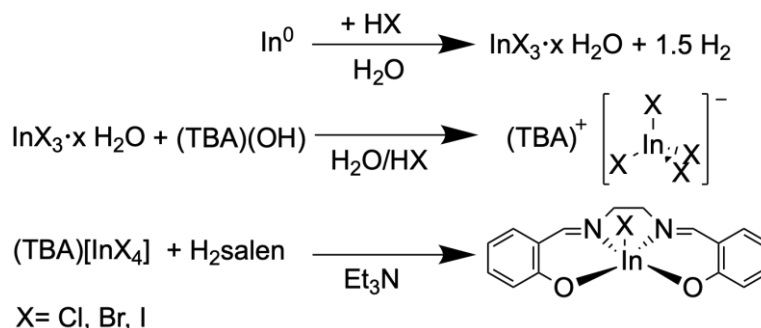


Figure 2. Synthesis of In(III) compounds used in this work.

Acknowledgments: FAPEG, CAPES, PPGQ/IQ/UFG

References:

1. Büttner, H.; Longwitz, L.; Steinbauer, J.; et. al. *Top Curr. Chem. (Z)* **2017**, 375, 50.
2. North, M. Castro-Osma, J. A.; Lamb, K. J. *ACS Catal.* **2016**, 6, 5012.

Área: ANA

Nº de Inscrição: 00781

Determinação de sacarina em chá *diet* empregando um polímero molecularmente impresso (MIP) para extração em fase sólida (SPE)

Izabella F. F. Domingues (IC)^{1*}, Camila S. Dourado (PG)¹, Fabiana Casarin (PG)¹, Erislene S. Almeida (PG)¹, Ana Cristi B. Dias (PQ)¹

izabellaf@gmail.com

¹ Universidade de Brasília (UnB), Instituto de Química (IQ), Brasília, DF, Brasil

Palavras Chave: Planejamento Fatorial, SPE, MIP, Sacarina, Chá diet

Highlights

A promising method for selective separation and simple saccharin determination in tea sample; Chemometric approach based on the use of factorial plan for multivariate analysis of SPE steps.

Resumo/Abstract

A sacarina (SAC) é amplamente usada como adoçante em diversos alimentos, visto que essa espécie reduz as calorias nos alimentos e pode controlar os níveis de açúcar no sangue em diabéticos. Pesquisas atuais apontam riscos ainda não delineados à saúde humana, relacionados do consumo prolongado da SAC. Assim, a Agência Nacional de Vigilância Sanitária (ANVISA) preconizou o teor máximo de SAC em bebidas de 15 mg/100 mL¹. A SAC é formulada nas bebidas *diet* em combinação com outros edulcorantes para se obter um sabor agradável. Diante da variabilidade e similaridade química dos edulcorantes empregados, os métodos para determinar a SAC requerem um ou mais procedimentos de SPE, com finos ajustes no pH e uso de muitos solventes para alcançar recuperações adequadas. Isso ocasiona alta dependência do método a detectores mais sensíveis, como a espectrometria de massas. Dessa forma, o uso de adsorventes específicos como os MIP pode aumentar a seletividade de separação e simplificar o procedimento analítico com detectores mais acessíveis como o UV. Assim, este presente trabalho objetivou estudar os parâmetros de SPE utilizando um MIP sintetizado em suspensão baseado no trabalho Tang colaboradores² usando a SAC como molde. A avaliação de impressão do MIP demonstrou um fator impressão de 4,82 com relação ao polímero não impresso (NIP) sem a SAC. Para otimizar as etapas da SPE empregou-se um planejamento fatorial²³ e a determinação da SAC foi realizada por um método HPLC-UV (192 nm). Os fatores avaliados em dois níveis foram: (1) solvente de condicionamento/equilíbrio (1 mL): metanol/HCl pH 2 e (1 mL) HCl pH 2/metanol, (2) massa do MIP: 100 e 200 mg (por cartucho) e (3) solvente de eluição (3 mL): tampão hidrogenocarbonato 0,05 M pH 9,0 e metanol pH 9,0. O cartucho foi alocado em uma bomba peristáltica através de um tubo de viton e as soluções foram percoladas com vazão de: 1,0 mL/min (condicionamento e limpeza) e 0,8 mL/min (para *loading* e eluição da SAC) (n = 3). Para avaliar a recuperação da SAC foram empregados 9 mL de uma solução 5,0 mg/L em HCl (pH 3) – na etapa de *loading*. Observou-se que os fatores com os efeitos significativos para o nível de confiança (t, 95 %) foram: (1) metanol seguido HCl aquoso (pH 3) e (2) 200 mg de MIP. O fator (3) não apresentou significância nos dois níveis e assim optou-se por fixar metanol pH 9 como eluente. A combinação desses fatores resultou em recuperação média de 95 % da SAC confirmada por HPLC-UV com fator de pré-concentração de 3 vezes. Para avaliar a seletividade do MIP na SPE construiu-se um cartucho com 200 mg do NIP e aplicou-se o método SPE otimizado (n = 3). O MIP demonstrou-se 4 vezes mais seletivo, visto que foi recuperada 93 % da SAC no MIP e apenas 33 % no NIP. O método foi aplicado em uma amostra chá *diet* marca *Feel Good*, com concentração de 3,5 mg/100 mL de SAC no rótulo, além dos interferentes ciclamato de sódio e sucralose. O chá foi sonicado por 45 min e em seguida alíquotas do chá (3,57 mL) foram diluídas em 25 mL de HCl (pH 3) resultando em 0,5 mg/100 mL de SAC. Assim, 9 mL das amostras foram percoladas pelo MIP e os eluatos foram analisados por HPLC-UV. A concentração de SAC obtida foi de 0,378 mg/100 mL ± 0,069, que representa 75 % de recuperação. Os dados demonstram que o planejamento fatorial foi eficaz na otimização das etapas de SPE com menor consumo de reagentes. O método em desenvolvimento aponta aspectos inovadores ao utilizar o MIP na SPE da SAC e maior simplicidade de detecção. Todavia, ainda são necessários aprimoramentos para reduzir a interferência da amostra no método de HPLC-UV.

1. Agência Nacional de Vigilância Sanitária, ANVISA. Resolução RDC 18, de 24 de Março de 2008.

2. Tang, W.; Li, G.; Ho, K.; Zhu, T. Preparation of Hybrid Molecularly Imprinted Polymer with Double- Templates for Rapid Simultaneous purification of Theophylline and Chlorogenic Acid in Green Tea. *Talanta* (2017), 152, 1–8

Agradecimentos/Acknowledgments

UnB – IQ, CAPES, FAP-DF, CNPq

42ª Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química: Eixos Mobilizadores em Química

Evaluation of the presence of pesticides trifluralin, atrazine, alachlor and chlorpyrifos by GC-MS/MS in soil samples from Contestado Settlement - Lapa – PR

Fernanda G. Morro (IC),^{1*} Danielle C. Schnitzler (PQ).²

fernandamorro@alunos.utfpr.edu.br; daniellec@utfpr.edu.br

^{1,2}Departamento Acadêmico de Química e Biologia, UTFPR

Key words: *Soil, Pesticides, GC-MS/MS, Method Validation.*

Highlights

Pesticides are harmful to the fauna, flora, biota and man.
Comparison was made between conventional and agroecological production.
It was possible to quantify chlorpyrifos in one of the samples.

Abstract

The work evaluates the presence and mobility of pesticides in the soil of the Contestado Settlement, Lapa-PR, where there are conventional and agroecological food production, highlighting the lack of Brazilian standards for pesticides in soil¹. Two soil samplings were performed at two-month intervals, three conventional production sites and three agroecological at the surface and at 20 cm using a Dutch auger, storing it in glass bottles and at a temperature below -20°C. 5 g of soil sample were extracted with 20 mL of ethyl acetate on a 40 kHz frequency ultrasound. Filtration was carried out on 0.45 µm glass fiber membrane, clean up and evaporation of the solvent in a rotary evaporator. Compounds were reconstituted in 1 mL of ethyl acetate and filtered in 0.22 µm PVDF. The analysis was performed on a gas chromatograph coupled to a mass spectrometer (Agilent 7890/7000). The method was validated, with R² higher than 0.99 for a linear range of 1 to 100 ppb (currently, analytical methods usually quantify such compounds at ppm levels³). Trifluralin, atrazine, alachlor and chlorpyrifos, presented LQ values equal to 1.5, 0.2, 0.3 and 0.8 ng g⁻¹, respectively. The results of recoveries for the same compounds were between 84.0% and 113.7%, with a standard deviation lower than 12.6%, ensuring the efficiency of the methodology for the extraction and quantification of pesticides in the soil². The results showed that only chlorpyrifos had concentration above the LQ in a conventional production sample.

References

1. RESOLUÇÃO CONAMA Nº 420/2009. DOU, nº 249, 30/12/2009. pg. 81-84.
2. RIBANI, M. et al. Validação em métodos cromatográficos e eletroforéticos. Química Nova, v. 27, n. 5, p.771-780, 16 jun. 2004.
3. BOLZAN, C. M. et al. Dispersive liquid-liquid microextraction with liquid chromatography-tandem mass spectrometry for the determination of triazine, neonicotinoid, triazole and imidazolinone pesticides in mineral water samples. v. 26, n9, Rio Grande, RS: Journal of the Brazilian Chemical Society, 2015. p. 1902-1913.

Acknowledgments

Thanks to CNPq for the scientific initiation scholarship, for the assistance granted by the Ministério Público do Trabalho do Estado do Paraná, to the Universidade Tecnológica Federal do Paraná, to LEMASSA.

Construção de uma horta escolar: contextualização e interdisciplinaridade no ensino de Química

Gabriele Erchenberger (IC),¹ Victor S. Rodrigues (IC),¹ Hamanda Q. Bueno (IC),¹ Romualdo Luciano da Silva (FM),² João Henrique S. Romero (PQ),¹

gabi.erchenberger@gmail.com

¹Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia de São Paulo, Câmpus Catanduva; ²Escola Estadual Doutor Nestor Sampaio Bitencourt, Diretoria de Ensino do município de Catanduva.

Palavras Chave: CONTEXTUALIZATION, GARDEN, CHEMISTRY, PIBID.

Highlights

Title: Building a school garden - contextualization and interdisciplinary in Chemistry teaching.

- ✓ Elective Course – Green area - in partnership with the Institutional Scholarship Program in Pre-service teacher;
- ✓ Vegetables harvested were used by the school kitchen; Student autonomy;
- ✓ Elective Course addressed contextualized and interdisciplinary teaching of Organic Chemistry.

Resumo/Abstract

Esse trabalho foi desenvolvido durante um semestre/2018 numa escola estadual de tempo integral em Catanduva-SP. De acordo com a Secretaria da Educação¹ atualmente há 308 escolas nesse modelo, que atendem 104 mil alunos em todo o estado. A disciplina eletiva foi planejada em conjunto com o professor de Química e alunos do Programa Institucional de Bolsas de Iniciação à Docência (PIBID). Os próprios discentes escolheram participar da eletiva de acordo com o seu projeto de vida. A eletiva foi intitulada “Espaço Verde”, referindo-se à construção de uma horta (Figura 1), que foi edificada com materiais doados pelos próprios alunos e professor. Foram os alunos em conjunto com o PIBID que construíram a horta escolar. Os vegetais cultivados foram utilizados na alimentação dos alunos e funcionários da escola.

Figura 1 – Imagens da horta construída.



Fonte: própria autoria.

A articulação dos assuntos teóricos com a prática utilizando uma abordagem CTS² aumentou o interesse dos 32 discentes. Foi possível contextualizar vários assuntos relacionados a área de química orgânica e também aspectos do dia-a-dia visando não só uma experiência química como também a formação de um cidadão crítico e autônomo, assim como a promoção da interdisciplinaridade, onde por meio da horta, outras disciplinas foram implementadas (biologia e física). Assuntos como reaproveitamento de água, desmatamento e preservação do meio ambiente foram extensamente discutidos. Ao final do semestre, os estudantes apresentaram para a comunidade escolar os resultados alcançados e verificou-se que os discentes se tornaram mais autônomos na realização de pesquisas para a resolução dos problemas encontrados durante a eletiva. Dessa forma, o oferecimento de atividades articuladas, contextualizadas e interdisciplinares podem ser ferramentas importantes para o alcance de um ensino de qualidade e significativo.

1 PROGRAMAS garantem jornada ampliada de estudo aos alunos da rede estadual de SP. *Secretaria da Educação do Estado de São Paulo*, São Paulo, abr. 2018. Disponível em <<http://www.educacao.sp.gov.br/escola-tempo-integral>>. Acesso em 28 jan. 2019.

2 PIERSON, A. et al. Abordagem CTS na perspectiva de licenciados em química. *Ciência & Ensino*, v. 1, 2007.

Acknowledgments

This research was supported by CAPES.

Efeito da dopagem com íons manganês nas propriedades estruturais de molibdatos de cálcio

Roberto C.S. Junior (IC),¹ Kísla P.F. Siqueira (PQ)¹

robertopierandrei19@gmail.com; kisla@ufop.edu.br

¹Laboratório de Materiais Cerâmicos, ICEB II n°67 Departamento de Química, UFOP-Campus Morro do Cruzeiro, Ouro Preto - MG.

Palavras Chave: molibdatos de cálcio, síntese hidrotérmica, dopagem, metais de transição.

Highlights

Effect of doping with manganese ions on the structural properties of calcium molybdates. Mn²⁺ doped calcium molybdates were produced by microwave assisted hydrothermal synthesis. The structural transition from scheelite to wolframite could be observed due Mn²⁺ presence in the lattice.

Resumo/Abstract

Recentemente os molibdatos de cálcio (CaMoO₄), em sua estrutura scheelita tem sido amplamente utilizados como: cintiladores, lasers de estado sólido, lâmpadas fluorescentes, quando este é dopado com metais de transição ou íons de terras raras.[1]. O objetivo deste trabalho é a investigação do efeito da presença do íon manganês (Mn²⁺) nas propriedades estruturais do molibdato de cálcio. Os materiais puros e dopados foram sintetizados por síntese hidrotérmica assistida por micro-ondas, onde foi possível obter os compostos CaMoO₄ e MnMoO₄.H₂O, sendo este último obtido apenas na sua forma hidratada. Teores de dopagens de 2 a 90% foram utilizados. Os materiais produzidos foram caracterizados utilizando difração de raios X (DRX), espectroscopia vibracional Raman e microscopia eletrônica de varredura. Através dos resultados de DRX foi possível observar a perturbação no sistema cristalino do CaMoO₄ devido a presença do Mn²⁺. Uma transição de fase da estrutura scheelita para a wolframita (entre os teores de dopagem de 50 a 60%) ocorreu à medida que os íons manganês foram incorporando na rede cristalina do molibdato de cálcio. Através dos resultados de espectroscopia vibracional Raman foi possível atribuir os modos ativos para os sistemas, sendo esperado 13 modos ativos para o CaMoO₄ e 42 para o MnMoO₄.H₂O.

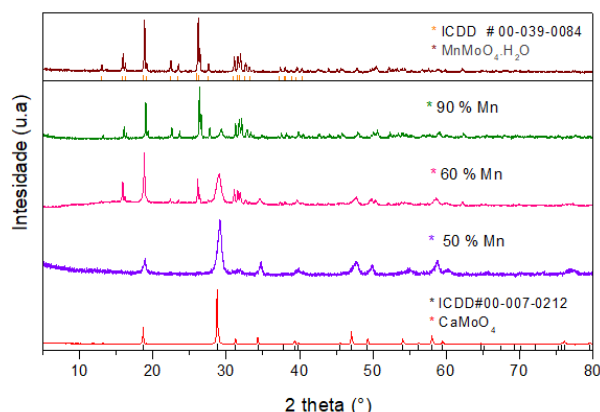


Figura 1: DRX para os materiais do tipo Ca_{1-x}Mn_xMoO₄.

[1] Parchur, A. K., & Ningthoujam, R. S. Preparation and structure refinement of Eu³⁺ doped CaMoO₄ nanoparticles. Dalton Transactions, 2011, 40(29), 7590.

Agradecimentos/Acknowledgments

FAPEMIG, CNPq, UFOP.

42ª Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química: Eixos Mobilizadores em Química

Área: EDU

Nº de Inscrição: 00791

Cientistas na Escola: Uma conexão entre ciência e ensino fundamental.

Yana P. Santos (IC),^{1*} Amanda P. Serpe (IC),¹ Bruna G. Dias (IC),¹ Débora C. Santos (IC),¹ Débora P. Soares (IC),¹ Iolanda P. Araújo (IC),¹ Jaqueline Ramos (IC),¹ Joana C. Biazzi (IC),¹ João G. Inácio (IC),¹ Joelma T. Machado (IC),¹ Laís Juliatto (IC),¹ Leticia A. Silva (IC),¹ Leticia C. Silva (IC),¹ Letícia Tereski (IC),¹ Maryna Brigmann (IC),¹ Milena M. Sachi (IC),¹ Renata Hellinger (IC),¹ Francisco A. Marques (PQ).¹

yanapreisler@gmail.com

¹Departamento de Química/Universidade Federal do Paraná.

Palavras Chave: Ciência, Experimentação, Ensino, Extensão, Educação pública.

Highlights

Scientists at School: A connection between science and basic education.

Resumo/Abstract

O projeto "Cientistas na Escola" surgiu em 2017 como uma iniciativa da Secretaria Municipal de Educação de Curitiba para aproximar a ciência dos estudantes da Educação Básica da rede municipal de ensino. O projeto possibilita que o conhecimento científico seja levado às crianças de forma acessível e lúdica, através de conversas, demonstrações, experimentos, dentre outros meios que possibilitem ao estudante questionar, conversar e conhecer de forma desmistificada o cientista e a ciência. No ano de 2017, o grupo PET Química UFPR visitou cerca de 10% das escolas municipais inscritas no programa, e no segundo semestre de 2018 o grupo realizou duas visitas. Foram abordados temas como tensão superficial da água, reações químicas, densidade etc., por meio de experimentos facilmente reproduzíveis e com baixo grau de periculosidade, como coluna de cores, pasta de elefante, elevador de naftalina, vai e vem das cores, feijões no copo d'água e corrida de palitos de dente. Através destes experimentos lúdicos e interativos, é possibilitado aos alunos observar fenômenos químicos e ter os temas relacionados às suas atividades cotidianas. O processo de aprendizagem é facilitado com abordagens criativas e didáticas e, a partir disso, o "Cientistas na Escola" busca despertar o fascínio dos alunos pela ciência e pela experimentação. Diversos estudantes sensibilizados pelo projeto se mostraram participativos e entusiasmados com os conceitos introduzidos com os experimentos e também demonstraram domínio de conhecimentos gerais abordados nos mesmos. Os professores da rede municipal de educação de Curitiba têm relatado que o projeto está tendo forte impacto no ensino de ciências, com os alunos mostrando grande interesse e entusiasmo pelas aulas, e está também ajudando a aproximar os cientistas e a ciência do cotidiano das crianças.

Figura 1 - Visita do PET Química à Escola Municipal Desembargador Marçal Justen



Fonte: Autores (2018).

Área: EDU

Nº de Inscrição:

Contributions "Do it yourself" in the training of chemistry teachers: the design of a vocalized pH meter for students with visual impairment

Amanda A.A. Morais (IC)*, Bruno M.G. Faria (IC), Gustavo N. Vargas (IC), Daniell R. Alves (IC), Ramon J.S. Araújo (IC), Mislene S.G. Oliveira (PG), Anna M.C. Benite (PQ), Claudio R.M. Benite (PQ)

claudiobenite@gmail.com; amandaarrais@hotmail.com

Laboratório de Pesquisas em Educação Química e Inclusão – LPEQI, Instituto de Química – UFG.

Palavras Chave: Ensino de Química, Formação de professores, Inclusão escolar, Do it yourself, PHmetro vocalizado.

Highlights

The study brings contributions from the "Do It Yourself" approach in teacher training to laboratory assistive technology design for the inclusion of visually impaired students in experiments.

Resumo/Abstract

A Química é uma Ciência teórico-prática e a realização de experimentos envolvendo alunos com deficiência visual (DV) requer o uso de recursos que permitam a coleta e interpretação dos dados pelos sentidos remanescentes e a Tecnologia Assistiva (TA) como forma de acesso à informação do fenômeno pode contribuir para a neutralização das barreiras originadas pela deficiência possibilitando a participação desses alunos nessas atividades¹. Utilizando de ciclos-espaciais da pesquisa-ação em aulas de Química numa Instituição de apoio ao ensino básico regular público para DV, objetivamos nesse trabalho apresentar as contribuições de um 'pHmetro vocalizado' construído por professores em formação para auxiliar os DV a participarem com autonomia de experimento e discussão sobre potencial Hidrogeniônico de substâncias cotidianas e soluções.

Sobre a medida de pH a literatura sempre propõe métodos convencionais que usam a visão como meio de identificação, como a fita universal, o papel tornassol e o pHmetro digital, excluindo esse grupo social. No extrato a seguir, apresentamos um trecho da aula realizada pelos professores em formação objetivando a discussão do referido conteúdo e a validação do equipamento por DV. Participaram da atividade 13 DV (A).

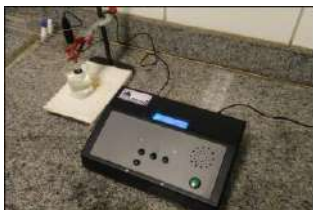


Fig 1: pHmetro vocalizado.

IC1: Nós temos aqui o refrigerante de limão que tem em sua composição o ácido cítrico.; **A13:** O ácido cítrico é um ácido carboxílico?; **PG:** Sim! Vamos medir o pH dele? Nós trouxemos o pHmetro vocalizado para isso. Ele tem um sensor que é colocado no líquido e uma central digital com um botão de vocalização que vai falar o pH para vocês. **A12** coloque o sensor no copo que está com refrigerante e aperte o botão.; **PHmetro:** Três ponto quatro.; **IC1:** O pH é ácido ou básico?; **Todos:** Ácido.

Nossos resultados apontam que a experimentação com o uso de ferramentas culturais acessíveis aos deficientes, denominadas TA, pode promover participações mais efetivas contribuindo para a aprendizagem de conteúdos e de habilidades técnicas inerentes a essa Ciência. O equipamento informa o pH da solução por um display eletrônico, concomitante à medida vocalizada e é composto por um eletrodo para ser submerso em soluções aquosas e uma central de comandos para medições com fontes de alimentação bivolt. Diante disso, defendemos a abordagem da cultura "Do it yourself" na formação de professores pela pesquisa em parceria com áreas tecnológicas, pois baseamo-nos nos princípios das inter-relações CTS e do trabalho multidisciplinar para combinar ferramentas e linguagem de programação adequadas para resolver problemas do cotidiano, nesse caso a inclusão de DV nos experimentos, transformando professores consumidores em criadores de recursos didáticos e tecnológicos².

¹ BENITE, C.R.M.; BENITE, A.M.C.; FRANÇA, F.A.; VARGAS, G.N.; ARAÚJO, R.J.S. e ALVES, D.R. A experimentação no ensino de química para deficientes visuais com o uso de tecnologia assistiva: o termômetro vocalizado. QNEsc, v.39, n.3, 2017.

² SILVA, R.B. Para além do movimento maker: um contraste de diferentes tendências em espaços de construção digital na educação. Tese (doutorado) PPGTE - UTFPR, 2017.

Agradecimentos/Acknowledgments

Ao CNPq e ao Centro Brasileiro de Reabilitação e Apoio ao Deficiente visual – CEBRAV/GO.

Área: BEA

Nº de Inscrição: 795

Utilização de SPME e GC-MS no combate a fraudes na comercialização de carne bovina

Daiane S. de Souza (PG)*¹, Rodolpho M. Prado (PQ)², Eduardo J. Pilau (PQ)¹, Ana Paula G. Vitoriano (PG)³, Carla Porto(PQ)³.

carla.porto@unicesumar.edu.br, daianessouza20@gmail.com

¹Departamento de Química, UEM, Maringá, PR, 87020-900, Brazil; ²Departamento de Zootecnia, UEM; Maringá, PR, 87020-900, Brazil; ³Programa de Mestrado em Ciência, Tecnologia e Segurança Alimentar do Centro Universitário de Maringá e Instituto Cesumar de Ciência, Tecnologia e Inovação – iCETI - UNICESUMAR, Maringá, PR, 87050-900, Brasil.

Palavras Chave: adulteração, carne bovina, segurança alimentar, microextração em fase sólida, GC-MS.

Highlights

Use of SPME and GC-MS to monitor adulteration in beef

- Solid phase microextraction (SPME) and gas chromatography-mass spectrometry (GC-MS) were used to evaluate beef adulteration.
- This approach can ensure food safety the consumers, as it helps to avoid intentionally fraud related to bovine meat and meat products.

Resumo/Abstract

Fraudes em produtos alimentícios são problemas recorrentes. Recentemente foram descobertas adulterações no processamento da carne crua com a adição de substâncias químicas em seis estados brasileiros. Tal fraude objetivava manter a aparência da “carne fresca” mesmo ela estando com a data de validade expirada. Para detectar fraudes como essa, é necessário o desenvolvimento de metodologias analíticas capazes de proporcionar a determinação e identificação de compostos diretamente relacionados com a degradação de produtos cárneos. Neste trabalho foram otimizadas as condições de extração para a aplicação da método de microextração em fase sólida (SPME, do inglês *Solid Phase Microextraction*), seguido da análise em cromatografia a gás acoplada a espectrômetro de massas (GC-MS, do inglês *Gas Chromatography Mass Spectrometry*), para determinar compostos voláteis característicos da degradação da carne bovina. O método analítico também foi testado para detectar fraudes pela inclusão de aditivos capazes de alterar a colorimetria da carne. O estudo de otimização dos parâmetros de extração foi realizado utilizando variáveis que poderiam influenciar no processo de extração. As condições ótimas de extração foram: temperatura de extração (35°C), tempo de extração (45 min) e tempo de pré-equilíbrio (7,5 min). As melhores condições testadas foram aplicadas em amostras de carne adquiridas em supermercados da cidade de Maringá (PR). Os compostos voláteis de uma amostra de carne fresca (24h após o abate do animal) foram avaliados no momento da compra e após 7 dias de vida de prateleira, de maneira a simular condições de supermercados. As amostras foram dopadas após os 7 dias de vida de prateleira com ácido ascórbico (AA) e sórbico (AS), de maneira a simular uma possível fraude. Com o passar dos 7 dias, compostos como álcoois, cetonas foram observados, os quais são característicos de produtos cárneos em processo de degradação. Houve também escurecimento da cor da carne, o que era esperado. Momentos após a adição do ácido ascórbico e sórbico, houve mudança instantânea da coloração da amostra, retornando a aparência de carne fresca. Entretanto, mesmo com a adição desses produtos, uma nova análise por GC-MS demonstrou que não houve qualquer alteração no perfil cromatográfico das amostras adulteradas, quando comparadas ao perfil da amostra com 7 dias de vida de prateleira. Tal fato sugere que a adição de AA e AS não alterou a composição de compostos voláteis provenientes do processo de degradação da carne. Isso indica que a carne já se encontrava em processo de degradação, mesmo tendo a aparência modificada pela adição das substâncias químicas. O método desenvolvido utilizando SMPE e GC-MS mostrou-se eficiente na detecção de compostos voláteis de degradação da carne bovina, podendo ser utilizado para detectar possíveis fraudes, evitar o comércio de alimentos deteriorados e garantir a segurança alimentar da população.

Agradecimentos/Acknowledgments

This work was supported by the ‘Complexo de Central de Apoio à Pesquisa (COMCAP)’ from the Universidade Estadual de Maringá. This project had the support of the grants 401590/2014-3-CNPq, 168384/2017-5-CNPq, 155675/2016-8, 0673/13-CT-Infra-FINEP and CAPES.

Área: ANA

(Inserir a sigla da seção científica para qual o resumo será submetido. Ex: ORG, BEA, CAT)

Nº de Inscrição:

00796

(Inserir o número de inscrição do autor que fez a submissão)

Evaluation of the results of the optimization in high performance liquid chromatography, using different experimental designs

Laryssa Santos (IC)¹, **Michelle A. da Silva (PG)**¹, **Carlos A. da S. Rhiel (PQ)**¹, **Débora F. de Andrade (PQ)**¹, **Humberto B. Novaes (PQ)**^{1,2}, **Paula F. de Aguiar (PQ)**¹

laryssaufjr@gmail.com, **paula.fdeaguiar@gmail.com**

¹Instituto de Química, UFRJ; ²LAQAM

Palavras Chave: *Experimental design, Three-level Factorial design, Central Composite design, Doehlert design, High Performance Liquid Chromatography*.

Highlights

Three experimental designs with similar number of experiments were applied to the same space of variables to verify the existence of distinctions in the optimal regions defined by them.

Resumo/Abstract

Multivariate tools applied to the optimization of analytical methods have been used very frequently due to advantages such as reduction of the number of experiments and consequently, reduction of cost. To use an experimental design, an example of these tools, the researcher chooses levels for the variables of interest and performs experiments using combinations of these levels. Faced with many designs to opt to a given situation, the most appropriate choice most often involves designs with the fewest experiments. Thus, this work's purpose is to verify the existence of distinctions in the optimal regions defined by experimental designs^[1,2] (Three-level Factorial design, Central Composite design, Doehlert design) with similar number of experiments, applied to the same space of variables. The technique selected was High Performance Liquid Chromatography (HPLC) with a sample containing a mixture of caffeine and theobromine standards, in Milli Q water. The operating conditions employed were 25cm and 4.6 mm C18 column, maintained at 40°C, with isocratic run, using as mobile phase a mixture of methanol HPLC grade, Milli Q water and acetic acid (5% v/v) at 272 nm. The studied process variables were flow (variation range: 0,80-1,20 mL/min) and mobile phase composition (variation range: 20-30% of methanol v/v), and the responses measured were retention time and chromatographic resolution. The highest resolution among the peaks was desired, in the shortest analysis time possible. It was possible to verify that, for the retention time response, the 3 designs delimited similar optimal regions (approximately 25-30% of methanol v/v and 1,0-1,2 mL/min of flow) (Fig. 1). For the resolution the optimal regions were approximately 27-30% of methanol v/v and 0,85-1,1 mL/min; all acceptable for quantification (Resolution = 1) (Fig. 2). It was observed that, although the designs pointed to the same optimal region, depending on the number of experiments, the optimal conditions are better estimated, in other words, it is possible to assess more clearly the variation of the results along the studied axes with the Central Composite design, probably due to the larger number of levels studied for each variable.

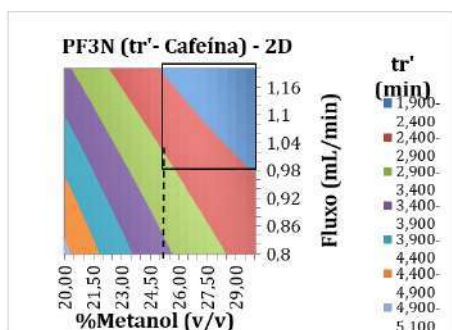


Figure 1

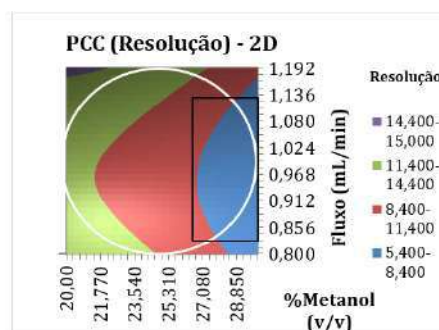


Figure 2

References:

- [1] Data Handling in Science and Technology, 20A, Handbook of Chemometrics and Qualimetrics: Part A, D.L. Massart et al, 1997, Elsevier.
- [2] Plans d'Experiences. Applications À l'entreprise, J. Drosbeke, /j. /fine and G. Saporta, 1997, Éditions Technip.

Área: INONº de Inscrição: 00797

Screening of synthesis parameters for Mg/Al layered double hydroxide aiming environmental and biological applications

Caio G. N. Silva (IC),¹ Jaqueline D. Senra (PQ),² Luiz F.B. Malta (PQ).^{1*}

caio.gns@outlook.com; lfbmalta@iq.ufrj.br

¹Instituto de Química, UFRJ; ²Instituto de Química, UERJ

Palavras Chave: LDH, factorial design, crystal size, carbonate.

Highlights

- Mg/Al LDH synthesis was optimized;
- Evaluated parameters were precipitation pH, Mg:Al ratio and post synthesis work up;
- The responses were crystal size and CO₃²⁻ content;
- pH was the most critical parameter.

Resumo/Abstract

LDH materials are based on a metallic M²⁺/M³⁺ hydroxide layered network. The interlayer space is occupied by anions to balance the intralayer positive charge therefore being anion exchangers. Such property allows inserting anionic species giving rise for instance to heterogeneous catalysts¹, heavy metal removers², and controlled release vehicles³. To best accomplish these tasks the layered structure must display high surface area, crystallinity and low carbonate content (for the ease of ion exchange).

Mg/Al LDHs were synthesized applying the varying pH approach. It was used a 2⁴ factorial design for the process optimization. The varied parameters were those of Table 1. Samples were characterized by X-Rays Diffraction (XRD) and Fourier-transform infrared spectroscopy (FTIR). The outcomes to be evaluated were the crystal size (Scherrer formula⁴) and CO₃²⁻ content (deconvolution of FTIR spectra from 1500 to 1200 cm⁻¹).

The XRD patterns revealed pH as the most critical parameter since hydrotalcite was only obtained as unique phase in pH10. Such result enhances the differences towards Cu, Zn and Ni hydrotalcites obtained in both pH 8 and 10. The set of conditions that guaranteed the most crystalline (D=6.4 nm) and lowest CO₃²⁻ containing sample was coprecipitation in pH=10 applying Mg:Al 3:1 with isolation by filtration and posterior washing. This partly contrasts with the Ni/Al LDH synthesis that was best executed in pH8 according to previous study⁵.

Table 1: Parameters.

| Level/Parameter | Isolation | Washing | Molar ratio (Mg:Al) | pH |
|-----------------|----------------|---------|---------------------|----|
| + | Centrifugation | Yes | 3:1 | 10 |
| - | Filtration | No | 2:1 | 8 |

Agradecimentos/Acknowledgments

CAPES, CNPq and FAPERJ.

1. Silva, AC et al. J. Nanomater. 2013, 2013 1.
2. Rahmanian, O. et al. Journal of Molecular Liquids 256, 2018, 9–15.
3. Mohanambe, L. et al. Inorg. Chem. 44, 2005, 2128–2130.
4. Weller, MT Inorganic Materials Chemistry, Oxford University Press, 1994.
5. Rocha, LDS et al. 41ª Reunião Anual SBQ, 2018.

Investigation of the potential of phthalocyanines as photosensitizers for microbial inactivation.

Juliana Ariolli Prandini (IC)^{1#}, Kelly Aparecida Dias de Freitas Castro (PQ)¹, Juliana C. Biazotto (PQ)¹, Leandro Lourenço (PQ)², João P. C. Tomé (PQ)³, Gilberto Úbida Leite Braga (PQ)⁴, Roberto Santana da Silva (PQ)^{1*}.

#juliana.prandini@usp.br; *silva@usp.br

¹Departamento de Físico-Química, Faculdade de Ciências Farmacêuticas de Ribeirão Preto – Universidade de São Paulo, Brazil; ²QOPNA & LAQV-REQUIMTE, Departamento de Química, Universidade de Aveiro, Portugal; ³Centro de Química Estrutural, Departamento de Engenharia Química, Instituto Superior Técnico, Universidade de Lisboa, Portugal; ⁴ Departamento de Análises Clínicas, Toxicológicas e Bromatológicas, Faculdade de Ciências Farmacêuticas de Ribeirão Preto, Universidade de São Paulo, Ribeirão Preto, Brazil

Key Words: *Phthalocyanines, PDT, Photosensitizers, Microbial Inactivation.*

Highlights

Phthalocyanines have application as photosensitizers (PS) in photodynamic therapy (PDT); the cell death seems to be more dependent on subcellular localization rather than oxygen singlet quantum yield.

Resumo/Abstract

Phthalocyanines (Pc) are synthetic macrocycles closely related to porphyrins, constituted by four isoindole subunits linked by aza bridges. These compounds present an excellent ability to act as photosensitizers (PS) in photodynamic therapy (PDT)^{1,2}. This therapy is a recognized approach to treat oncological and non-oncological problems, like fungal infections.

In this communication, we report the synthesis and characterization of Pc and the ability to inactivate three fungal species namely, *Candida albicans*, *Aspergillus nidulans* and *Colletotrichum abscissum* (isolate CA142).

The Pc compounds were prepared as described in the literature¹, by cyclotetramerization of the phthalonitrile derivative in the presence of lithium metal and 1-pentanol at 150 °C. Product purity was confirmed by TLC, ¹H NMR spectroscopy, UV-Vis and mass spectrometry.

Furthermore, photoinactivation studies in fungal cells using phthalocyanines as PS were performed. Different concentrations of PS (1-50 µM) and irradiation times (15-45 minutes) were evaluated (Table 1). Irradiation was performed using a system consisting of a set of 650 nm wavelength LEDs evenly distributed in the shape of the 96-well culture plate. It was possible to verify that, in longer irradiation times, the inhibition of the microbial growth by PS in lower concentrations was observed, with 5 µM being the lowest concentration that reached antimicrobial activity. However, in smaller irradiation times, there was also inhibition of microbial growth, but in higher concentrations of the PS.

The photodynamic efficiency is highly dependent on the subcellular localization mechanism, photophysical properties of PS and cellular uptake.

Table 1. Selected photophysical properties of phthalocyanines derivatives **Pc 1, 2 and 3** in DMF and biological results.

| PS | Soret Band $\lambda_{\text{m\acute{a}x}}$ (nm) | Q bands λ_{max} (nm) | $\lambda_{\text{emission}}$ (nm) ^a | ^b MIC (µM) | |
|------------|--|-------------------------------------|---|-----------------------|---------------------|
| Pc1 | 407 | 647 | 720 | 690 | *2 **5 ***-- |
| Pc2 | 382 | 629 | 699 | 727 | *5 **10 ***15 |
| Pc3 | 353 | 614 | 683 | 688 | *2 **5 ***5 |

^aOptical density of all samples was 0.05 at 660 nm. ^bMinimum Inhibitory Concentration (MIC) of PS for photodynamic inactivation of ^{*}*Candida albicans*, ^{**}*Aspergillus nidulans* and ^{***}*Colletotrichum abscissum* fungal species. – not growth inhibition.

References:

- [1] J. B. Pereira, et al., Photochem. Photobiol. 2012, 88, 537-547;
 [2] L. M. Lourenço, et al., Photochem. Photobiol. Sci. 2015, 14, 1853-1863.

Acknowledgments: FAPESP and CNPq

Synthesis and characterization of Octahedral Molecular Sieve (Rb-OMS-2) using Mn mining Residues from Amazon Region (Brazil)

Henrique I. O. Gomes (IC)^{1*}, Kauany F. Bastos (IC)¹, Igor A. R. Barreto (PG)², Thays C. C. Lavra (PG)³, Bruno A. M. Figueira (PQ)², Marcondes L. da Costa (PQ)⁴

henrique.ismael26@hotmail.com; brunoufopa@hotmail.com

¹Instituto de Engenharia e Geociências, UFOPA; ²Pós Graduação em Sociedade, Ambiente e Qualidade de Vida, UFOPA;

³Pós Graduação em Engenharia de Materiais, IFMA; ⁴Pós Graduação em Geologia e Geoquímica, UFPA.

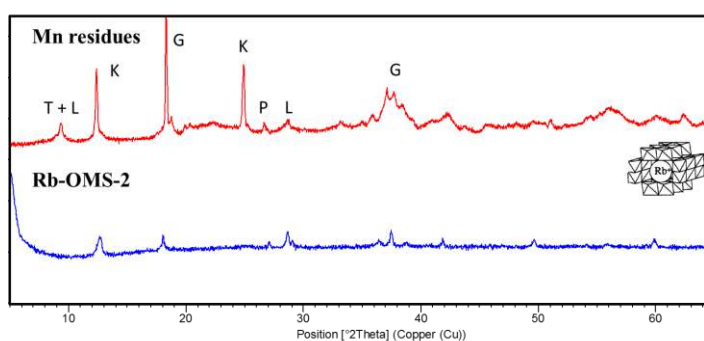
Keywords: Mn mining residues, Amazon, Synthesis, Molecular sieve, Rb-OMS-2.

Highlights

Manganese mining residues from Amazon were successfully converted into Rb-OMS-2 (octahedral molecular sieve).

Abstract

In this work, rubidium manganese oxide octahedral molecular sieve (Rb-OMS-2) was successfully synthesized by chemical process using Mn mining residues from "Barragem do Kalunga" (deactivated since 1997) as low cost raw material. The influence of temperature was investigated in the formation of the final product, which was characterized by X-ray diffraction (XRD), Infrared spectroscopy (FTIR) and Differential Scanning Calorimetry (DSC) analysis. The XRD pattern for Rb-OMS-2 revealed peaks due to (110), (200), (220), (121), (301), (411) and (251) reflections around 12,6°; 17,87°; 28,44°; 37,32°; 41,68°; 49,43° e 60,1° (2 θ), which are characteristic of tetragonal octahedral manganese oxide (JCPDS 01-080-1613). The cell parameters were: $a = 9,94 \text{ \AA}$, $b = 9,94 \text{ \AA}$ e $c = 2,84 \text{ \AA}$, $\beta = 90^\circ$, $V = 280,48 \text{ \AA}^3$. FTIR spectrum of Rb-OMS-1 showed bands at 3415, 1624, 716, 600 and 520 cm^{-1} and could be related to the H-O stretching and Mn-O vibrations of the tunnel structure. The thermal behavior (DSC) of Rb-OMS-2 presented thermal stability above 400°C. The results have shown that Mn mining residues could be a low cost raw material for octahedral molecular sieve synthesis.



Minerals: T = todorokite; L = lithiophorite; K = kaolinite; G = gibbsite; P = pirolusite

Acknowledgments

This work was supported by National Council for Scientific and Technological Development (No. 420169) and Coordination for the Improvement of Higher Education Personnel (No. 88881.160695), LAMIGA laboratory (UFPA) and UFOPA.

Fabrication of Lignocellulose-Based Microreactors: Copper-Functionalized Bamboo for Continuous-Flow CuAAC Click Reactions

Omar G. Pandoli (PQ),^{1*} Druval S. de Sá (PG),¹ Rodrigo Bustamante (IC),² Carlos E.R. Rocha (IC),² Elton J. R. Rodrigues (PG),¹ Alessandro Massi (PQ),³ Camilla D. Buarque,¹ Khosrow Ghavami (PQ).⁴

omarpandoli@puc-rio.br

¹Departamento de Química, PUC-RIO; ²Departamento de Engenharia Química e Materiais, PUC-RIO; ³Dipartimento di Scienze Chimiche e Farmaceutiche, Università di Ferrara (Itália); ⁴Departamento de Engenharia Civil, PUC-RIO.

Palavras Chave: bio-microfluidic device, click-chemistry, heterogenous catalysis, bamboo, sustainable microfabrication, fast prototyping.

Highlights

Inspired by the Nature and its complex design, this project is geared to develop sustainable catalytic microfluidic devices using renewable, and biodegradable materials from a functionalized bio-template made from bamboo.

Abstract

The fabrication of a new copper-functionalized lignocellulosic microreactor (Cu-L μ R) from bamboo culms is herein described together with its operation to perform a copper(I)-catalyzed 1,3-dipolar cycloaddition between azide and terminal alkyne (CuAAC). The bio-microfluidic device showed an easy prototyping and fast functionalization with copper ions. All reactions were carried out in flow regime with aqueous-methanol solvent and minimal leaching of copper, yielding a series of model 1,4-disubstituted triazole derivatives with good efficiency in a low-resource setting.

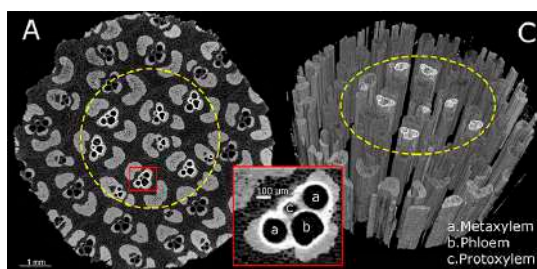
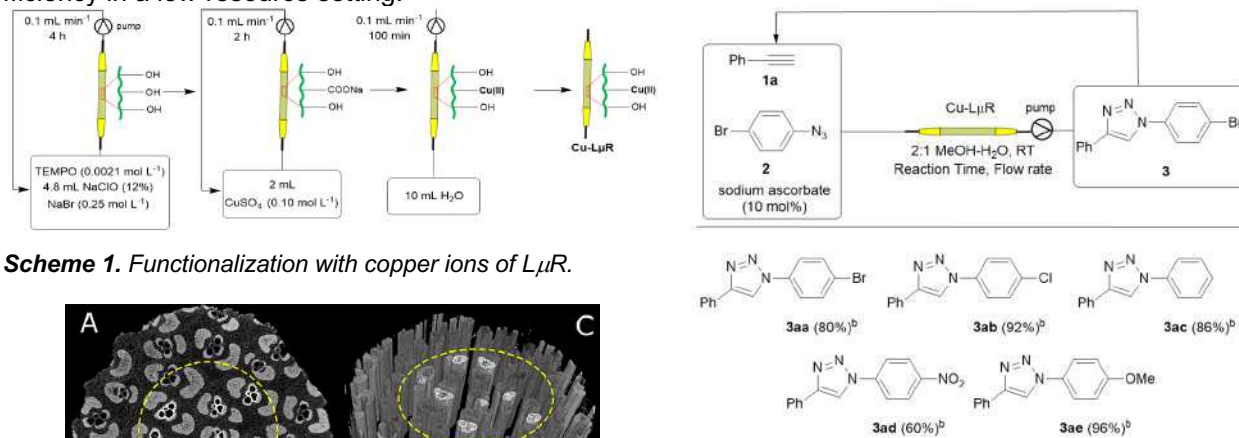


Figure 1. μ CT images of Cu-L μ R

Table 1. CuAAC flow procedure with Cu-L μ R
^a1a (0.14 mmol), 2 (0.12 mmol), sodium ascorbate (10 mol%), 2:1 MeOH-H₂O (3 mL). ^bIsolated Yield.

In this proof-of-concept study, we have demonstrated the use of a bamboo as bio-template for the fabrication copper-functionalized lignocellulosic micro reactor (Cu-L μ R) by a low-cost process. The present environmental microfluidic technology allows a low-cost manufacturing with a better competitive scalability production of a new bio-microfluidic device to break through the established market of microfabrication technique.

Acknowledgments

The authors are grateful for the financial support from the Serrapilheira Institute (grant number Serra-1709-17482) and Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico-Brasil (CNPq) (458302/2013-9) and Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior - Brasil (CAPES) - Finance Code 001. O.P. thank FAPERJ-Brazil for the JCNE fellowship (E-26/203.281/2016).

42ª Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química: Eixos Mobilizadores em Química

Área: MED

Nº de Inscrição: 00802

Computational studies of halolactone derivatives applied to Reverse transcriptase enzyme.

Fábio A. de Molfetta (PQ),¹ Evonnildo C. Gonçalves², Ana P. L. Costa (IC)^{1*}.

fabioam@ufpa.br; ana.paulalim@outlook.com

¹Universidade Federal do Pará (UFPA), Instituto de Ciências Exatas e Naturais (ICEN), Faculdade de Química.

²Universidade Federal do Pará (UFPA), Instituto de Ciências Biológicas (ICB).

Keywords: Halolactone derivatives, Molecular docking, Molecular dynamics.

Highlights

HIV-1 reverse transcriptase (RT) is a key enzyme involved in the replication of the virus.

Halolactone derivatives as efficient reverse transcriptase inhibitors.

Molecular docking and molecular dynamics were applied to Reverse Transcriptase.

Resumo/Abstract

The acquired immunodeficiency syndrome (AIDS) is a global epidemic caused by human immunodeficiency virus (HIV) attacking the human immune system, and then resulting in a progressive decline of immune function. Reverse Transcriptase (RT) is the most characterized target of HIV, and this enzyme plays a major role in viral replication, since it converts the viral single-stranded RNA into proviral double stranded DNA. Lactones are cyclic esters and usually found in marine organisms, and these compounds exhibit diverse biological properties, such as anticancer, antibacterial, antiprotozoal, antifungal and anti-HIV. Han and colleagues described a series of halolactone derivatives as efficient reverse transcriptase inhibitors. In this work, 26 derivatives were submitted to molecular modeling studies for discovering new compounds able to inhibit the RT. According to the results of the molecular docking, obtained with Gold 5.5 program, and subsequent visual inspection we selected fifteen compounds, which make hydrophobic interactions (Val106, Leu234) and pi-pi interactions (Try181, Try188 and Trp229) with the amino acid residues. Costa and colleagues demonstrated the importance these residues with HIV-1 RT. The Molecular Dynamics simulations (MD) were performed with two selected ligands using the Amber 12 program. From RMSD values we can observe that complex formed by CP1 ligand was more stable than CP21, and also had lower values of the B-factor in the MD trajectories. Thus, the results of this study might be a useful starting compound for the development of new RT inhibitors.

Estudo e desenvolvimento de método de extração de metais de diferentes tipos de óleos lubrificantes (mineral, semissintético e sintético) por extração induzida por quebra de emulsão.

Aline Fernandes (PG)^{1,2*}, **Jonas O. Vinhal** (PQ)^{1,3}, **Achilles J. B. Dutra** (PQ)², **Ricardo J. Cassella** (PQ)¹

linefernandes@uol.com.br

¹Departamento de Química Analítica, UFF; ²Departamento de Engenharia Metalúrgica e de Materiais, UFRJ; ³Instituto Federal do Maranhão, IFMA.

Palavras Chave: Óleo lubrificante, extração, metais, EIEB, F AAS.

Highlights

Study and development of a method for the extraction of metals from different types of lubricating oil (mineral, semi-synthetic and synthetic) by extraction induced by emulsion breaking.

Extraction of Ca, Mg and Zn from unused lubricating oils by flame atomic absorption spectrometry after application of the extraction induced by emulsion breaking as a samples preparation method.

Resumo/Abstract

Neste trabalho foi realizado o estudo e desenvolvimento de um método de extração induzida por quebra de emulsão que possibilitasse o preparo de amostras de diferentes tipos de óleos lubrificantes comercializados no Brasil (mineral, semissintético e sintético). Os analitos foram determinados por espectrometria de absorção atômica com chama e os parâmetros avaliados para a otimização do método foram os mostrados na **Tabela 1**. Nas condições ótimas, as amostras foram diluídas com tolueno (óleos minerais e semissintéticos) e etilbenzeno (sintéticos) na proporção de 40% (v/v) para ambos os casos. Máxima extração foi alcançada ao se utilizar soluções extratoras compostas por surfactante Triton X-114 a 3% (m/v) e ácido nítrico a 2,8 mol L⁻¹ (óleos minerais e semissintéticos) e 4,2 mol L⁻¹ (óleos sintéticos). A condição de calibração também foi estudada em detalhe. Excelentes resultados foram obtidos utilizando-se o método da calibração externa, com soluções padrão aquosos dos analitos. Esta possibilidade tornou o processo analítico mais simples e rápido, se mostrou adequado e foi possível, principalmente, pelo fato das concentrações dos analitos nas amostras serem altas, exigindo a diluição dos extratos finais, o que reduziu o efeito da matriz. Dez amostras de óleos lubrificantes novos de diferentes tipos e especificações foram analisadas pelo método proposto e pelo método de referência, baseado na digestão total da amostra assistida por micro-ondas, e foi observada uma excelente concordância entre os valores obtidos pelos dois métodos para os três analitos avaliados (Ca, Mg e Zn).

Tabela 1: Parâmetros avaliados para o desenvolvimento da EIEB:

| Parâmetros estudados | Faixa estudada |
|--|--------------------------------------|
| Solvente | tolueno, xileno, etilbenzeno, hexano |
| Proporção do solvente, % (v/v) | 20 a 50 |
| [HNO ₃], mol L ⁻¹ | 0,7 a 7,0 |
| [Triton X 114], % (m/v) | 0,5 a 15 |
| Processo de quebra de emulsão | aquecimento e centrifugação |

Enrichment factor and mineralogical and chemical characteristics of sediments from a Brazilian Amazonian river

Enrique R. D. Calderon (PQ)^{1*}, Alejandro Duarte (PQ)², Roberto Avillez (PQ)³, Elizanne P. S. Justo (PG)¹, Adriana Gioda (PQ)¹.

agioda@puc-rio.br; erdckike@gmail.com

¹Departamento de Química, PUC-Rio; ²Departamento de Ciências da Natureza, Universidade Federal do Acre;

³Departamento de Engenharia Química e de Materiais, PUC-Rio.

Key words: Sediments, chemical and mineralogical composition, Enrichment factor.

Highlights

Mineralogical and chemical analyses of sediments. Enrichment factor of analyzed elements.

Resumo/Abstract

Suspended Sediments (SS) are the particles of rocks and soils carried by the water runoff. The present work aims at considering the concentration of certain compounds or elements to establish geochemical SS characteristics of Southwestern Amazonian watersheds^[1].

Samples of SS were collected at the Acre River of the Purus basin, Brazilian Amazon, and analyzed to determine its chemical and mineralogical composition. By Inductively Coupled Plasma Mass Spectrometry (ICP-MS) and Inductively Coupled Plasma Optical Emission Spectrometry (ICP-OES) was determined the trace and major element compositions.

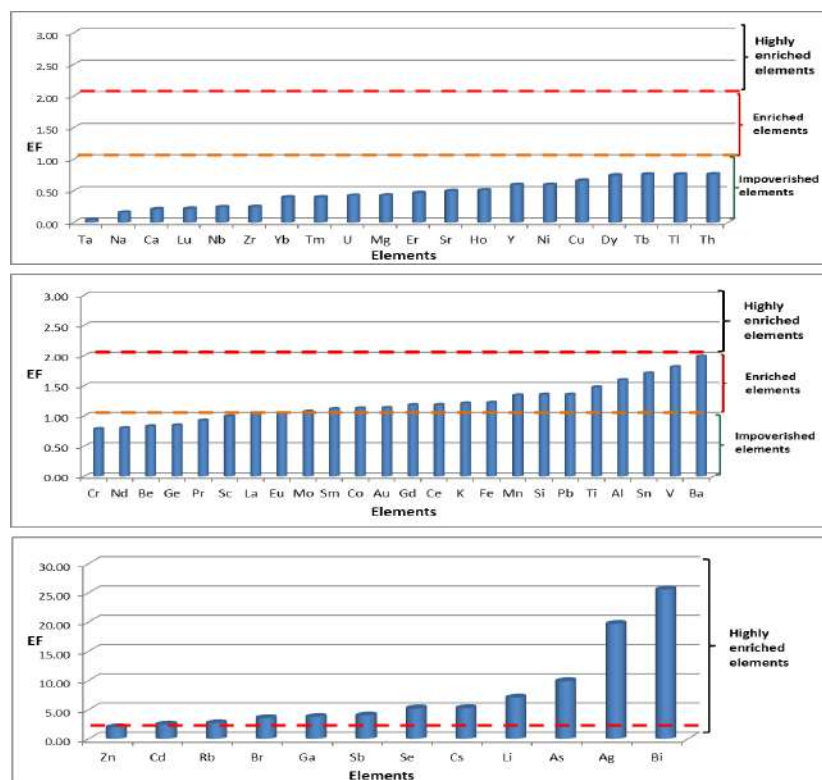


Figure 1 - Values for enrichment factor (EF)

The concentration sorting of trace elements results as follows: Rb>V >Sr>Li>Ce>Ga>Ni>Zr>La>Cu>Nd; while for the major elements: Si>Al >Fe>K>Mg>Ca>Ti>Mn>Ba>Zn>Cr. The mineralogical determination was made by Fourier-Transform Infrared Spectroscopy (FTIR) and X-ray diffraction.

The mineralogical compounds found in the SS were mainly quartz, aragonite, calcite, kaolinite, smectite, hematite, orthoclase and microcline feldspar.

The enrichment factor^[2] of the analyzed elements is presented in Figure 1. Values between 1 and 2 mean enrichment as for Sm, Co, Au, Gd, Ce, K, Fe, Mn, Si, Pb, Ti, Al, Sn, V and Ba, and those above 3 mean highly enrichment as for the case of Rb, Br, Ga, Sb, Se, Cs, Li, As, Ag, Bi. These geochemical characteristics evidence large weathering intensity in Purus basin.

[1] ANA, Agência Nacional de Águas. *Conjuntura recursos Hídricos Brasil-Relatório pleno-2017*.

[2] Borrego J. *Holocene*, 2005, 223-226.

Agradecimentos/Acknowledgments

CAPES, CNPq e FAPERJ.

Área: ANA

Nº de Inscrição: 00810

Microwave-Assisted Solid Sampling System for the analysis of Polymeric Samples using FF-AAS

Jeniffer M. Vaz (PG),¹ Alessandra S. Henn (PG),¹ Angélica C. Frohlich (PG),¹ Matheus F. Pedrotti (PG),¹ José N.G. Paniz (PQ),¹ Erico M.M. Flores (PQ),¹ Cezar A. Bizzi (PQ).^{1*}

jm.1988@hotmail.com; c_bizzi@yahoo.com.br

¹Departamento de Química, UFSM

Palavras Chave: *Microwave-induced combustion; Microwave-Assisted Solid Sampling; Monomode microwave; FF AAS.*

Highlights

A portable microwave-assisted solid sampling system is proposed; It can be easily adapted to any conventional atomic absorption spectrometer; The method avoids sample digestion, which requires the use of large volumes of reagents. Calibration was performed using reference solutions, avoiding the necessity of CRMs for calibration.

Resumo/Abstract

Flame atomic absorption spectrometry (F AAS) is a widespread technique used for elemental determination. The robustness and relative low cost makes F AAS attractive for routine analysis. However, it presents some limitations especially regarding to sensitivity and limit of detection, being a drawback of this technique when looking for trace analysis. Microwave-induced combustion (MIC) was proposed and successfully applied for decomposition of many kinds of samples for both metals and nonmetals determination.¹ In previous works,^{2,3} MIC method was coupled to flame furnace atomic absorption spectrometry (MIC-FF-AAS), which was performed using a homemade microwave oven. With this combination direct analysis of solid samples was carried out, making not necessary a sample preparation step previously to the analysis, and thus improving the LODs. However, since a homemade microwave oven was used, the proposed method remained not well designed for laboratory routine. In order to overcome these limitations, in the present work a new portable device based on a monomode microwave applicator was developed and applied for microwave-assisted solid sampling (MW-SS-FF-AAS). This system consists of a quartz tube located inside of a metallic waveguide placed immediately in front of the spectrometer atomizer. With this modification, the path of the gaseous products originated during sample combustion was reduced, minimizing the risks of analyte loss due condensation. As an example, Cd and Pb were determined in polymers samples in order to demonstrate the potential of the proposed system. Samples were weighed directly on a quartz boat, containing a small piece of filter paper wetted with 6 mol L⁻¹ NH₄NO₃ solution, and it was introduced into the microwave system for inducing sample combustion. Oxygen was continuously introduced into the quartz tube as an aid for the sample combustion, as well as to carry combustion products to the atomizer. Microwave radiation was kept on until the sample ignition. After that, microwave radiation was stopped and atomic absorption signals were recorded. The calibration using aqueous reference solutions and some operational conditions such as igniter volume, oxygen flow rate, FF tube design, flame stoichiometry, and sample mass were evaluated. The proposed combustion system is portable and might be easily adapted to any conventional atomic absorption spectrometer, increasing the range of applications of this well-known technique.

Agradecimentos/Acknowledgments

CNPq, CAPES, FAPERGS.

¹ Flores EMM, Barin JS, Paniz JNG, Medeiros JA, Knapp G, Analytical Chemistry, 76, 2004, 3525.

² Barin JS, Bartz FR, Dressler VL, Paniz JNG, Flores EMM, Analytical Chemistry, 80, 2008, 9369.

³ Hohne L, Bartz FR, Bizzi CA, Paniz JNG, Dressler VL, Flores EMM, Journal of the Brazilian Chemical Society, 21, 2010, 978.

Avaliação teórica e experimental da atividade anticorrosiva de enaminoésteres frente ao aço-carbono em meio ácido

Mariana Falcão Lopes Princisval Carlos (PG),¹ Arthur Valbon (PG),¹ Neubi Francisco Xavier Junior (PG),² Margareth Rose L. Santos (PG)¹, Glauco Favilla Bauerfeldt (PQ)¹, Aurea Echevarria (PQ).^{1*}

marianaprincisval@gmail.com; echevarr@hotmail.com

¹Departamento de Química, UFRRJ.

Palavras Chave: Corrosão, Enaminoésteres, Aço Carbono, Modelagem Molecular.

Highlights

Theoretical and experimental evaluation of the anticorrosive activity of enaminoesters against carbon steel in acid medium. This work involved the evaluation of anti-corrosion effect of enaminoesters on carbon-steel in HCl. The effects by electrochemical techniques showed a good correlation with the theoretical results.

Resumo/Abstract

Corrosão pode ser definida como a deterioração de materiais, geralmente metálicos, por ação física, química ou eletroquímica do meio. Dentre os diversos materiais que podem sofrer corrosão, o aço carbono é o mais utilizado na indústria. Enaminoésteres são compostos considerados potenciais inibidores de corrosão devido a presença de grupos acila, amino e ligação dupla. Neste trabalho, três enaminoésteres foram sintetizados, derivados da anilina, benzilamina e fenetilamina, e sua atividade anticorrosiva avaliada através de experimentos eletroquímicos: Polarização Potenciodinâmica, Resistência à Polarização Linear e Espectroscopia de Impedância Eletroquímica. Cálculos teóricos foram utilizados para calcular a energia do orbital de fronteira HOMO (E_{LUMO}), LUMO (E_{HOMO}), a diferença de energia entre os orbitais ($\Delta E_{LUMO-HOMO}$) e momento de dipolo (μ).

A síntese dos enaminoésteres foi realizada a partir da amina correspondente e acetoacetato de etila na presença de ácido p-tolueno sulfônico e peneira molecular em etanol. Os testes eletroquímicos foram realizados utilizando soluções do enaminoéster em etanol em 4 concentrações. As medidas eletroquímicas foram realizadas para calcular a eficiência de inibição (η_{RPL} e η_{EIE} , respectivamente), e PP para analisar o comportamento do inibidor. A Tabela 1 mostra os resultados para a concentração de $1,0 \times 10^{-2} \text{ mol.L}^{-1}$.

Tabela 1. Resultados obtidos para eficiência de inibição dos enaminoésteres

| Inibidor $1,0 \cdot 10^{-2}$ (mol.L^{-1}) | EIS | | LPR |
|--|-------------------------|------------------|------------------|
| | OCP/ Ag/AgCl (mV) | η_{EIE} (%) | η_{RPL} (%) |
| EN1 | -409 | 90 | 92 |
| EN4 | - 457 | 83 | 91 |
| EN7 | - 488 | 80 | 78 |

O estudo das propriedades que influenciam a eficiência de inibição da corrosão foi realizado no programa ORCA, em nível M06-2X/6-31G(d,p). Os valores de energia dos orbitais HOMO-LUMO foram obtidos através de cálculos *single-point* em nível RHF/6-311++G(2d,2p). Os resultados são mostrados na Tabela 2.

Tabela 2. Parâmetros teóricos calculados pelo método DFT para os enaminoésteres.

| Inibidor | E (eV) | | $\Delta E_{LUMO-HOMO}$ (eV) | μ (D) |
|------------|----------|---------|--------------------------------|-----------|
| | HOMO | LUMO | | |
| EN1 | -7,1309 | -0,0584 | 7,0725 | 6,84537 |
| EN4 | -8,1332 | 1,1267 | 9,2599 | 6,11221 |
| EN7 | -8,7036 | 1,1123 | 9,8159 | 5,33433 |

Os resultados obtidos permitiram observar que **EN1** apresentou menor valor de $\Delta E_{LUMO-HOMO}$ e maior valor de momento dipolar correlacionado com a maior eficiência nos ensaios experimentais. Ademais, o método teórico pode ser usado como prospecção para descobrir novos agentes de inibição da corrosão. Neste trabalho, concluiu-se que o uso dos enaminoésteres pode ser uma alternativa promissora na inibição da corrosão do aço-carbono em meio ácido.

Agradecimentos/Acknowledgments

CAPES, CNPq, FAPERJ e PETROBRAS.

Determinação Quantitativa de Corantes Artificiais em Alimentos por meio de Eletroforese em Gel e Detecção por Imagem Digital

Maria Luíza de A. Rodrigues (IC),¹ Gerson F. S. Neto (PG),^{1*} Alexandre Fonseca (PQ),¹

rodriguesmalu1201@gmail.com; gerson-sn@hotmail.com

¹Instituto de Química, UnB

Palavras Chave: *Eletroforese em Gel, Imagens Digitais, Corantes Alimentícios*

Highlights

Quantitative Determination of Artificial Dyes in Foods by Gel Electrophoresis and Digital Image Detection. Rapid, easy and efficient separation of food dyes. Acquisition of image-based electropherograms with a webcam and lab-made setup and software. Determination of usual dyes in powder refreshments.

Resumo/Abstract

Esse trabalho descreve o desenvolvimento e avaliação analítica de um método gel-eletrorético para a determinação quantitativa de corantes alimentícios em amostras de refrescos em pó baseado na detecção por imagens digitais. Para a realização dos estudos foi construído um ambiente iluminado com fita de LED branco e captação das imagens com uma webcam (Logitech HD 1080p- 15MP). Um programa de computador foi escrito em VisualStudio 2013, permitindo a obtenção de eletroferogramas, baseados na resposta do sistema de cor RGB das imagens, para até nove trilhas de separação em tempo real. As medidas foram conduzidas em gel de agarose (2% m/v), Tampão Tris-Acetato-EDTA (TAE – 1X) e tensão aplicada de 250 V. Foram realizadas as separações dos corantes amarantho (AM) e azul brilhante (AB), usualmente presentes em refrescos artificiais de uva, e também dos corantes tartrazina (TTZ) e amarelo crepúsculo (AC), presentes em refrescos de laranja e maracujá. A Figura 1 mostra as imagens dos géis e os eletroferogramas obtidos para as referidas separações empregando-se misturas dos corantes em diferentes concentrações (AB 4,0-20 mg L⁻¹; AM 40-120 mg L⁻¹; AC 34-170 mg L⁻¹ e TTZ 50-250 mg L⁻¹). Observa-se que as separações ocorreram de forma eficiente e com elevadas razões sinal/ruído, possibilitando a obtenção de curvas analíticas lineares (R>0,99) para todos os analitos. As medidas apresentaram repetitividade da ordem de 4 % e testes de recuperação realizados com amostras de refresco em pó sabor limão enriquecidos com os padrões apresentaram valores médios de 97%, demonstrando uma boa exatidão do método proposto. Considerando que a análise proposta é realizada em poucos minutos e com uma instrumentação de baixo custo, é possível afirmar que seu uso representa uma alternativa viável aos métodos de cromatografia líquida de alta eficiência, usualmente aplicados para este propósito.

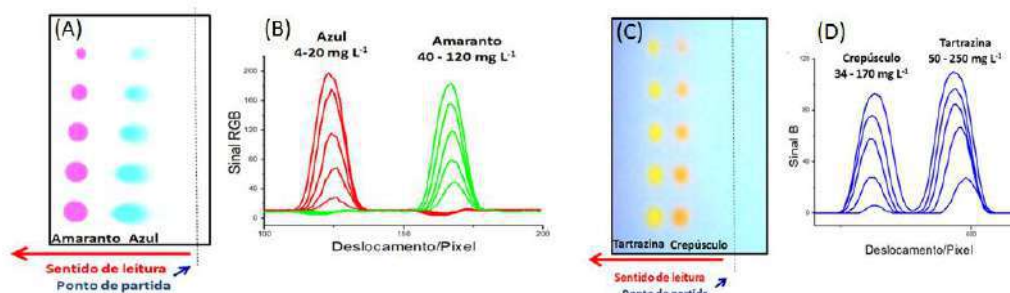


Figura 1 –Imagens do gel de agarose após corridas eletroforéticas para a separação de azul brilhante e amarantho (A) e amarelo crepúsculo e tartrazina (C) com os eletroferogramas obtidos para a separação de azul brilhante e amarantho (B) e amarelo crepúsculo e tartrazina (D)

Agradecimentos/Acknowledgments

À FAP- DF proc. 0193.001318/2016 e ao programa CNPq/PIBIC UnB

Synthesis and Characterization of new PMDI derivative.

Cassiano Tomasi (IC)¹, Natalia Preve (IC)¹, Suelen S. da Silva (TC)¹, Gustavo C. Costa (IC)¹, Antonio Chepluki (IC)¹, Fábio Z. Galetto (PQ)¹, Sumbal Saba (PQ)¹, Fernando Pelisser (PQ)¹, Jamal Rafique (PQ)², Hugo C. Braga (PQ)³, Felipe Grillo (PQ)⁴, Fernando Ely (PQ)⁵, Alexandre Dal Bó⁶, André A. Vieira (PQ)⁷, Tiago E. A. Frizon (PQ)^{1*}.

cassianotomasi@gmail.com; tiagofrizon@gmail.com*

¹Federal University of Santa Catarina (UFSC); ²Federal University of Mato Grosso do Sul (UFMS); ³Federal University of São Paulo (UNIFESP); ⁴Federal Institute of Espírito Santo (IFES); ⁵Centro de Tecnologia da Informação Renato Archer – CTI; ⁶University of Southern Santa Catarina (UNESC); ⁷Federal University of Bahia.

Key-words: Pyromellitic Diimides (PMDI), Solar Cell, Organic Materials.

Highlights

- Conversion of solar radiation into electricity.
- Organic Solar Cells.
- Synthesis of new materials absorbing solar radiation.

Introduction

Solar energy is a clean form of electric power generation. Solid junction devices, often made up of silicon, make the conversion of solar energy into electrical. These devices, called photovoltaic cells, have been gaining adaptations in their structure, due to the addition of nanocrystalline materials, thin films derived from organic compounds, among others. According to Grätzel¹, since scientists discovered the photoelectric effect, researchers were enthusiastic about aiming to convert light into electrical energy or chemical fuels. Organic materials have been of great interest to researchers and engineers because they are flexible and have greater viability in the manufacturing process². The objective of this work is the development of a new organic compound derived from Pyromellitic Diimides (PMDI) for possible application in solar cells.

Results e Discussion

The synthetic route used to obtain the final compound (3) is based in the reaction between an aromatic amine (2) and pyromellitic diimides (PMDI), (1) under reflux in acetic acid for 24h. The precipitate obtained was purified by column chromatography, resulting the desired compound in 81% yield. Figure 1, shown below, demonstrate the ¹H NMR spectrum for the final compound (3).

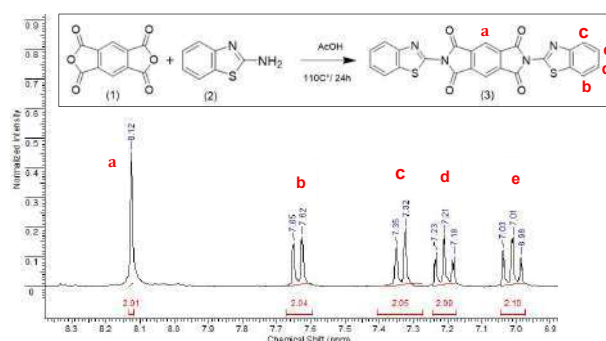


Figure 1. ¹H-NMR spectrum of the final compound (3) in DMSO-d⁶.

In the ¹H NMR spectrum (Figure 1), five signals can be observed, one of which relates to the central aromatic hydrogens of molecule (a) at 8.12 ppm (2H). The presence of other four signals (b, c, d and e) are relative to the aromatic system derived from the amine (2) is observed in the region of the aromatic hydrogens, being: 7.65 ppm (2H); 7.35 ppm (2H); 7.21 (2H) and 7.01 (2H), thereby confirming the desired final compound.

Conclusions

An efficient synthetic methodology was used to obtain the final compound (3) with 81% yield from the reaction of aromatic amine and PMDA. Thermal Stability Analyzes and Photochemical Evaluation were being carried out for its application in solar cells.

Acknowledgments

UFSC, CNPq, LNLS and CEBIME.

¹Gratzel, M. *Nature*, v. 414, p.338-344, nov. 2001. ²Ebisawa, s. Et al. *European polymer journal*, v. 46, n. 2, p.283-297, fev. 2010.

Um jogo para revisão de conteúdo de Química Orgânica no contexto do programa de Residência Pedagógica: desenvolvimento e aplicação

Ana Beatriz Silva Velloso (IC)^{1*}, Elaine Cristina Santos da Silva (FM)², Juliana Barretto de Toledo (PQ)¹, Rodrigo Alves de Souza (FM)³

biatriz.sv@hotmail.com

¹Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia de São Paulo – IFSP, campus Matão/SP; ²E. E. José Inocêncio da Costa, Matão/SP; ³Secretaria da Educação do Estado de São Paulo, Araraquara/SP.

Palavras-Chave: Jogo, Lúdico, Química Orgânica, Revisão de conteúdos, Residência Pedagógica.

Highlights

A game for Organic Chemistry content review in the context of Pedagogical Residence program: development and application

Elaboration and application of a board game similar to the 'Face to Face', used to review the content of organic functions to students of the 3rd year from state high school of Matao, SP, Brazil.

Resumo/Abstract

Paulo Freire (2013) acreditava que ensinar não era apenas transferir conteúdos, ao modo “educação bancária” – termo cunhado por ele –, através da deposição de conhecimento do professor ao educando. Ensinar exigia respeito à autonomia, propiciar o protagonismo e respeitar os saberes discentes (FREIRE, 2017).

Uma alternativa metodológica capaz de construir conhecimentos via cooperação sociointelectual na sala de aula e consonante ao exposto seria o uso de meios lúdicos. Nesse sentido, Kishimoto (1994), utilizando jogos, concluiu que eles auxiliam aspectos como: fixação de conteúdo, raciocínio, domínio psicossocial, pensamento crítico e relações interpessoais. Assim, diante de numerosas informações compreendidas no tema Funções Orgânicas, objetivou-se gerar maior compreensão e tornar os estudantes sujeitos mais ativos da própria aprendizagem, inserindo um jogo.

Buscou-se, durante a revisão de conteúdos do tema supramencionado, adaptar aos terceiranistas do Ensino Médio o jogo cara a cara® (Estrela, 2019).

No último bimestre de 2018, em uma escola pública estadual e durante intervenções do projeto Residência Pedagógica/Capes, aplicou-se um jogo de tabuleiro (Figura 1) construído com materiais acessíveis: papel cartão, papelão, tesoura, cola e tinta esferográfica. As turmas envolvidas eram heterogêneas em níveis de aprendizagem e a abordagem focou a revisão dos conteúdos, para suplementar os conteúdos teóricos trabalhados pela docente responsável pelas turmas.

Em geral, a aceitação foi positiva, de acordo com a dinâmica da aplicação observada, de discussões posteriores envolvendo os participantes e também das opiniões emitidas sobre a eficácia da proposta na aprendizagem dos estudantes envolvidos.



Figura 1. Layout do jogo desenvolvido e aplicado na revisão dos conteúdos sobre funções orgânicas.

Agradecimentos/Acknowledgements: Capes – Residência Pedagógica, pela bolsa IC de A. B. S. Velloso.

Referências/References

- ESTRELA. Jogos. Tabuleiro. Disponível em: <<https://www.estrela.com.br/jogos/tabuleiro>>. Acesso em: 28 jan. 2019.
- FREIRE, P. **Pedagogia da autonomia**: saberes necessários à prática educativa, 55 ed., São Paulo: Paz e Terra, 2017. 143 p.
- FREIRE, P. **Pedagogia do oprimido**, 54 ed., São Paulo: Paz e Terra, 2013. 256 p.
- KISHIMOTO, T. M. **O jogo e a educação infantil**. São Paulo: Pioneira, 1994. 62 p.

Development of a comprehensive study on base-controlled regioselective functionalization and C-H borylation of indolizines

Camila R. de S. Bertallo (PG),^{1*} Thais R. Arroio (PG),¹ Patrick G. Steel,² Giuliano C. Clososki (PQ).¹

camsouza@usp

¹Núcleo de Pesquisas em Produtos Naturais e Sintéticos, Universidade de São Paulo, Ribeirão Preto – SP, Brasil

²Durham University, Department of Chemistry, England, UK.

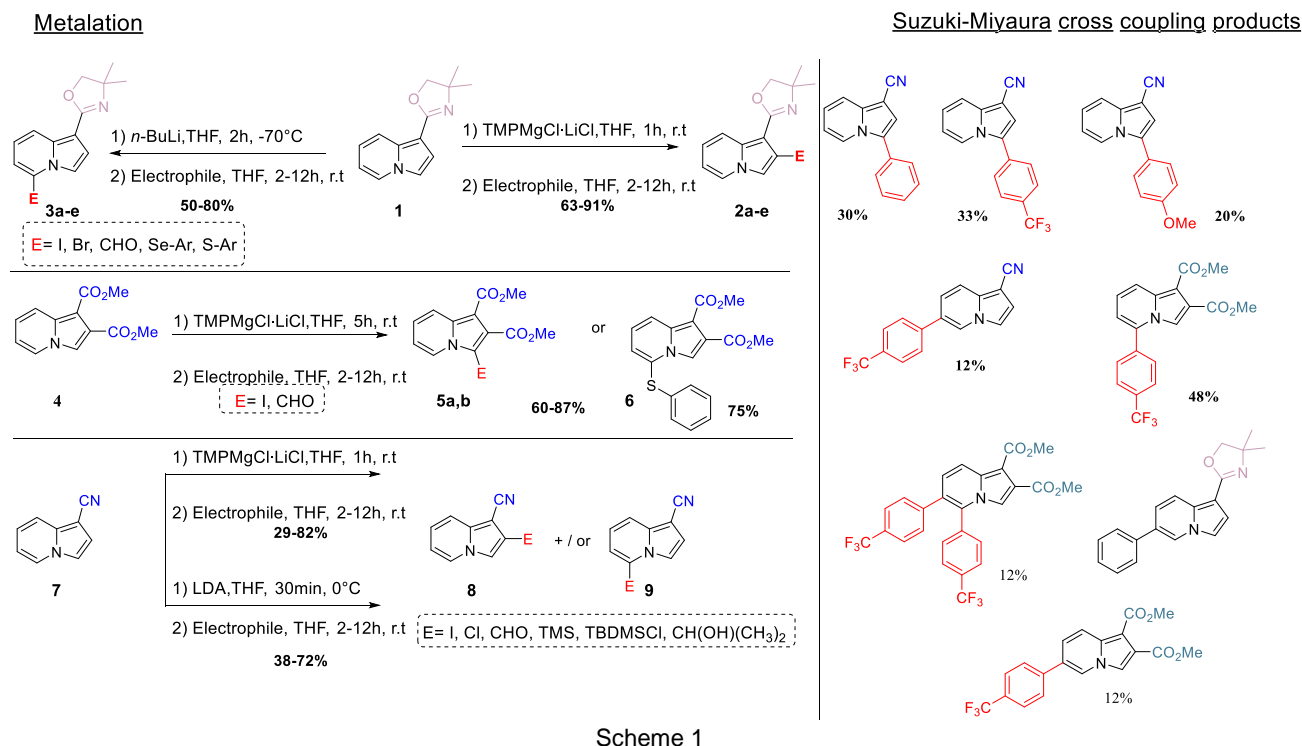
Keywords: *indolizine, bioactive compounds, metalation, C-H activation / borylation, Suzuki-Miyaura cross coupling.*

Highlights

Base-controlled regioselective functionalization; Iridium catalyzed C-H activation/ borylation of indolizines.

Resumo/Abstract

Over the last few years, indolizines have received great attention due to its successful application in many fields, such as agrochemicals, pharmaceuticals and in medicinal chemistry. This success is because indolizine scaffolds have been found in many bioactive natural products, drug molecules and organic fluorescent materials. Consequently, many synthetic strategies have been developed for the construction of new functionalized indolizines. Among the most important methodologies are Tschitschibabin reaction, 1,3-dipolar cycloadditions, cycloisomerization and intramolecular cyclization. In this work, we have investigated the preparation of disubstituted indolizines through a base-controlled regioselective functionalization of molecules **1**, **4** and **7** using alkyl lithium or lithium amides and TMPMgCl·LiCl. It was possible to observe C-2 or C-5 selectivity depending on the basis for substrate **1**, C-3 or C-5 selectivity depending on the electrophile for substrate **4** and mixture of C-2 and C-5 products for indolizine **7** for both bases (Scheme 1). Complementary to this study a C-H activation/borylation protocol using [Ir(OMe)cod]₂ as catalyst follow by Suzuki-Miyaura cross coupling was applied in order to investigate regioselectivity and obtain a library of indolizine derivatives.



Agradecimentos/Acknowledgments

The authors are grateful for the financial support of FAPESP, CNPq and CAPES.

42ª Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química: Eixos Mobilizadores em Química

Development of an electrochemical immunosensor for the analysis of the HER2 breast cancer biomarker

Thaynara Dannehl Hoppe (IC),* Gabriele Smanhotto Malvessi (IC), Daniela Brondani (PQ)

thay-dannehl@hotmail.com

Departamento de Ciências Exatas e Educação, UFSC – Campus Blumenau.

Keywords: Electrochemical immunosensor, Gold nanoparticles, HER2 antigen, Breast cancer.

Highlights

Label-free electrochemical immunosensor based on carbon rod from discharged batteries, nanomaterials and electroactive compounds.

Determination of HER2 antigen biomarker for breast cancer diagnostic.

Abstract

According to the World Cancer Research Fund International, breast cancer is the most common type of cancer and the second leading cause of death related to cancer in women [1]. The electrochemical immunosensors are analytical tools designed to simplify the detection of some processes including the detection of diseases. Among the promising methodologies for cancer diagnostics, the application of the electrochemical immunosensors presents shorter times of analysis, the improvement of the sensitivity and the reduction of costs [2]. This work aimed to develop an electrochemical immunosensor for the detection of HER2 (Human Epidermal growth factor Receptor-type 2) in human serum samples. For this, the carbon electrode was constructed using carbon rod from discharged AAA batteries, and its surface was covered with a redox probe and a film of gold nanoparticles stabilized in k-carrageenan (AuNP-KC). Several dyes and metal complexes were tested as redox probe. The methyl red dye showed the best performance for detection of HER2 among the tested compounds. The construction (4 steps) and operation of the immunosensor are shown in Figure 1, using the detection of the analytical signal of the redox probe ("base peak") obtained by square wave voltammetry (SWV). The proposed immunosensor has been used to determine the concentration of HER2, which is proportional to the suppression of base peak current. The experimental conditions, such as the antibody immobilization time (20 min), the sample incubation time (10 min), the redox probe concentration of (1.0%, w/v) and the SWV parameters (pulse amplitude of 70 mV, frequency of 90 Hz, scan increment of 5 mV) were optimized. A calibration curve was constructed under the best conditions, and its linear range included the cut-off value (15 ng mL⁻¹) [1]. Any concentration above this HER2 critical concentration in blood serum is

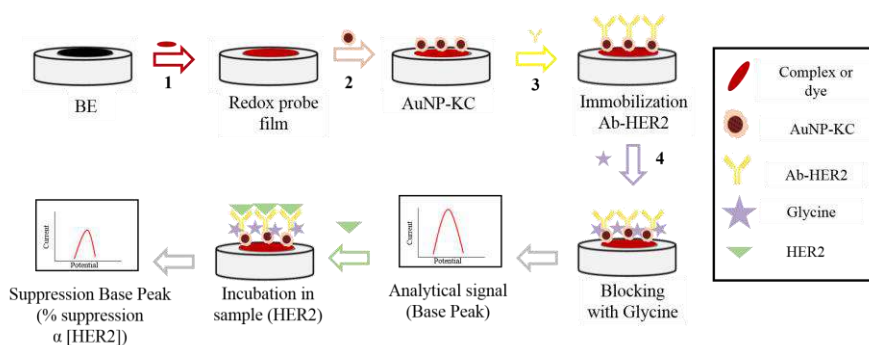


Figure 1. Schematic illustration of the proposed immunosensor construction and operation.

an indicative of the possible development of breast cancer. The studies in terms of reproducibility, stability and application in real samples will be carried out.

[1] TALLAPRAGADA, S. D. *et al.* **Bioelectrochem.**, 118, 25–30, 2017.

[2] SHARMA, S. *et al.* **Biosens. Bioelectron.**, 106, 78–85, 2018.

Acknowledgments

CNPq, UFSC-Blumenau, Laboratory of Electroanalytical and Sensors (LAES).

Development of a green HPLC-PAD method for determination of the Vancomycin in human plasma

Isabela P. Ferraz (IC)¹, Daniela Ponce (PQ)², Daniel Rinaldo (PQ)^{1*}

isabela.ferraz@unesp.br; daniel.rinaldo@unesp.br

¹Department of Chemistry, FC-UNESP; ²School of Odontology, FOB-USP

Key words: Vancomycin, HPLC, Cromatography, Green chemistry.

Highlights

- Environmental approach for development of HPLC method.
- Replacement of toxic solvents with non-toxic and sustainable solvents for analysis by HPLC.
- Analysis of *Vancomycin* by HPLC without generating toxic waste.

Abstract

Vancomycin is the antibiotic commonly used for infection control in the intensive care setting by hospital pathogens, including patients who require dialysis support, such as those with sepsis, which is the major cause of acute kidney injury (AKI). It stands out that different dialytic methods may partially or totally remove it, since the pharmacokinetics of these agents is unpredictable under these clinical conditions. One of the most widely used analytical techniques for the determination of this drug in human plasma is HPLC. However, large quantities of toxic solvents are used by this separation technique, with an estimated 34 million liters of contaminated effluent per year worldwide. Many studies performed in HPLC bring acetonitrile and methanol as mobile phase. Therefore, a method was developed for the analysis of Vancomycin in human plasma by HPLC-PAD (Photodiode Array Detector) using ethanol and water as the mobile phase, aiming at reducing or eliminating the production of toxic residues by applying the Green Chemistry concepts. In order to reach this objective, 16 samples of human plasma were collected in the last two hours of dialysis. The samples were prepared by clean-up where 200 μ L of the plasma were solubilized in 500 μ L of EtOH. After that, samples were centrifuged, dried and resuspended in 200 μ L of H₂O and 0.5 % acetic acid. The aliquots were analyzed by HPLC-PAD (Jasco®, PU 2089 plus pump, PAD MD 2010 plus detector, AS 2055 plus automatic injector) with reversed phase analytical column C₁₈ Luna (Phenomenex®, 250x4.6 mm, 4 μ m) with a guard-column (Phenomenex®, 4x3 mm, 4 μ m) and binary solvent system H₂O + 0.5% acetic acid (A) and Ethanol (B), at 35 °C and flow-rate of 1 mL min⁻¹. The elution program was 5 to 36% B in 10 min and 6 min of cleaning.

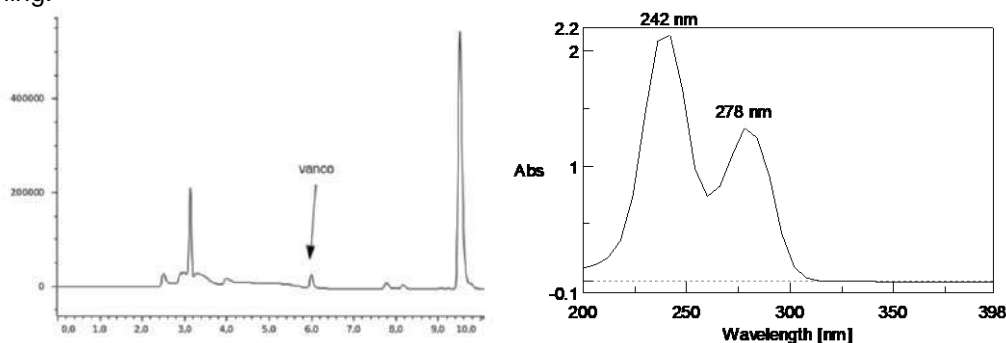


Fig 1. Cromatogram ($\lambda = 278$ nm) and UV spectrum of vancomycin. [Column: C₁₈, Luna (Phenomenex®, 250x4.6 mm, 4 μ m). Mobile phase: H₂O + 0.5 % acetic acid (A) and EtOH (B) at the following gradient: 5–36% B in 10 min. Flow-rate: 1 mL min⁻¹. Temperature of analysis: 35 °C; injection volume: 50 μ L.]

Acknowledgments

The authors gratefully acknowledge financial support from the State of Sao Paulo Research Foundation (FAPESP), grant # 2018/08173-5, Brazil.

Exploring the interface organic synthesis/medicinal chemistry in the search of novel antineoplastic quinazolines and quinolines

Thiago dos Santos (PG),¹ Valter E. Murie (PG),¹ Rodolfo H. V. Nishimura (PG),¹ Giuliano C. Clososki (PQ)^{1*}.

thiagosantos@usp.br; gclososki@fcrp.usp.br*

¹Núcleo de Pesquisa em Produtos Naturais e Sintéticos, Faculdade de Ciências Farmacêuticas, Universidade de São Paulo – Ribeirão Preto, SP 14040-903, Brazil

Keywords: Tyrosine Kinase receptor, anticancer, magnesium-halogen exchange, verubulin analogs.

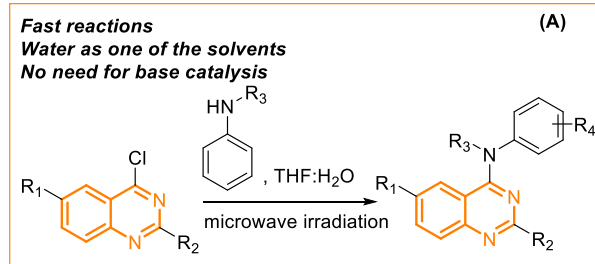
Highlights

Practical protocols for synthesis of Verubulin analogs and functionalized quinolines aiming antineoplastic activity.

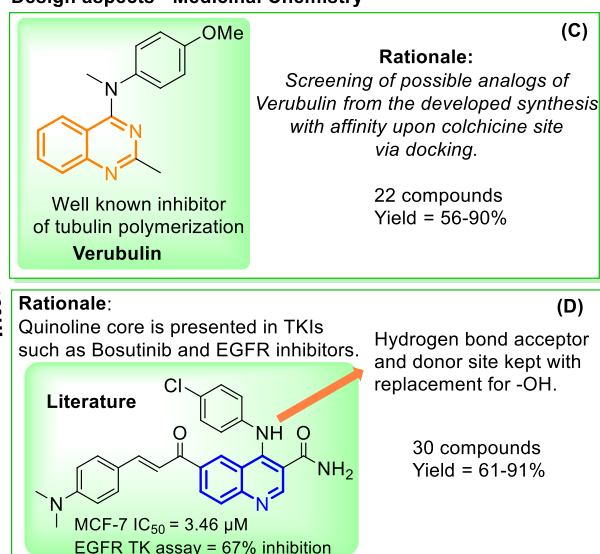
Abstract

Highlighting the medicinal appealing of quinazoline and quinoline cores in pharmaceuticals, tyrosine kinase inhibitors (TKIs), such as Erlotinib, Afatinib, and Cabozantinib also face drawbacks related to toxicity, serious side effects, and ineffectiveness upon acquired mutations.^{1,2} Even though the tubulin polymerization inhibitor, Verubulin, has proved to be effective upon glioblastoma multiforme, no longer development has been made into its approval by FDA and insertion in the drug market.³ Herein we report practical synthetic protocols for the synthesis of Verubulin analogs and quinoline derivatives aiming bioactive small molecules against tumor cell proliferation (**Scheme 1ab**). 4-chloroquinazolines substituted at 6 position were successfully reacted with *N*-methylanilines in a mixture of THF:water under microwave irradiation in short times (10-40 minutes) and great yields (56-90%) leading to a library of 22 novel Verubulin analogs (**Scheme 1c**). Exploring the reactivity of 7-chloro-4-iodoquinoline, a selective magnesium-iodo exchange was astonishingly fast followed by organomagnesium trapping with diverse aldehydes. A library of 30 new quinolines was obtained with a yield range of 61-91% (**Scheme 1d**). Antiproliferative assays are being performed with tumor cell strains as a collaboration of Prof. Leticia Lotufo (ICB-USP). Preliminary results highlight the novel quinolines **183H** (IC₅₀ = 10.76µM) and **185A** (IC₅₀ = 11.03µM) against HCT116 (colorectal carcinoma).

Developed synthetic protocol - Organic Synthesis



Design aspects - Medicinal Chemistry



Scheme 1. Strategy of combining synthetic and medicinal chemistry knowledge into bioactive molecules research

Acknowledgments

The authors acknowledge the important support from CNPq, CAPES, FINEP and FAPESP.

42ª Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química: Eixos Mobilizadores em Química

Área: ORG _____
 (Inserir a sigla da seção científica
 para qual o resumo será
 submetido. Ex: ORG, BEA, CAT)

Nº de Inscrição: 827
 (Inserir o número de inscrição do autor
 que fez a submissão)

Síntese e atividade anti-*Trypanossoma Cruzi* de novos N,S-acetais derivados da juglona

Paulo A. F. Pacheco (PG),¹ Thaís de M. Ribeiro (IC),¹ Robson Xavier Faria (PQ),² David R. da Rocha (PQ)¹

davidrocha@id.uff.br; panastacio.fp@gmail.com

¹ Universidade Federal Fluminense, Departamento de Química Orgânica, Niterói, Rio de Janeiro, Brasil; ² Laboratório de Toxoplasmose e outras Protozooses (IOC/FIOCRUZ)

Palavras Chave: naftoquinonas, juglona, *Trypanossoma cruzi*, N,S-acetais.

Highlights

- Chagas' disease (also known as American trypanosomiasis) is a neglected disease, caused by the protozoan parasite *Trypanosoma cruzi*, which affects about 6-8 million people worldwide, mainly in Latin American.
- Benznidazole and nifurtimox are the only currently available chemotherapy for Chagas' disease. However, they both exhibit undesirable side effects and limited efficacy in the prevalent chronic phase of the disease.
- Naphthoquinones have proven to be a valuable source of compounds with anti-trypanosomal activity. In general, naphthoquinones with a hydroxyl substituent on the aromatic ring tend to present higher cytotoxic activity.

Resumo/Abstract

The aim of this work was to synthesize a new series of N,S-acetals derivatives obtained from juglone (**2**) and to evaluate their cytotoxic activity against epimastigote forms of *T. cruzi*. The synthetic route started with the oxidation of 1,5-dihydroxynaphthalene (**1**) to juglone (**2**) with HIO₄ under ultrasound irradiation. The intermediate 3-aminojuglone (**3**) was obtained from the reaction of juglone (**2**) and sodium azide in methanolic acid solution. Finally, the final products were prepared by the condensation of (**3**) with paraformaldehyde and various commercial thiols in chloroform, yielding 11 new derivatives (**4**). Among them, the derivative 4-I showed the best trypanocide activity when compared to the reference drug (BZ).

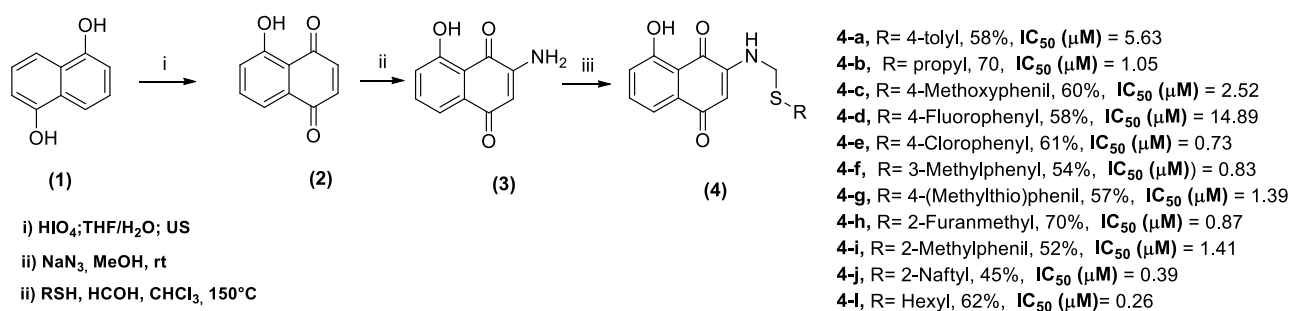


Figure 1. Synthesis of N,S-acetals derivatives 4a-l

Área: ANANº de Inscrição: 00830

Desenvolvimento e Otimização de Método para Determinação de Pb em Hortaliças por Espectrometria de Absorção Atômica em Forno de Grafite

Laiza Alves* (IC), Viviane F. M. Jotta (IC), Patrícia S. Rezende (FM).laizaalves94@yahoo.com.br; patriciarezende@cefetmg.br

Departamento de Química, CEFET-MG, Belo Horizonte, MG, CEP 30421-169, Brasil

Palavras Chave: Chumbo, Hortaliças, Otimização método, GF-AAS.

Highlights

Development and Optimization of method for determination of Pb in vegetables by graphite furnace atomic absorption spectrometry

A factorial design 2³ with central point and a central composite design were used for method optimization. The optimal pyrolysis and atomization temperatures were 334°C and 1552°C, respectively.

Resumo/Abstract

O Chumbo é um elemento nocivo aos seres vivos mesmo em baixas concentrações. Apesar de baixa mobilidade no solo, ele pode ser absorvido por raízes de hortaliças e translocar para partes comestíveis. Este trabalho teve por objetivo desenvolver uma metodologia analítica, utilizando espectrometria de absorção atômica em forno de grafite (GF AAS), para determinar a concentração de Pb em diferentes partes de algumas hortaliças comumente consumidas na alimentação humana cotidiana (alface, espinafre, mostarda). As amostras foram trituradas em partículas finas e decompostas com ácido nítrico purificado e peróxido de hidrogênio em tubo digestor fechado, permanecendo em contato por 2 dias em temperatura ambiente. O material de referência certificado NIST SRM 1570a (Trace Elements in Spinach Leaves) foi submetido ao mesmo procedimento de preparo de amostra. Foi utilizado um GF AAS Varian AA240Z. Primeiramente, realizou-se uma triagem com diferentes modificadores químicos permanentes (Ir, Pd, Rh, Ru, Tl, Zr e sem modificador) sob as condições de análise recomendadas pelo fabricante com o objetivo de encontrar os modificadores que melhor contribuíssem para o aumento do sinal de absorvância e menor sinal de fundo. O tubo recoberto com Ir e o tubo sem modificador promoveram as maiores absorvâncias, menores desvios e menores sinais de fundo, portanto, foram selecionados para a etapa seguinte. Para a otimização, iniciou-se com um planejamento fatorial 2³ com ponto central, seguido por um planejamento composto central (CCD). No planejamento fatorial foram estudados modificador (sem modificador e Ir), temperatura de pirólise - TP (300°C, 500°C e 700°C), e, temperatura de atomização - TA (1600°C, 1900°C e 2200°C). No CCD, fixou-se o Ir como modificador e foram variadas as temperaturas, TP (230°C, 250°C, 300°C, 350°C e 370°C) e TA (1459°C, 1500°C, 1600°C, 1700°C e 1741°C).

Após 48 horas, poucas partículas em suspensão remanescentes foram observadas nos digeridos de amostras e MRC. Obteve-se recuperações acima de 95% para Pb no MRC e quanto à precisão, foram observadas variações entre 4 e 11%. Após a execução do planejamento fatorial, obteve-se o gráfico de Pareto que indicou que o modificador não foi significativo. Desta forma, escolheu-se utilizar o tubo recoberto com Ir para a próxima etapa, porque o uso de modificador permanente contribui para aumentar a vida útil do tubo. Empregando-se Ir como modificador, verificou-se que a absorvância aumenta com uma menor TP em conjunto com uma menor TA. Portanto, realizou-se o CCD diminuindo-se TP e TA e utilizando-se o tubo de Irídio. Como resultado foi encontrado um ponto de máximo em temperatura de pirólise de 334°C e 1552°C para temperatura de atomização. Deu-se início à validação do método, obtendo-se exatidão acima de 96% empregando MRC e testes de adição e recuperação. A precisão foi avaliada em três faixas de concentração (5, 20 e 50 µg/L) e apresentaram desvios menores que 8%.

O método proposto tem como vantagem a possibilidade de se decompor amostras de hortaliças com baixo custo no preparo já que não é necessário o uso de equipamentos para esta etapa. Embora o tempo de preparo seja prolongado, a decomposição em temperatura e pressão ambiente permitem o fechamento do tubo e previnem a perda por volatilização de elementos mais voláteis. Concluiu-se, assim, que a otimização do método foi realizada com sucesso, sendo as melhores condições: modificador permanente Irídio, temperatura de pirólise de 334°C e 1552°C para temperatura de atomização.

Agradecimentos/Acknowledgments

CEFET-MG; CNPq

Área: MED

Nº de Inscrição: 00831

(Inserir o número de inscrição do autor que fez a submissão)

***In vivo* evaluation of anti-*Trypanosoma cruzi* activity of 2-nitroimidazole derivatives**

Marcelly C. S. Rezende (PG), ^{1,2} Policarpo A. S. Junior (PQ), ³ Alcione S. de Carvalho (PQ), ² Nubia Boechat (PQ)²

alcione.carvalho@far.fiocruz.br; nubia.boechat@far.fiocruz.br

¹Programa de Pós-Graduação Farmacologia e Química Medicinal, Instituto de Ciências Biomédicas, UFRJ, Av. Carlos Chagas, 373 - bl. K, 2º andar, sala 35 - Prédio do Centro de Ciências da Saúde, Cidade Universitária, Ilha do Fundão - Rio de Janeiro - RJ, 21941-902, Brasil; ²Departamento de Síntese Orgânica, Instituto de Tecnologia em Fármacos - Farmanguinhos - Fiocruz, Rua Sizenando Nabuco, 100 Manguinhos, Rio de Janeiro - RJ, 21041-250, Brasil; ³Instituto Rene Rachou, Laboratório de Parasitologia Celular e Molecular - Fundação Oswaldo Cruz, Av. Augusto de Lima, 1715 - Barro Preto, Belo Horizonte - MG, 30190-002, Brasil

Keywords: Chagas disease; anti-*Trypanosoma cruzi*; nitroimidazole; benzimidazole

Highlights

The two most active 2-nitroimidazoles tested *in vitro* were *in vivo* evaluated against *T. cruzi*. Although, they were inactive, they have maintained the survival of Swiss mice longer than the control.

Resumo/Abstract

Chagas disease is the most important parasitic infection in South America. However, it is also becoming a global public health issue.^{1,2,3} In this work, we carried out the synthesis and *in vitro* and *in vivo* evaluation of novel 2-nitroimidazoles (**1-28**). Such substances are structural analogues of benzimidazole via bioisosterism strategy (Figure 1).

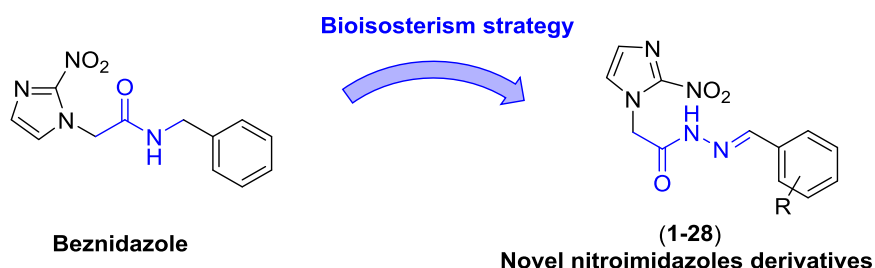


Figure 1. Rational approach to the design of 2-nitroimidazole derivatives (**1-28**).

All 28 novel nitroimidazoles were successfully synthesized with overall good yields. Until now, **13** compounds were *in vitro* evaluated against trypomastigote and amastigote forms of *T. cruzi*. The two most active, (*E*)-*N*-(3-hydroxybenzylidene)-2-(2-nitro-1*H*-imidazol-1-yl)acetohydrazide (**14**) with IC₅₀ of 5.4 μM and (*E*)-*N*-(3-chlorobenzylidene)-2-(2-nitro-1*H*-imidazol-1-yl)acetohydrazide (**10**) with IC₅₀ of 11.6 μM were *in vivo* evaluated on Swiss mice infected with 10.000 parasites of *T. cruzi* (strain Y). In spite of being less efficacious than BZD, compound 10 proved to keep a much higher survival rate (50%) than non-treated control (20%). The assays of the other compounds of the series are in progress.

Acknowledgments: CAPES - Finance Code 001; CNPq; FAPERJ; FAPEMIG; FIOTEC

References and notes: ¹José Bermudez, *et al.* Acta Tropica, 2016, **156**,1-16; ²Juan B. Rodrigues, Expert Opinion on Therapeutic Patents, 2016, **26**,993-1015; ³Sreekanth Thota *et al.* Bioorg Med Chem Lett., 2018, **28**, 2797-2806.

Área: ANANº de Inscrição: 00832

Aplicação da técnica SALLE-HPLC-UV/FD para determinação de aminas biogênicas em produtos alimentares de origem animal

Karen C. A. Francisco (PG)^{1*}, Pedro F. Brandão (PG)², Rui Miguel Ramos (PQ)², Luís Moreira Gonçalves (PQ)³, Arnaldo A. Cardoso (PQ)¹, José A. Rodrigues (PQ)²

karencfrancisco@hotmail.com;

¹Departamento de Química Analítica, Instituto de Química, UNESP, Araraquara-SP, Brasil; ²Requimte/LAQV, Departamento de Química e Bioquímica, Faculdade de Ciências, Universidade do Porto, Porto, Portugal;

³Departamento de Química Fundamental, Instituto de Química, USP, São Paulo-SP, Brasil

Palavras Chave: Aminas biologicamente ativas, Descarboxilação de aminoácidos, Qualidade alimentar, Intoxicação alimentar, Microextração, Química analítica.

Highlights

A SALLE-HPLC-UV/FD methodology for the determination of biogenic amines (BAs) in food products of animal origin. BAs can be chemical freshness indicators for fish and meat. SALLE allows simultaneous extraction and derivatization. Temperature, storage time and food additives influence BAs' formation.

Resumo

Aminas biogênicas (ABs) são compostos formados em alimentos pela descarboxilação enzimática microbiana de aminoácidos livres específicos e podem ser encontradas em vários produtos alimentares de origem animal que contêm proteínas¹. Condições higiênicas precárias durante o processamento e armazenamento dos alimentos propiciam um aumento da atividade microbiana e favorecem o acúmulo de ABs. A concentração de ABs nos alimentos é, portanto, um indicador químico de sua qualidade. Além disso, a ingestão de alimentos que contêm elevadas concentrações de AB pode causar efeitos toxicológicos adversos à saúde humana. A análise de ABs, devido à elevada complexidade das matrizes envolvidas, tem sido um desafio para a química analítica². Neste trabalho, foi estudada a viabilidade da técnica SALLE (*salting-out assisted liquid-liquid extraction*) para determinar os efeitos de condições de armazenamento, tais como temperatura (- 4, 4 e 22 °C) e tempo (até 7 dias), na degradação de peixes e carnes. A SALLE utiliza o efeito *salting-out* para promover a separação de duas fases líquidas miscíveis e aumentar a extração do analito para a fase de menor polaridade³. Entre as importantes vantagens desta técnica destacam-se o uso de pequenos volumes de solventes orgânicos e a possibilidade de realizar extração e derivatização de forma simultânea. A determinação e quantificação das AB foi realizada por cromatografia líquida de alta eficiência (HPLC) equipada com detectores de fluorescência e ultravioleta. Os dados obtidos sugerem que o progresso da degradação dos alimentos pode ser acompanhado pelo aumento dos níveis de cadaverina (CAD), putrescina (PUT), histamina (HIS) e tiramina (TIR), como sintetizado na Tabela 1.

Tabela 1: concentração (mg kg⁻¹) de ABs nas amostras no início das análises e após 7 dias de armazenamento à 22 °C.

| Amostras | CAD | | PUT | | HIS | | TIR | |
|--------------------|-----------------|-------------|---------------|-------------|---------------|---------------|----------|-------------|
| | controle | após 7 dias | controle | após 7 dias | controle | após 7 dias | controle | após 7 dias |
| Sardinha enlatada | 0.1444 ± 0.0068 | 1.61 ± 0.14 | 1.458 ± 0.089 | 8.24 ± 0.51 | < LQ | < LQ | < LQ | < LQ |
| Sardinha | 0.1581 ± 0.0057 | 795 ± 37 | 0.523 ± 0.032 | 183 ± 21 | < LQ | 455 ± 39 | < LQ | 228.9 ± 7.4 |
| Carne bovina | 0.2300 ± 0.0056 | 66.4 ± 8.4 | 0.202 ± 0.012 | 25.3 ± 3.1 | 0.480 ± 0.018 | 0.917 ± 0.040 | < LQ | 76.2 ± 9.8 |
| Salsicha de frango | 5.19 ± 0.28 | 8.2 ± 1.2 | 2.48 ± 0.29 | 2.89 ± 0.62 | 0.381 ± 0.059 | 0.452 ± 0.073 | < LQ | 1.00 ± 0.18 |

¹ M. Papageorgiou. Trends Anal. Chem. 2018, 98, 128-142.

² G.I. Mohammed. Trends Anal. Chem. 2016, 78, 84-94.

³ I.M. Valente, L.M. Gonçalves, J.A. Rodrigues. J. Chromatogr. A. 2013, 1308, 58-68.

Agradecimentos

À CAPES, ao Fundo Europeu de Desenvolvimento Regional (FEDER) e ao Programa Regional do Norte (NORTE 2020) pelos financiamentos e bolsas de estudo concedidos.

Photocatalysis of Ciprofloxacin using tin titanate nanotube

Ludyane N. Costa (PG)¹, José M. E. Matos (PQ),*¹

ludyanec@gmail.com; jmematos@ufpi.edu.br

Key words: (Nanotubes, Photocatalysis, Titanates, Ciprofloxacin)

Highlights

Photocatalysis of Ciprofloxacin using tin titanate nanotube

- Titanate nanotube photocatalyst
- Titanium nanotubes exchanged with Sn²⁺
- Photodegradation of Ciprofloxacin

Resumo/Abstract

The use of antibiotics on a large scale represents a significant threat to ecosystems and human health. Ciprofloxacin (CIP), a typical second-generation fluoroquinolone (CF) antibiotic, is extensively used in human and veterinary medicine because of its wide activity against bacteria and good oral ingestion properties [1]. Unfortunately, CIP ingested by humans or animals is not fully metabolized by the body and much of it is excreted into the environment. Currently, CIP has been detected in different environmental matrices and is a pollutant present in wastewater [2]. Looking for a strategy to reduce such impact, the work in question proposes the use of photocatalysis as an alternative to degrading this drug. Titanium nanotubes were synthesized, and then ionic exchanges were performed with Sn²⁺, to reduce the gap band of the material and favor the photocatalytic process. Figure 1 represents the XRD of the synthesized nanostructures, before and after the ion exchange. It was verified that there was a break in the nanotubular structure and from the transmission electron microscopy the formation of particles is verified. Figure 2 shows the degradation process of ciprofloxacin using the synthesized nanostructures, and it was concluded that the photocatalysis process was efficient.

FIGURE 1: DRX of titanate nanostructures.

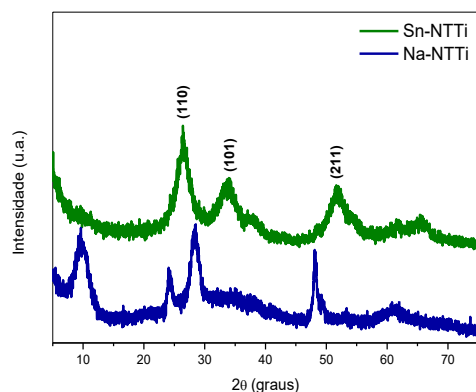
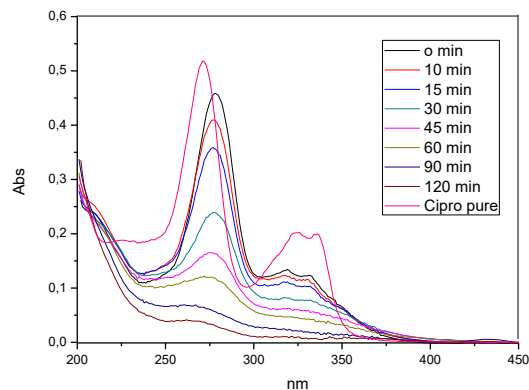


FIGURE 2: Uv-Vis spectra of ciprofloxacin photodegradation



[1] J. Porras, C. Bedoya, et al., Role of humic substances in the degradation pathways and residual antibacterial activity during the photodecomposition of the antibiotic ciprofloxacin in water, *Water Res.* 94, p.1-9, 2016.

[2] Xiao-Ju Wen, et al., Photocatalytic degradation of ciprofloxacin by a novel Z-scheme CeO₂-Ag/AgBr photocatalyst: Influencing factors, possible degradation pathways, and mechanism insight. *Journal of Catalysis* 358, p. 141–154, 2018.

Agradecimentos/Acknowledgments

The authors acknowledge financial support from CAPES and CNPq, the technical support of Center for Strategic Technology of the Northeast (CETENE-PE) and Federal Institute of Education, Science and Technology of Maranhão (IFMA), Barra do Corda-MA.

Synthesis of novel aromatic selenocyanates and evaluation of their effect in cultured mouse neurons submitted to oxidative stress

Suelen S. da Silva (TC)¹, Sumbal Saba (PQ)¹, Jamal Rafique (PQ)², José H. Cararo (PG)³, Monique Michels (PG)³, Beatriz Sonai (PG)³, Mariana Abatti (PG)³, Hugo de C. Braga (PQ)⁴, Gustavo C. Dal-Pont (PG)³, Felipe Dal-Pizzol (PQ)³, Fernando Eli (PQ)⁵, Patricia de A. Amaral (PQ)³, Samira S. Valvassori (PQ)³, Tiago E. A. Frizon (PQ)^{1*}

suelen.s@ufsc.br; tiago.frizon@ufsc.br*

¹Federal University of Santa Catarina (UFSC); ²Federal University of Mato Grosso do Sul (UFMS), Campo Grande, MS, Brazil; ³University of Southern Santa Catarina (UNESC), Criciúma, SC, Brazil; ⁴Federal University of São Paulo (UNIFESP) São José dos Campos, SP, Brazil; ⁵Centro de Tecnologia da Informação Renato Archer - CTI

Key Words: Antioxidants, Drug desig, Oxidative stress, Selenium, Selenocyanates

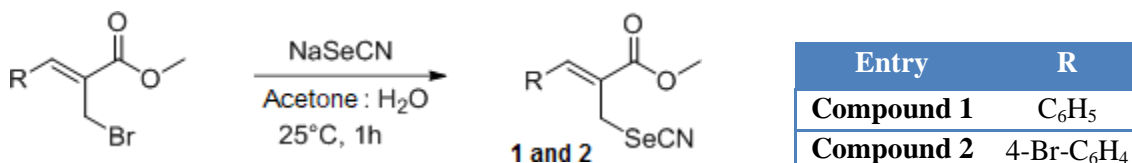
Highlights

Design of novel organoselenium compounds with potential therapeutic application.
Oxidative challenge elicited by hydrogen peroxide in cultured mouse neurons.
Antioxidant activity similar to that of (PhSe)₂.

Resumo/Abstract

Selenium (Se) is an essential trace element for human and other mammals. Furthermore, design of novel organoselenium compounds seems to be of great therapeutic relevance, mainly due to the ability of these compounds to mimic natural substances with antioxidant, antitumor, antimicrobial and antiviral activities.¹ Therefore, present study reports the synthesis of novel aromatic selenocyanates and assessment of their effect on the oxidative challenge elicited by hydrogen peroxide (H₂O₂) in cultured mouse neurons. In comparison to control culture,² TBARS content was significantly increased in the cell cultures receiving H₂O₂ alone or combined with Compound 1. Conversely, addition of Compound 2– or (PhSe)₂ into the medium significantly reduced TBARS levels in cells exposed to H₂O₂. Significantly increased 8- ISO levels were detected in cells exposed to H₂O₂ alone or combined with Compound 1, whereas addition of Compound 2, or (PhSe)₂ in cultures exposed to H₂O₂ produced decrease in this marker. There was also increase in 8-OHdG levels in cells receiving H₂O₂ alone or combined with Compound 1. Additionally, increased carbonyl content was found in cells receiving H₂O₂ alone or combined with Compound 1, whereas addition of Compound 2 or (PhSe)₂ into the cell medium significantly mitigated this alteration. Oxidative challenge also produced significant increase in CAT activity, whereas decrease in this parameter was detected in all cultures in which there was addition of selenocyanate. No significant differences in SOD activity were found between control cultures and neurons receiving H₂O₂, but addition of Compound 1–Compound 2 or (PhSe)₂ elicited upregulation of this activity. Compound 2 exhibited a pattern of antioxidant activity similar to that of (PhSe)₂. These novel aromatic selenocyanate could be promising to be tried in most sophisticated in vitro studies or even at preclinical level.

Table 1. Compounds 1 and 2 from (E)-allylic bromides



Acknowledgments

UFSC, UNESC e CNPq.

¹Frizon, T. E., *Eur J Org Chem.* 2015 Jun; 2015(16): 3470-76.

²Morales, H., *Mol Reprod Dev.* 1999 Feb; 52(2): 149-57.

Comprehensive study of the bio-oil obtained from slow pyrolysis of crambe seeds

Karen T. Stelzer (IC)¹, Vinícius B. Pereira (IC)¹, Raquel V.S. Silva*(PQ)¹, Gilberto A. Romeiro (PQ)², Débora A. Azevedo (PQ)¹.

karenstelzer@yahoo.com.br; raquelvieira@iq.ufrj.br

¹LAGOA – LADETEC, Instituto de Química, Universidade Federal do Rio de Janeiro; ²SINCROMA, Instituto de Química, Universidade Federal Fluminense

Palavras Chave: *Crambe seeds*; *slow pyrolysis*; *bio-oil*; GC×GC-TOFMS; Orbitrap MS.

Highlights

Bio-oil was obtained from slow pyrolysis. High resolution techniques were used for bio-oil analysis. Crambe seed bio-oil is rich in hydrocarbons and N-containing compounds.

Resumo/Abstract

Crambe (*Crambe abyssinica*) is an interesting non-food biomass with a low production cost [1]. A highly studied process for transforming biomass into a higher value-added product is pyrolysis [2]. This work addresses the detailed structural elucidation by high resolution techniques of the crambe seeds bio-oil, obtained from slow pyrolysis at 400 °C with 32% (w/w) yield, and then analyzed by comprehensive bidimensional gas chromatography coupled with time-of-flight mass spectrometry (GC×GC-TOFMS) and positive and negative-ion electrospray (ESI) high resolution Orbitrap mass spectrometry (HRMS). 1,400 analytes were identified by GC×GC-TOFMS and the most abundant classes were hydrocarbons (448.6 mg g⁻¹), consisting of 67.5% of the total identified, and N-containing compounds (172.2 mg g⁻¹). The hydrocarbons identified comprise saturated, unsaturated and aromatic compounds, and alkyl-benzenes were detected in high concentration. Nitrogen-containing identified classes were mostly composed of aromatic rings, such as carbazoles, benzenamines, indoles, pyrazines, pyridines, pyrroles and quinolines, but amides and nitriles were also detected, in relatively high abundance. In the ESI (+) Orbitrap MS, the N2 class was the most abundant (79.9%) and in this class the majority peaks were assigned with DBE 3 (37.7%) in a homologous series containing the molecular formula C_xH_{2x-2}N₂ (X=6-14,18,21). In the negative mode, 87.6% of assigned peaks corresponds to O2 heteroatom class. Since the crambe bio-oil obtained presented a high calorific value (38.9 MJ kg⁻¹) and lower water content (5.4 % H₂O), it has the potential to be used as a second generation fuel according to ASTM D7544 if the gaseous emissions produced from the combustion of N- and O-containing compounds are controlled; or hydrotreated to improve fuel quality, mainly by reducing nitriles, amides, acids, esters and ketones to hydrocarbons.

[1] F. Zanetti, D. Scordia, T. Vamerali, V. Copani, C. Dal Cortivo, G. Mosca, *Crambe abyssinica* a non-food crop with potential for the Mediterranean climate: Insights on productive performances and root growth, *Industrial Crops and Products* 90 (2016) 152-160.

[2] V. Dhyani, T. Bhaskar, A comprehensive review on the pyrolysis of lignocellulosic biomass, *Renew. Energy* 129 (2018) 695–716.

Agradecimentos/Acknowledgments

The authors thank National Council for Scientific and Technological Development and Carlos Chagas Filho Foundation for Research Support of the State of Rio de Janeiro for fellowships and financial support.

Docking-based comparative intermolecular contacts analysis (dbCICA) of the $\alpha 4\beta 2$ and $\alpha 7$ nicotinic acetylcholine receptors (nAChRs)

Victor S. Batista (PG),^{1*} Nailton M. Nascimento-Júnior (PQ).¹

sbatista.victor@gmail.com; nailtonjr@iq.unesp.br

¹Universidade Estadual Paulista "Júlio de Mesquita Filho", Laboratório de Química Medicinal, Síntese Orgânica e Modelagem Molecular (LaQMedSOMM), Instituto de Química, Departamento de Química Orgânica, Rua Professor Francisco Degni, 55, Jardim Quitandinha, CEP 14800-060, Araraquara-SP, Brasil.

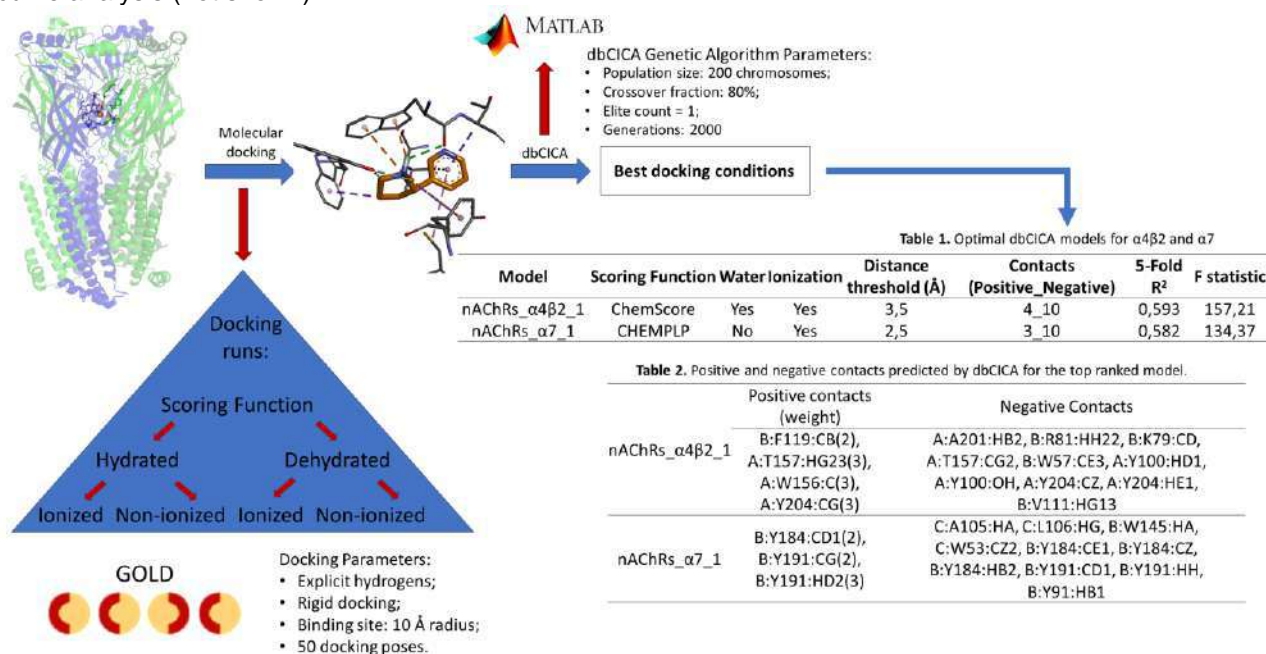
Keywords: nAChRs $\alpha 4\beta 2$, nAChRs $\alpha 7$, Molecular docking, dbCICA.

Highlights

Post-processing of docking results by docking-based comparative intermolecular contacts analysis (dbCICA) was able to successfully identify critical ligand-receptor interactions for molecular recognition of the $\alpha 4\beta 2$ and $\alpha 7$ nAChRs subtypes. Also, the optimal docking conditions for both receptors were identified. The outputs from dbCICA analysis were used to build a pharmacophoric map for the $\alpha 4\beta 2$, which can be used in virtual screening.

Abstract

The nAChRs are pentameric ligand-gated ionic channels that respond to the endogenous neurotransmitter acetylcholine, with the $\alpha 4\beta 2$ and $\alpha 7$ subtypes being highly expressed in human brain. Those receptors are involved in many neurologic disorders such as Alzheimer's disease, Schizophrenia, chronic pain, autism, as well as in nicotine addiction. In this context, molecular modelling is a powerful tool for designing novel ligands targeting those receptors. In this work, we applied dbCICA¹ to identify optimal docking conditions for these two receptors. The methodology and results are summarized bellow. Briefly, bioactive compounds acting on each receptor were docked into the crystal structures obtained from PDB (5KXI² for $\alpha 4\beta 2$ and 5AFH³ for $\alpha 7$) using GOLD and the results were post-processed through dbCICA, a genetic algorithm based approach. These results were used to build a pharmacophoric map for model nAChRs_ $\alpha 4\beta 2_1$, which was validated by ROC curve analysis (not shown).



Acknowledgements:

CAPES (scholarship), FAPESP: Process 2018/00187-7

¹Taha, M.O., *et al.*, J. Chem. Inf. Model., 2011, 51, 647-669 ²Morales-Perez, C. L. *et al.*, Nature, 2016, 538, 411-415. ³Spurny, R. *et al.*, PNAS, 2015, 112, E2543-2552.

Teaching and Learning Organic Chemistry According to High School Teachers

Bianca Motta Batista (IC),¹ Camila Greff Passos (PQ),¹ Maurícius Selvero Pazinato (PQ).^{1*}

*mauricius.pazinato@ufrgs.br

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

Palavras Chave: *Didactic models, conceptions, Chemistry Teachers.*

Highlights

We evaluate the didactic models of a group of high school teachers about the teaching and learning Organic Chemistry, which helps us to understand the link between the thinking process and the reality.

Resumo/Abstract

Many researches^{1, 2} have been dedicated to studying the connection between the teachers' thinking process and their teaching exercise. One convenient scheme in this association is called didactic model, which can be seen as an intermediate between the reality and the professor's ideas, and it is a temporary one, aiming to approximate with reality³. Therefore, the aim of this work is to evaluate the didactic models of a group of high school teachers concerning the teaching and learning Organic Chemistry, and thus obtain evidence of how these topics are being developed by them. The total of 30 high school teachers from public and private networks in the state of Rio Grande do Sul took part in this study and the data collection instrument was a questionnaire adapted from literature², which was composed of the didactic dimensions described by García Pérez³. For each dimension four statements were elaborated that present characteristics of the possible didactic models of the teachers, which may be: traditional, technological, spontaneous and alternative. They answered the questionnaire virtually and assigned a value, from 0 to 3, for each statement that represented their degree of agreement with said statement. In order to determine the predominant didactic model in each dimension, through the *Statistical Package for Social Sciences* (SPSS), the general average and the standard deviation for each statement were calculated (Table 1).

Table 1. Results obtained for the dimensions "Why" and "How" to teach Organic Chemistry

| Dimension | Statements | Average | Standard deviation |
|---------------------------------|--|---------|--------------------|
| Why teach Organic Chemistry? | In order to get my students to become ethical and active citizens in the world in which they live in. | 2,600 | 0,6215 |
| | In order to provide a modern and efficient formation for my students, one that is embedded in the technological world, in which we all need to live together. | 2,233 | 0,6789 |
| | In order to make my student an individual endowed with the knowledge on Organic Chemistry acquired throughout history. | 2,167 | 0,8339 |
| | In order for my student to progressively enrich his knowledge and be able to make increasingly complex readings of the world in which he lives. | 2,467 | 0,7761 |
| How to teach Organic Chemistry? | I come up with activities that stimulate the capacity to analyze, judge, criticize and exercise citizenship, in addition to learning Organic Chemistry. Acting as the coordinator, I let the student be the center of the teaching-learning process. | 2,033 | 0,7649 |
| | I propose problem situations and activities that allow the student to solve a given problem. I act as a mediator and an investigator in the teaching-learning process and the student has an active role. | 2,067 | 0,944 |
| | I am able to pass on knowledge and keep a minimum orderliness. In order for the work to be possible, the student must do his part: paying attention to the classes, doing the activities and trying a little. | 1,767 | 1,0063 |
| | I combine expository classes with practical classes, using all the didactic resources that I have. I act as an administrator of the activities and the student should do the proposed activities. | 2,100 | 0,9229 |

It is inferred that the teachers approach the topics of Organic Chemistry linked to the social context of the students, which configures a conception closer to the spontaneous. In addition, the teaching methodology of Organic Chemistry adopted by most of them seems to be predominantly made up of lectures and practical classes, so that the student learns by directed discovery, carrying out the proposed activities, since the technological model predominates.

¹ PEME-ARANEGA, C.; DE LONGHI, A. L.; BAQUERO, M. E.; MELLADO, V.; RUIZ, C. Creencias explícitas e implícitas, sobre la ciencia y su enseñanza y aprendizaje, de una profesora de química de secundaria. *Enseñanza de las Ciencias*, v. extra, 2005.

² SANTOS JR. J. B.; MARCONDES, M. E. R. Identificando os modelos didáticos de um grupo de professores de Química. *Ensaio*, v. 12, n. 03, 2010.

³ GARCÍA PÉREZ, F. F. Los modelos didáticos como instrumento de análisis y de intervención en la realidad educativa. *Revista Electrónica de la Universidad de Barcelona*, n. 207, 2000.

Interaction studies of recreational drugs with ctDNA by spectroscopic techniques simulating *in vitro* conditions

Camila da S. Nunes (PG)^{1,*}, Wellington A. Barros (PG)², Karine R. Borges (IC)¹, Carla de A. Vital (IC)¹, Marina M. Silva (PG)¹, Marcelo P. Queiroz (IC)², Ângelo de Fátima (PQ)², Josué C. C. Santos (PQ)¹, Isis M. Figueiredo (PQ)¹

*e-mail: nunescamila0@gmail.com

¹Instituto de Química e Biotecnologia, UFAL, Maceió, AL, Brasil; ²Departamento de Química, UFMG, Belo Horizonte, MG, Brasil

Key words: DNA, illicit drugs, 25H-NBOH, 25H-NBOMe, spectroscopic techniques.

Highlights

Fluorescence and UV-vis studies revealed that the recreational drugs 25H-NBOMe and 25H-NBOH bind to ctDNA through major groove interaction by hydrogen binding and van der Waals forces.

Resumo/Abstract

Existem diversas drogas ilícitas que ainda não possuem dados de segurança pré-clínicos publicados no que se refere a sua toxicidade. Um exemplo são os derivados de NBOMe, que possuem uma variedade de estruturas, são alucinógenos sintéticos, derivados da fenetilamina e muito utilizados como substitutos ao LSD. Os compostos 25H-NBOMe e 25H-NBOH são exemplos dessas drogas recreativas. Dentro desse contexto, este trabalho teve como objetivo avaliar *in vitro* a interação entre o ctDNA e 25H-NBOMe e 25H-NBOH, empregando técnicas espectroscópicas simulando condições fisiológicas. Nos estudos empregando fluorescência molecular foi observado que os compostos analisados apresentaram emissão em 327 nm quando excitados em 260 nm. Dessa forma, devido a variação na fluorescência intrínseca de cada composto, foi possível calcular a constante de Stern-Volmer (K_{SV}) e a constante de ligação (K_b). As constantes foram calculadas na faixa de 23 a 37°C, apresentando K_{SV} na ordem de $10^3 M^{-1}$ e K_b na ordem de $10^4 M^{-1}$, as quais, diminuíram em função do aumento da temperatura. O mecanismo preferencial de extinção da fluorescência dos compostos pelo ctDNA foi classificado como *quenching* estático, uma vez que o $K_q > 2,0 \times 10^{10} M^{-1} s^{-1}$. Por meio de estudos de competição com sete sondas com modo de marcação estabelecido, foi possível inferir que esses compostos interagem com o ctDNA via *groove* maior. Os estudos termodinâmicos indicaram que a interação com o ctDNA é espontânea e que os principais tipos de interações que ocorrem são ligações de hidrogênio e força de van der Waals ($\Delta H < 0$ e $\Delta S < 0$). Por fim, utilizando estudos de RMN ¹H foi estabelecido o epítipo das moléculas na presença do ctDNA. No caso do 25H-NBOH a região contendo o fenol foi a que mais sofreu deslocamento na presença da macromolécula, o que é um indicativo que essa é a porção da molécula que mais interage com o ctDNA. Assim, este estudo apresenta evidências da interação entre drogas recreativas como 25H-NBOMe e 25H-NBOH com o DNA, o que pode levar a possíveis efeitos genotóxicos.

Acknowledgments: CAPES (Financial code 001), CNPq, FAPEAL, FAPEMIG.

Effect of different solvents in extraction step for determination of free glycerol content in biodiesel.

Caroline R.C. Ferreira (PG),^{1*} Andressa S. Antunes (IC),¹ Cristina M. Barra (PQ),¹ José G. Rocha Jr. (PQ).¹

carol.cabralferreira@gmail.com

¹Departamento de Química Analítica, UFRRJ.

Keywords: acetylacetone, sodium periodate, spectrophotometry, soybean, sunflower.

Highlights

Comparison of different solvents in the extraction method for determination of free glycerol by spectrophotometric method in ethanolic samples of sunflower and soybean.

Abstract

The production of ethylic biodiesel promotes a greater drag of glycerol, which can cause difficulties in its storage and damage to diesel engines.¹ Thus, it is of interest to know the free glycerol content in biodiesel. This work compares methods of glycerol extraction in ethylic biodiesel samples (soybean and sunflower) to determination of free glycerol by spectrophotometry UV-Vis. The extraction of glycerol was carried out with three solvent mixtures, the first two reported in the literature: (A) n-heptane / ethanol / water¹, (B) n-hexane / ethanol / water² and (C) ethanol / water. The analytical curve was constructed with standard solutions of glycerol (in ethanol) at concentrations of 10 to 50 mg L⁻¹. Quantification was performed after derivatization of this analyte with sodium periodate and acetylacetone, leading to the formation of 3,5-diacetyl-1,4-dihydrolutidine. Spectrophotometric measurements of this compound were then carried out at 410 nm. All analyzes were performed in 5 replicates. A higher content of glycerol was observed in the extractions performed with the mixture containing n-heptane (A) and the mixture with n-hexane (B) (Table 1). The use of the ethanol / water mixture (C) is apparently less efficient for the extraction of glycerol. After analysis and statistical evaluation, with $\alpha = 0.05$, it was observed that there was no significant difference between the glycerol contents between the solvents A and B and the solvents B and C in soybean oil (Table 2). For sunflower biodiesel, there was a significant difference in glycerol content among the three extraction methods. These results suggest that solvents reported in the literature may influence the free glycerol content determined, depending on the raw material used in the biodiesel synthesis.

Table 1: Free glycerol, in% m / m, obtained by each extraction method.

| Biodiesel | Extraction | Free Glycerol |
|-----------|------------|---------------|
| Soja | A | 0.101 ± 0.010 |
| | B | 0.087 ± 0.010 |
| | C | 0.080 ± 0.004 |
| Girassol | A | 0.137 ± 0.009 |
| | B | 0.112 ± 0.009 |
| | C | 0.099 ± 0.006 |

Table 2: t_{calc} (t calculated) for each mean comparison between the extraction methods.

| Biodiesel | Comparison | t_{calc} |
|--|------------|------------|
| $t_{critico}=2.31, g.l.= 8, \alpha = 0.05$ | | |
| Soja | A/B | 2.24 |
| | B/C | 1.37 |
| | A/C | 4.27 |
| Girassol | A/B | 4.32 |
| | B/C | 2.68 |
| | A/C | 7.89 |

References:

¹Váldez, H. C., et al. *Quim. Nova*, V. 35, n. 3, p. 601-607, 2012;

²Bondioli, P.; Bella, L. D. *Eur. J. Lipid Sci. Technol.* V.107, p. 153-157, 2005.

Acknowledgments

DQA-IQ-UFRRJ by enabling this research.

Área: ANA

Nº de Inscrição: _____

Determinação de iodeto como impureza gerada na síntese de líquidos iônicos de aminoácidos por CZE-UV via injeção múltipla

Maria Patrícia do Nascimento (PG),¹ Mathias Prado Pereira (PG),¹ Fernanda Irene Bombonato (PQ),¹ Rafael Marques (PG),¹ Marcone Augusto Leal de Oliveira (PQ),^{1*}

marcone.oliveira@ufjf.edu.br

¹Departamento de Química, Instituto de Ciências Exatas, Universidade Federal de Juiz de Fora

Palavras Chave: MICZE, Líquido iônico, Iodeto, Quimiometria, Alta frequência analítica, Química Verde

Highlights

Determination of iodide as impurity generated in the synthesis of amino acid ionic liquids by MICZE. Determination of iodide as impurity of ionic liquids synthesis. Optimization of the MICZE method through Chemometrics. High throughput, Decrease in total analysis time. Green Chemistry requirements.

Resumo/Abstract

Uma das limitações ao se trabalhar com líquidos iônicos (LI) é a sua obtenção em alta e conhecida pureza, sendo que elas vêm principalmente da sua síntese. Assim, métodos capazes de realizar a quantificação dessas impurezas em baixas concentrações tornam-se necessários^{1,2}. Nesse sentido, o presente trabalho apresenta o desenvolvimento e otimização de um método por eletroforese capilar de zona por injeção múltipla (MICZE, do inglês *multiple-injection capillary zone electrophoresis*) com detecção direta no UV para a quantificação de iodeto como impureza da síntese de LI derivados de aminoácidos, contendo sais de amônio quaternários originados do glicerol, como cátions. Para a consecução do método por MICZE, o tempo de injeção do eletrólito espaçador, a voltagem aplicada e o número máximo de injeções foram otimizados, de forma a garantir a melhor resolução entre os picos, no menor tempo possível. Para isso, utilizou-se um fatorial 2^3 , avaliado de forma qualitativa, no qual a condição mais promissora foi utilizada como base para um segundo planejamento, que consistiu em um fatorial 3^2 , em que a estatística de resolução cromatográfica (CRS) foi considerada como resposta para encontrar a melhor condição de análise. A condição otimizada consistiu em 5 injeções consecutivas de amostra, em corrida única, com duração inferior à 3 min. Esse método foi validado e aplicado para a quantificação de iodeto em 4 amostras independentes de LI, sendo encontrado entre 1,9 e 4,4 % (m/m) do analito nas amostras, em 37,9 min. Comparando ao método de injeção tradicional em triplicatas autênticas, esse necessitou de 1,6 h para sua realização. Logo, o método por MICZE aumenta significativamente a frequência analítica quando comparado ao método com modo de injeção tradicional. Além disso, não há necessidade de adição de inversor de fluxo eletrosmótico ao

eletrólito, indo ao encontro dos requisitos da Química Verde. A Figura 1 apresenta o eletroferograma de umas das amostras de LI, usando o método MICZE.

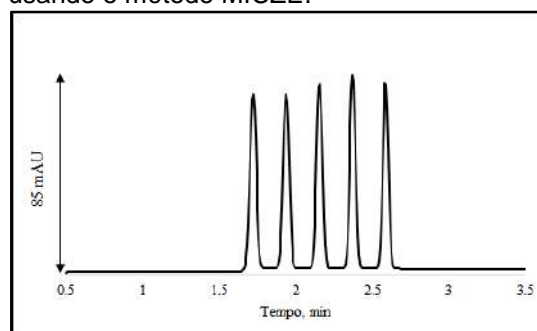


Figura 1: Amostra de LI. Condições experimentais: Eletrólito (40 mmol L^{-1} TRIS/ 20 mmol L^{-1} HCl, pH 8,20), capilar de sílica fundida com 35 cm (26,5 cm de comprimento efetivo e $75 \mu\text{m}$ de diâmetro interno), 25°C , - 20 kV, injeção 25 mbar por 5 s e eletrólito espaçador (25 mbar por 16 s).

Conclui-se que o método desenvolvido e otimizado foi eficiente para a quantificação do iodeto em amostras de LI com alta frequência analítica e que o planejamento de experimentos se evidencia como uma ferramenta auxiliar atraente para a etapa de otimização de métodos por MICZE.

¹ANDANSON, *et. al.*, J. Chem. Thermodyn, 2016, 94, 169; ²HOOGERSTRAETE, *et. al.*, Anal. Chem., 2014, 86, 3931.

Agradecimentos/Acknowledgments

UFJF, CAPES, CNPq, FAPEMIG, INCTBio, Grupo de Estudos em Síntese Orgânica e Catálise (UFJF).

Descriptive analysis of the mineral Waters commercialized in downtown of Belém, Pará-Brazil

Ramon K. Ferreira (TC),¹ Camila L. Carvalho (TM)*,¹ Raiane C. de Sá(TM),¹ Rosevane L. Monteiro (PQ)¹ Johny da S. Oliveira (PQ)¹.

ramon.ferreira@ifpa.edu.br; milacarvalho2006@hotmail.com

¹Departamento de Química, IFPA campus Belém.

Keywords: Mineral water, Quality, Descriptive analysis, Boxplot.

Highlights

Descriptive analysis of the mineral waters commercialized in downtown of Belém, Pará-Brazil

- Physical-chemical characterization of mineral waters.
- Parameters analyzed: hardness, pH, iron, conductivity and alkalinity.
- Use boxplot for statistical treatment of data.

Resumo/Abstract

This work has as objective to characterize mineral waters sold in Belém city, in the state of Pará, by using descriptive analysis of the main physico-chemical parameters. One hundred samples of mineral waters were analyzed from four different brands (A, B, C and D) sold in ten neighborhoods in the city, which were divided in five areas. For all samples the parameters analyzed were hardness, pH, iron, conductivity and alkalinity. Boxplot was used to perform the descriptive analysis of the results and the comparison related to data. Physico-chemical parameters of water samples were determined according to the methodologies suggested by Adolfo Lutz Institute (2008) when analyzing food, 5th version, chapter VIII – water. For these analyses, both instrumental and classical methods were employed. Mineral water sold in Belém city showed the conductivity, iron, hardness and alkalinity according to quality regulations. Considering pH, the brands B, C and D do not agree with the regulations. The physico-chemical characterization of water samples showed little differences in comparison to the information written on the package label, but still in accordance to acceptable limits. Figure 1 shows boxplots for the parameters analyzed.

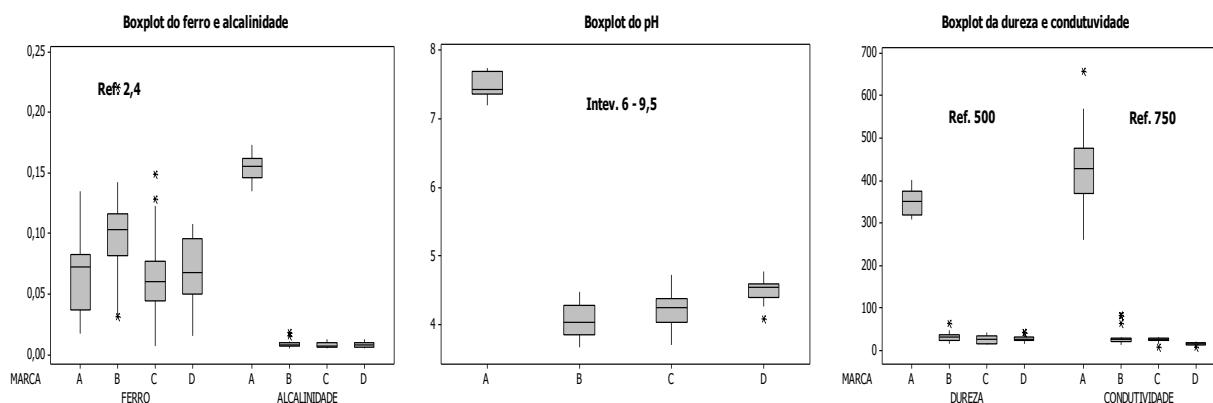


Figure 1: Boxplot for the parameters analyzed.

Referências

ZENEBO, O; PASCUET, N, S; TIGLEA, P. **Métodos Físico-Químicos para Análise de Alimentos**. 4. ed. São Paulo: Ses - Ccd -ial, 2008. 1000 p

Agradecimentos/Acknowledgments

Os autores agradecem ao IFPA e ao CNPQ pelo apoio financeiro.

Área: EDUNº de Inscrição: 847

O ensino de química por investigação nos planos elaborados por professores de Química

Luciane H. Akahoshi (PQ),^{1*} Maria Eunice R. Marcondes (PQ),¹ Fabio L. de Souza (PQ),¹.

luhoshi@iq.usp.br

¹Instituto de Química da Universidade de São Paulo

Palavras Chave: *Formação continuada de professores, Ensino por investigação, Atividades investigativas.*

Highlights

Inquiry-based learning: chemistry lesson plans of school's teachers
We investigate how teachers design their own plans based on inquiry activities
The results showed they realized the teachers' role in this kind of approach but they were not able to propose problems to start the teaching-learning process

Resumo/Abstract

Um dos objetivos do ensino de Química é possibilitar ao aluno a construção de seu conhecimento, a fim de avaliar e propor soluções a situações relacionadas à Ciência de forma autônoma e crítica. Assim, o ensino por investigação pode favorecer esse desenvolvimento. Para isso, o professor necessita criar atividades que promovam a cooperação entre os alunos, elaborando propostas e questões que demandem ordens de pensamento mais altas, como resolver problemas e tomar decisões.

Neste estudo, investigou-se como professores de Química de ensino médio, participantes de um curso de formação continuada sobre o tema "Litosfera, fonte de materiais", elaboram planos de ensino procurando incorporar o ensino por investigação em suas aulas. Analisou-se 19 planos elaborados por 32 professores divididos em grupos de uma a três pessoas, utilizando um instrumento desenvolvido por Silva¹, que relaciona

| Elementos Pedagógicos | Planos de ensino | | | | | | | | | | |
|---------------------------|------------------|-----------|-----------|-----------------------|-----------|-----------|-----------|-----------|-----------|-----------|-----------|
| | 1 | 2 | 3 e 16 | 4, 7, 12, 15, 18 e 19 | 14 | 5, 6 e 9 | 8 | 10 | 11 | 13 | 17 |
| A | N1 | N2 | N2 | N1 | N2 | N2 | N2 | N2 | N3 | N2 | N2 |
| B | N1 | N2 | N1 | N1 | N1 | N1 | N1 | N2 | N2 | N2 | N2 |
| C | N2 | N2 | N1 | N1 | N1 | N1 | N1 | N1 | N1 | N1 | N1 |
| D | N2 | N2 | N2 | N1 | N1 | N2 | N2 | N2 | N3 | N1 | N2 |
| E | N2 | N2 | N2 | N1 | N1 | N1 | N2 | N2 | N2 | N1 | N2 |
| F | N2 | - | N2 | N1 | N1 | N1 | N1 | N1 | N2 | N1 | N3 |
| G | N2 | - | N2 | N1 | N1 | N1 | N1 | N1 | N2 | N1 | N2 |
| H | N2 | N2 | N2 | N1 | N1 | N2 | N1 | N2 | N3 | N1 | N3 |
| Tendência do plano | N2 | N2 | N2 | N1 | N1 | N1 | N1 | N2 | N2 | N1 | N2 |

N1 – Tradicional; N2 – Tradicional, poucas atividades com caráter investigativo;
N3 – Algumas atividades investigativas; N4 – Ensino investigativo

elementos pedagógicos (A – objetivos; B – conhecimento prévios dos alunos; C – problematização; D – recursos didáticos; E – características das atividades; F- sistematização das conclusões; G – papel do aluno; H – papel do professor) presentes nos planos e sua aproximação a tendências investigativas (quadro).

A análise mostrou que doze planos não tinham características investigativas por apresentarem a maioria dos elementos pedagógicos no nível 1, ou seja, com característica tradicional. Nenhum plano apresentou qualquer elemento de natureza investigativa (N4). Dois planos apresentaram elementos distribuídos entre os níveis 2 e 3 (planos 11 e 17), podendo ser caracterizados como mais investigativos. Os outros planos mostraram a maioria dos elementos pedagógicos no nível 2, ou seja, pouco investigativos. Além disso é possível perceber que, em termos dos elementos pedagógicos, os objetivos e o papel do professor são os que mais se aproximam de um ensino por investigação enquanto que a problematização e o papel do aluno se aproximam de um ensino tradicional. Esses resultados mostram a necessidade de se desenvolverem ações de formação continuada que procurem aprofundar reflexões sobre a prática docente, e que convidem o professor a rever e planejar suas atividades de ensino, visando a implementação de um processo de ensino-aprendizagem que promova a autonomia do aluno.

¹SILVA, D. P. (2011). Questões Propostas no planejamento de atividades experimentais de natureza investigativa no ensino de Química: reflexões de um grupo de professores. Dissertação de Mestrado, USP.

Área: MED N° de Inscrição: 00848

NuBBE Database, a diverse source of natural products for drug design

Fernanda I. Saldívar-González (PG),¹ Marília Valli (PQ),² Adriano D. Andricopulo (PQ),³ Vanderlan S. Bolzani (PQ),² José L. Medina-Franco (PQ).¹

mariliava@unesp.br

¹School of Chemistry, Department of Pharmacy, Universidad Nacional Autónoma de México, Avenida Universidad 3000, Mexico City 04510, Mexico; ²Nuclei of Bioassays, Biosynthesis and Ecophysiology of Natural Products (NuBBE), Department of Organic Chemistry, Institute of Chemistry, Sao Paulo State University - UNESP; ³Laboratory of Medicinal and Computational Chemistry (LQMC), Center for Innovation in Biodiversity and Drug Discovery (CIBFar), Institute of Physics of Sao Carlos, University of Sao Paulo - USP

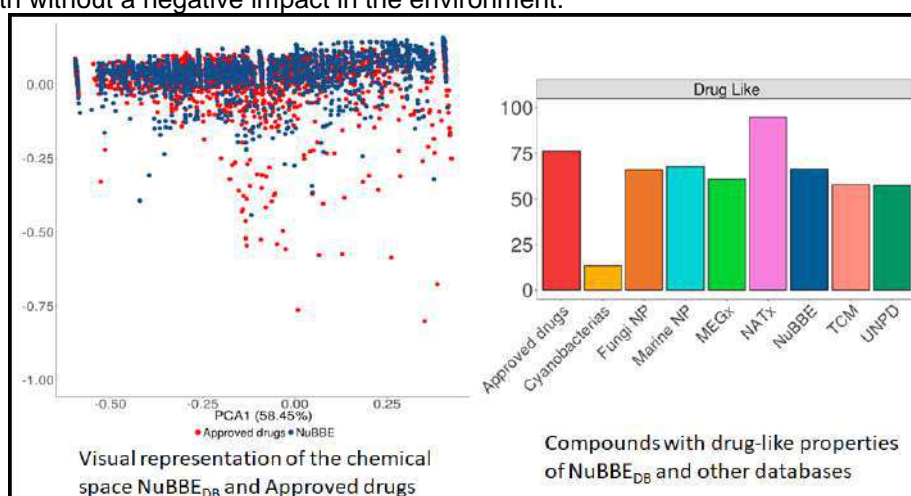
Palavras Chave: Natural Products, Molecular Diversity.

Highlights

NuBBE Database and a comprehensive chemoinformatic analysis study are herein covered, adding important tools and a promising source of natural products for drug discovery and medicinal chemistry.

Abstract

Data repositories have been important tools for drug discovery and achievements that have contributed to generate relevant scientific knowledge without spoiling the environment. Our research efforts have been engaged in developing NuBBE Database (NuBBE_{DB}, <http://nubbe.iq.unesp.br/portal/nubbedb.html>), the first database of natural products from Brazilian biodiversity (Valli et al., 2013; Pilon et al., 2017). A chemoinformatic analysis of NuBBE_{DB} was performed with physicochemical properties revealing that this database comprises a focused chemical space, within the space of traditional and drug-like physicochemical properties, and similar to approved drugs. NuBBE_{DB} is diverse in terms of structural fingerprints, distribution of chemical scaffolds and molecular properties, and the larger source of diversity of the compounds is driven by the side chains. We found a few scaffolds that are exclusive of NuBBE_{DB}, i.e. could not be found in other databases, and could be used as a starting point for the identification of new agents with therapeutic activity. This analysis shows that NuBBE_{DB} has a large percentage of drug-like compounds and support quantitatively that this is a promising source of molecules for drug discovery and medicinal chemistry (Saldívar-González et al., 2018). This innovative and unique database has a collaborative work with the Chemical Abstracts (CAS-ACS) aiming at a comprehensive database of natural products in Brazil. Promoting the successful use of Brazilian biodiversity, would be a demonstration that technological innovation is achievable, supporting economic growth without a negative impact in the environment.



References

Valli et al. *Journal of Natural Products*, 76, 439-444, 2013.

Pilon et al. *Scientific Reports*, 7, 7215, 2017.

Saldívar-González et al. *Journal of Chemical Information and Modeling*, 59, 74-85, 2019.

42ª Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química: Eixos Mobilizadores em Química

Área: HIS*(Inserir a sigla da seção científica para qual o resumo será submetido. Ex: ORG, BEA, CAT)***Nº de Inscrição: 00849***(Inserir o número de inscrição do autor que fez a submissão)*

O experimento de Luigi Terragno: um resgate químico na fotografia do Brasil

Karine Arend* (FM),¹ Ana Margarida Andrade Cardoso (TC),² Teresa Alexandra da Silva Ferreira (PQ),²

karinearend@ifc.edu.br

¹Instituto Federal Catarinense, IFC-Campus São Bento do Sul'

²Laboratório Hércules, Universidade de Évora, Évora/Portugal

Palavras Chave: Sulfomandiocato, Fotografia; Experimento, Síntese, Mandioca, Sulfato de Ferro (II).

Highlights

The experiment of Luigi Terragno: a chemical rescue in Brazilian photography. Synthesis and characterization of salt used in photographic processes using fermented manioc juice.

Resumo/Abstract

O início da fotografia no Brasil foi basicamente feito por fotógrafos imigrantes que trouxeram equipamentos e produtos químicos necessários para a produção fotográfica. Inicialmente, as fotografias foram realizadas usando um processo batizado como daguerreótipo. Com o passar dos anos, outros processos que tornavam as imagens mais duradouras e baratas foram desenvolvidos através de diversas pesquisas. Considerando a complexidade dos processos, os fotógrafos da época tinham que ter conhecimento na área da química, pois os processos fotográficos utilizavam diversos produtos químicos e eram realizados em diversas etapas, desde a preparação da chapa sensibilizadora até a revelação e fixação da imagem. Estes produtos eram importados e geralmente escassos, fazendo com que alguns se aventurassem em laboratório. Entre os fotógrafos imigrantes pioneiros, destaca-se Luigi Terragno, italiano, que se instalou em Porto Alegre em 1853. Terragno realizava experimentos químicos em seu laboratório e utilizou ácido extraído da mandioca (*Manihot sculenta Crantz*) para a síntese de um sal que batizou de SULFO-MANDIOCATO DE FERRO. Testou esse composto como revelador e, percebeu que este era mais eficiente do que o sulfato de ferro (II) comercial. Para a síntese usou uma mistura do suco fermentado da mandioca com ácido sulfúrico concentrado e ferro metálico¹. Este trabalho se fundamenta no fato de que na fotografia foram feitos experimentos químicos que podem ser resgatados e abordados em aula. O objetivo deste trabalho foi a síntese e caracterização deste sal. A síntese foi feita utilizando uma parte de ácido sulfúrico (9 mol L⁻¹) e duas partes de caldo fermentado. Nessa mistura adicionou-se 3 g de limalha de ferro, deixando reagir por 1 hora. Em seguida foi feita a filtração e cristalização. O mesmo experimento foi repetido utilizando água (sem o suco fermentado) e, neste caso, não houve a formação de cristais. Os cristais verde azulados produzidos foram caracterizados no Laboratório Hércules e indicaram que o sal produzido é a *Rozenite*, sulfato de ferro (II) tetra hidratado. Acredita-se que as condições do experimento utilizando o suco fermentado da mandioca pode ter inibido a oxidação do Fe metálico para Fe (III). Este experimento pode ser reproduzido facilmente, porém deve-se considerar que, em meados de 1861 a concentração do ácido sulfúrico não era tão alta como atualmente. O fato de Terragno relatar que o sal sintetizado tem propriedades melhores que o sulfato de ferro (II) comercial, pode estar relacionado com a pureza dos compostos químicos produzidos e comercializados naquela época. Outros estudos estão sendo realizados para resgatar os experimentos químicos realizados pelos pioneiros da fotografia no Brasil. Assim, frações da química são revelados nas atividades fotográficas realizadas e que estas podem ser utilizadas em abordagens de ensino.

¹DUARTE, Miguel Antônio de Oliveira Faça Chuva ou faça sol: fotógrafos de Porto Alegre – (1849-1909). Porto Alegre: Evangraf, 2016.

Área: MAT

Nº de Inscrição: 00851

Obtention of Losartan Controlled Delivery Device Based on Microcrystalline Cellulose (MCC) and Supported Ionic Liquid (SILP)

Marcelo G. Speziali (PQ), Stefânia S. O. Santos (IC)*

speziali@ufop.edu.br; stefania_oss@hotmail.com

¹Departamento de Química, UFOP

Palavras Chave: (Grafting, Microcrystalline Cellulose, Losartan, Kinetics, Korsmeyer – Peppas model)

Highlights

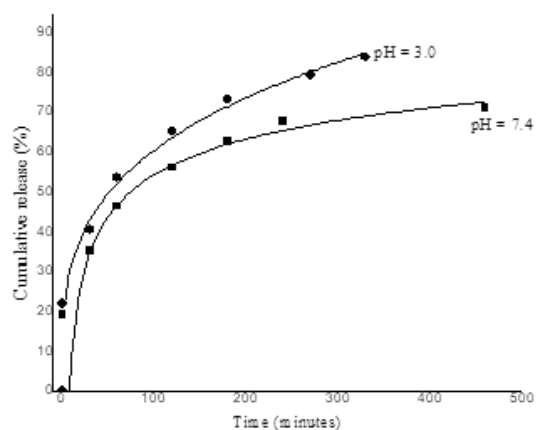
- Grafted cellulose was used to desorb Losartan
- Grafted cellulose with ionic liquid generates a pH-sensitive sorptive material
- Cationic cellulose was obtained with 81% w/w yield

Resumo/Abstract

In this work, a new modified cellulosic material is described. Microcrystalline Cellulose (MCC) was chemically bonded to a silane group from an ionic liquid ($[(MeO)_3Sipmim][Cl]$). MCC was efficiently converted into amorphous cationic cellulose with high anion loading capacity.

The new cellulosic material was obtained following a sequence of steps, namely: Ionic liquid - IL synthesis, IL grafting to MCC; metathesis of *Cl* to *losartanate*, characterization of material using FTIR, ¹³C MASNMR, Tg, elemental analysis, DRX and DLS (ζ potential).

The obtained material was used as an adsorptive material regarding Losartan and in sequence, this material was used in a controlled release experiment.



Results for Losartan release in PBS at pH 7.4 and SGF at pH 3.0 were depicted in Fig. 1. After 450 minutes, c.a. of 75% of Losartan was released. Otherwise at pH 3.0, after 300 minutes, c.a. 85% of losartan was released. A mathematical adjustment was done for both controlled release curves (c.f. Fig. 1). To SGF, an adjustment of $y = 16.41x^{0.28}$ with a $R^2 = 0.99$ was obtained; while for PBS, the equation that best fits with experimental points was $y = 63.69 \ln(0.51 \ln(x))$ with a $R^2 = 0.99$. A linearization from both curves gave an equation of $\log(\text{time})$ Vs $\log(\text{Cumulative release})$. Thus, for pH 7.4: $y = (-0.95 \pm 0.07) + (0.34 \pm 0.04)x$; with a $R^2 = 0.98$ and for pH 3.0: $y = (-0.89 \pm 0.07) + (0.34 \pm 0.04)x$; with a $R^2 = 0.98$ and by modelling both curves according to the Korsmeyer – Peppas model, it is possible to determine the value of n as: 0.338 ± 0.037 for release in PBS and 0.343 ± 0.037 for SGF.

Fig. 1. Compared release curves for ($Cellu[(MeO)_3Sipmim][Losartan]$) in PBS and SGF

A functionalized cellulose has been obtained from MCC and a silanized ionic liquid. By bonding MCC and $[(MeO)_3Sipmim][Cl]$ with a pH-dependent Si–O covalent bond, it was possible to prepare an efficient sorptive material, which was used for an adsorption batch process and controlled desorption with Losartan as a model pharmaceutical using biological mimicked environment (blood = pH 7.4 and stomach = pH 3.0).

Agradecimentos/Acknowledgments

Specials Acknowledgments to UFRGS IQ - Central Analítica for MASNMR, to LEMB-UFMG for lab structure, FAPEMIG for IC scholarship and PROPP-UFOP for research funding.

Synthesis and Characterization of Polymeric Carbon Nitrides (PCNs) Doped with Sulfur

Ingrid F. Silva (PG),¹ Ivo F. Teixeira (PQ),² Ana Paula de C. Teixeira (PQ),¹ Humberto O. Stumpf (PQ).^{1*}

ingridfernandesilva@hotmail.com; stumpf@ufmg.br

¹Departamento de Química, ICEX, UFMG; ²Departamento de Química Fundamental, Instituto de São Paulo, Universidade de São Paulo.

Keywords: Polymeric carbon nitrides, Melamine, Thiourea, Semiconductors.

Highlights

- Active semiconductors in the UV-vis region.
- Synthesis of five new PCNs with sulfur heteroatoms in their structures.
- Modification of crystallinity and electronic properties.

Resumo/Abstract

PCNs are semiconductor materials, which have moderate bandgap values, around 2.7 eV.¹ Unlike the most common semiconductors, PCNs are active photocatalysts in the UV-vis region for a series of reactions. Its electronic band position is optimum to perform the photolysis of water, which is one of its main applications.^{1,2} Aiming at the semiconductor properties of PCNs, five types of PCNs were synthesized with different amounts of sulfur heteroatoms produced from different molar proportions melamine and thiourea. The addition of other elements, besides the C and N present in their structures, is widely used for the bandgap manipulation of these materials, which makes it possible to modulate the electronic properties for directed photocatalytic applications.^{1,2} The synthesized PCNs were completely characterized by elemental analysis (CHN), TEM and XRD. It was possible to observe that, among the synthesized materials, that obtained from thiourea (CN-T) is the one with the greatest number of defects in its structure and the material synthesized from the melamine (CN-M) is the one with the higher crystallinity.

Tabela 1. Contents of C, H and N, obtained by elemental analysis and bandgap values for the synthesized PCNs

| Materials | C (%) | H (%) | N (%) | C/N (molar) | E / eV |
|--|-------|-------|-------|-------------|--------|
| Valor Teórico (g-C ₃ N ₄) | 39,00 | 0,00 | 61,00 | 0,75 | - |
| CN-1M:1T | 33,16 | 2,22 | 57,10 | 0,68 | 2,73 |
| CN-2M:1T | 33,61 | 2,02 | 58,04 | 0,68 | 2,68 |
| CN-1M:2T | 33,13 | 2,26 | 58,66 | 0,66 | 2,78 |
| CN-M | 33,95 | 1,92 | 59,00 | 0,67 | 2,75 |
| CN-T | 32,92 | 2,13 | 57,44 | 0,67 | 2,80 |

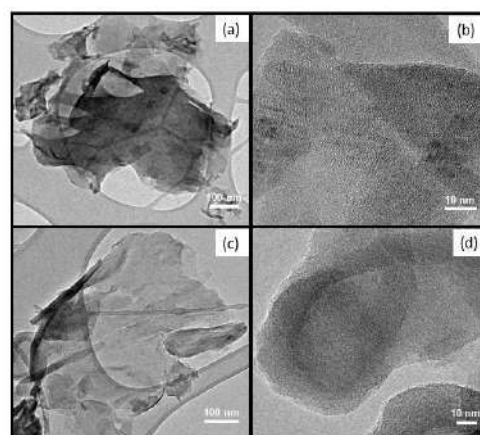


Figure 1. TEM images for the synthesized materials. a) and b) CN-M; c) and d) CN-T.

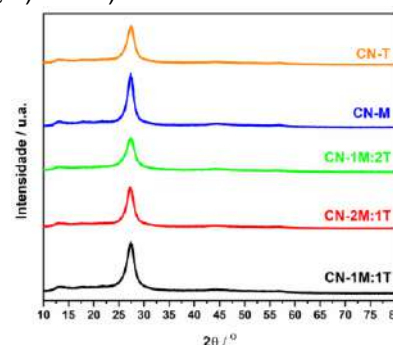


Figure 2. XRD of synthesized PCNs.

¹ Cao, S., *et al. Adv. Mater.* **27**, 2150–2176 (2015); ² Fu, J., *et al. Adv. Energy Mater.* **8**, 1–31 (2018).

Agradecimentos/Acknowledgments

FAPEMIG, CNPq and CAPES are acknowledged for financial support and the Microscopy Center of UFMG for the microscopy images.

Área: Ana

Nº de Inscrição:00853

Study of reaction conditions for the spectrophotometric determination of Total Organic Carbon (TOC) using KMnO_4 as oxidant

Érica B. de Sousa (PG),¹Otávio R. Lã (PQ),¹Cristina M. Barra (PQ),¹ José G. Rocha Jr.(PQ)¹

ericabsousa90@gmail.com

¹Departamento de Química Analítica, UFRRJ

Keywords: Permanganometric Method, PotassiumDichromate, Organic carbon

Highlights

Due to the environmental liability generated by $\text{K}_2\text{Cr}_2\text{O}_7$, the present work aims to evaluate the use of KMnO_4 in replacement of $\text{K}_2\text{Cr}_2\text{O}_7$ for the determination of TOC using a spectrophotometric method.

Abstract

The official method for determining total organic carbon (TOC) is performed using the $\text{K}_2\text{Cr}_2\text{O}_7$ oxidant in strongly acidic media¹. Previous studies have shown the infeasibility of KMnO_4 to replace $\text{K}_2\text{Cr}_2\text{O}_7$ in the evaluation of TOC in environmental samples because the KMnO_4 does not oxidize organic matter completely². Recent study performed by Azevedo *et al.* (2016)³ showed that KMnO_4 may be appropriate for the determination of TOC under certain reaction conditions. They used titrimetric method that still has some drawbacks like: difficulty in visualizing the turning point; the number of steps during titration, which may lead to an increase in error; large reagent consumption, and the time required to titrate. In this work it is proposed the use of aUV-Visible spectrophotometric method employing KMnO_4 instead of $\text{K}_2\text{Cr}_2\text{O}_7$ for the determination of the TOC. The main challenge in TOC determination is the optimization of the reaction conditions (temperature and time) of the oxidation of organic carbon by MnO_4^- . The primary potassium biphthalate (KHP) standard was used as a source of organic matter.¹ Different times (30 and 60 minutes) and temperatures (65 and 95 °C) were evaluated. Solutions of KMnO_4 , 0.2 mol L⁻¹, H_2SO_4 0.250 mol L⁻¹ and 30 mg (\pm 0.1 mg) KHP were used in all experiments. Five replicates were performed in each reaction condition (time / temperature). All samples were diluted to 100.00 mL. The remaining MnO_4^- was analyzed in a spectrophotometer ($\lambda = 525$ nm). Recovery of KHP (Table 1) was determined by the KMnO_4 response curve between 0.0-500.0 $\mu\text{mol L}^{-1}$. The temperature of 95 °C and the time of 30 minutes was adequate for the recovery of KHP, indicating that the proposed method is appropriate for TOC determination. In addition, permanganate is more environmentally friendly than dichromate and has also, to date, used sulfuric acid in low concentrations.

Table 1. Influence of time and temperature on the recovery percentage of potassium biphthalate

| Time (min) | Temperature(°C) | Recovery (%) |
|------------|-----------------|--------------|
| 30 | 65 | 61 \pm 7 |
| 60 | 65 | 77 \pm 2 |
| 30 | 95 | 99 \pm 2 |
| 60 | 95 | 106 \pm 8 |

References:

¹YEOMANS, J.C.; BREMNER, J.M. A rapid and precise method for routine determination of organic carbon in soil. *Comm. Soil Sci. Plant Anal.*, v. 19, p.1467-1476, 1988.

²DIAS, J.C.; LIMA, W.N., Comparação de métodos para a determinação de matéria orgânica em amostras ambientais. *Revista Científica da UFPA*, 4, 2004.

³AZEVEDO, C.C.; ROCHA Jr, J.G.; PEREIRA, M.G; BARRA, C.M.; LÃ, O.R. Avaliação da substituição do $\text{K}_2\text{Cr}_2\text{O}_7$ por KMnO_4 na determinação de carbono orgânico total em solos, *Anais da IV SePIT-UFRRJ*, 2016.

Acknowledgments

DQA-IQ-UFRRJ by enabling this research. This study was financed in part by the Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior – CAPES/Finance Code 001, Brasil.

Área: EDU

Nº de Inscrição: 00855

PRODUCTION OF DIDACTIC CHEMISTRY AUDIOBOOK FOR VISUAL DISABLED STUDENTS

Silber L. dos S. Bentes (FM)^{1*}, ¹ Milton N. M. Pereira (FM), ¹ Jorge O. M. Junior (IC), ¹ Ísis F. F. de S. Alves (IC), ¹ Thays A. F. Lopes (IC), ¹ Eduardo S. Nascimento (IC).

silber.bentes@ifpa.edu.br

¹ Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia do Pará, IFPA, Coordenação de Química, IFPA – Campus Belém.

Palavras Chave: *livro didático, inclusão social, química, audiobook.*

Highlights

Learning chemistry is a challenge. More stimulating still is the learning of people with visual deficiency. The students recorded the textbook. This material was used to aid a blind student.

Resumo/Abstract

Um dos grandes desafios para a Educação é a inclusão de alunos portadores de deficiência visual, especialmente em Química, que requer observações dos fenômenos, operações matemáticas, entre outros requisitos próprios. No decorrer dos anos, grandes avanços foram alcançados, entretanto, ainda muito há de ser feito. Para Gonçalves (2013) é papel dos professores buscarem soluções para que os deficientes visuais aprendam os conhecimentos de caráter procedimental. No que tange ao livro didático, os que são disponibilizados na rede de ensino não apresentam recursos adaptados para alunos com deficiência visual, podendo ser em Braille, livro ampliado ou audiolivro. Acredita-se que a cooperação dos alunos é imprescindível, mesmo tendo recursos de programas que convertem textos em áudio, de acordo com Fernandes (2017), a convivência fortalece a aprendizagem, tanto do conhecimento escolar, como da questão sociocultural. No presente trabalho os alunos gravaram a leitura do livro didático em arquivos de áudio, para ser utilizado para estudos em diferentes ambientes, em especial por aluna deficiente visual. A partir dos arquivos produzidos, espera-se que eles possam aprimorar seus conhecimentos, além de suscitar espírito de cooperação com colegas que não podem ler. Com a utilização do arquivo de áudio, alunos com deficiência visual têm um recurso a mais para estudar, obtendo-se assim, um melhor aproveitamento nas aulas. Acredita-se também que esse recurso será de bom proveito para as famílias dos alunos, pois, a partir da disponibilidade dos parentes, os alunos ficam dependentes do tempo deles para ouvir a leitura do livro. Dessa forma, apenas dar um *play* em um aparelho de áudio, no tempo que o aluno preferir, pode estudar ao som das vozes dos colegas.

FERNANDES, Tatyane C.; HUSSEIN, Fabiana R. G. S.; DOMINGUES, Roberta C. P. R. **Ensino de química para deficientes visuais: a importância da experimentação num enfoque multissensorial.** Revista Química Nova na Escola. Vol. 39, N° 2, p. 195-203, maio, 2017.

GONÇALVES, Fábio P.; *et al.* **A Educação Inclusiva na Formação de Professores e no Ensino de Química: A Deficiência Visual em Debate.** São Paulo-SP, Revista Química Nova na Escola, Vol. 35, N° 4, p. 264-271, NOVEMBRO, 2013

Agradecimentos/Acknowledgments

Ao IFPA pela estrutura fornecida.

Área: MAT

Nº de Inscrição: 00856

Study of nanocomposites phenolic resin - carbon nanotubes and their tendency for carbon graphitization

Carmen G. Renda (PG)^{1*}, Roberto Bertholdo (PQ)¹

carmengreice@gmail.com; roberto.bertholdo@unifal-mg.edu.br

¹Instituto de Ciência e Tecnologia, UNIFAL-MG;

Palavras Chave: Phenolic resin, Carbon nanotubes, Nanocomposites, Graphitization.

Highlights

The thermal degradation and degree of graphitization of the nanocomposites of phenolic resin and carbon nanotubes (PR-CNT) were studied by TGA, XRD, Raman spectroscopy and SEM / FEG and TEM.

The best thermal stability and also the best degree of graphitization were achieved for the sample containing 2.5% w/w of carbon nanotubes (PR-NTC_2.5%).

The results showed that the material presents a tendency to carbon graphitization and appears as potential for different applications in the technological area involving graphitized carbon

Resumo/Abstract

Nanocomposites formed by phenolic resins (PR) and carbon nanotubes (NTC) in different proportions were obtained with the objective of studying the thermal degradation of nanocomposites and also the degree of graphitization of these materials after the heat treatment. In the first stage of preparation of PR, the reaction between phenol and formaldehyde, in acid medium with excess of formaldehyde, promotes the appearance of two phases [1]. The phase containing the prepolymer was isolated and different amounts of NTC (0.3, 0.7, 1.3 and 2.5% w/w) estimated relative to the mass of phenol used were added. The samples were heated in a 70 °C bath under mechanical stirring for complete formation of PR-NTC nanocomposites. The PR-NTC samples were characterized by FTIR and TGA analysis. The TGA results showed that the nanocomposite PR-NTC_2.5% was the one that obtained the least mass loss. Samples of the PR-NTC nanocomposites were thermally treated at 1000 °C under Nitrogen atmosphere for residual carbon analysis. The XRD ($d_{002}=3.378\text{\AA}$) and Raman ($I_D/I_G=1.9$) analyzes of the carbon indicated that the PR-NTC_2.5% sample had a higher degree of ordering both in relation to pure PR and other samples. SEM / FEG images (Fig 1A and B) show different morphologies of PR-NTC2.5% before (Fig. 1A) and later (Fig. 1B) of the heat treatment, indicating a higher surface roughness in the sample after treatment. In TEM images (Fig. 1C) it is possible to observe an organized region similar to onion-like carbon. Striped regions (Fig. 1D) may represent the formation of organized regions or their tendency to carbon graphitization. The results showed that the obtained material can present a good potential for different applications in the technological area that involves graphitized carbon.

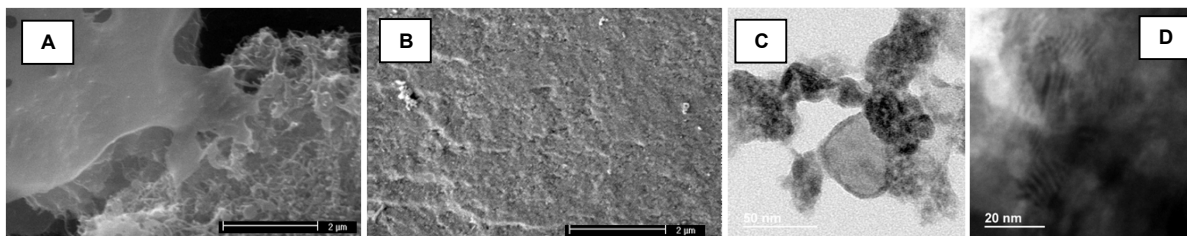


Figure 1: (A) and (B) show SEM / FEG images of the PR-CNT_2.5% sample before and after the heat treatment, respectively; (C) and (D) show TEM images for PR-CNT_2.5% after heat treatment.

[1] C.G. RENDA and R. Bertholdo. Journal of Polymer Research 25:241 (2018).

Agradecimentos/Acknowledgments

The authors would like to thank PIBPOS (UNIFAL-MG)/CAPES by the support.

Área: INO

Nº de Inscrição:00857

Hybrid material for controlled of drugs release

Hugo H. Carline de Lima (PG)¹, Fernanda R. Veregue (PG)¹, Vicente L. Kupfer (PG)¹, Jaqueline de Carvalho Rinaldi (PQ)³, Marcos R. Guilherme (PQ)², Andrelson W. Rinaldi (PQ)¹.

hugolima22@hotmail.com; awrinaldi@uem.br

¹ Materials Chemistry and Sensors Laboratory – LMSen/DQI – State University of Maringa, Maringa-PR, 87020-900.

² UNICESUMAR – Centro Universitário de Maringa, Maringa-PR, 87050-900.

³ UNIFATECIE – Faculty of Science and Technology in the North of Parana, Paranavaí-PR, 87.709-000.

Keywords: Hydrogel, Inorganic materials, Hydrogel composite, Mechanical properties, Cell culture, Nanomaterial.

Highlights

Importance of the drugs release;
The perfect combination, hydrogel and inorganic materials.

Resumo/Abstract

Our aim is to improve the mechanical properties of hydrogels derived from natural polymers and optimize the time of controlled release of drugs. Previous studies evaluated the effect of the insertion of inorganic materials into hydrogel matrices forming hybrid hydrogels. Hybrid, organic-inorganic present mechanical, thermal and biological properties superior to the pure hydrogels, with potential for use in controlled drug release systems in biomedical applications. The nanoparticles reduce the burst release effect by prolonging the release of the drug. In this sense, the use of the DRX showed the characteristic diffraction signals of the inorganic materials. The SEM evaluated the morphology of the materials and revealed the formation of a highly interconnected and porous structure. The porosity allowed the movement of drugs into and out of materials when swollen, denoting their potential for release devices. The inorganic materials did not release out of the hydrogel indicating the presence of interactions between the materials. The hydrogels containing the inorganic materials, presented mechanical properties superior to the pure materials. While the hydrogels without the presence of inorganic materials presented a $t_{90\%}$ of 3000 min, the hydrogels containing the inorganic materials had a release time $t_{90\%}$ of 8000 min, and this materials presented mechanical properties and modulus of elasticity superior to those of the pure hydrogels. Reduction of the burst release in the inorganic materials containing material was also observed. The interaction between inorganic materials and the hydrogel provided improvements in gel properties and regulated the release mechanism.

Agradecimentos/Acknowledgments

The authors thank all involved in the work, the research laboratory LMSen, Rinaldi Research Group, COMCAP/UEM and Brazilian Agencies for fellowship CNPQ, Fundação Araucária and CAPES. (Proc. grants. 577527/2008-8, 310820/2011-1, 113881/2018-5, 101157/2016-9, 830/2013).

Evidence for an Excited State Intramolecular Proton Transfer (ESIPT) in the Photoisomerization of Bis-Azophenol

Gianluca C. Azzellini (PQ),^{1*} Adrian Kreuz (PG),¹

gcazzell@iq.usp.br; akreuz@usp.br

¹ Instituto de Química, Universidade de São Paulo.

Palavras Chave: Bis-azophenol, Photoswitch, Hydrogen bond, Tautomerization, ESIPT, Fluorescence.

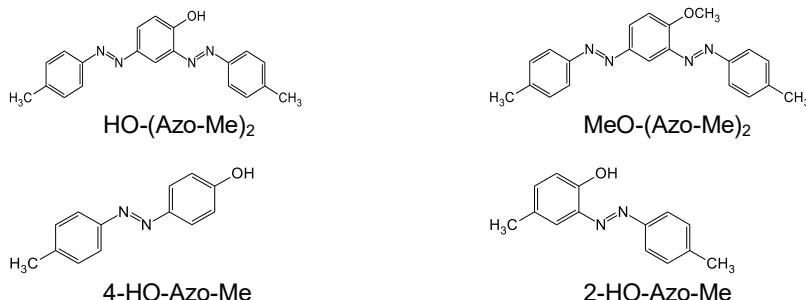
Highlights

E-Z photoisomerization in a bis-azophenol is suppressed due to hydrogen bond. Room-temperature fluorescence is observed, which supports an ESIPT. Alkylation of the hydroxyl restores the photochromism.

Resumo/Abstract

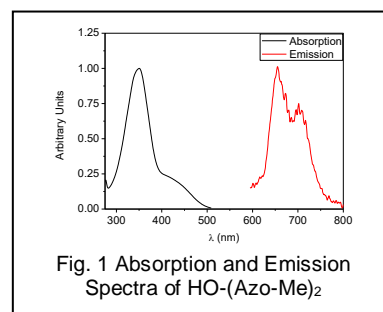
Azobenzenes are widely used as photoswitches, due to its convenient and reversible photochemical *E-Z* isomerization^{1,2}. However, there are no report about the photoisomerization of bis-azophenoles.

In this work, there was investigated the photoisomerization of a bis-azophenol, HO-(Azo-Me)₂, in comparison with *ortho*- (2-HO-Azo-Me) and *para*-azophenol (4-HO-Azo-Me) models, and an alkylated bis-azo derivative, MeO-(Azo-Me)₂.



Benzene solutions of each azoderivative were irradiated on the $\pi-\pi^*$ region (366 nm). The photochemical data are presented in Table I. The data in Table I show clearly that the HO-(Azo-Me)₂ has low photoisomerization quantum yield and low *Z* % in the PSS (Photostationary State) comparing with 4-HO-Azo-Me. This is due to an intramolecular hydrogen bond in the former, which originates an ESIPT process, giving rise to a tautomeric specie deactivating the photochromic property. The existence of an ESIPT process is evidenced by a (weak) fluorescence at room temperature with a large Stokes shift, of up to 200 nm.

| Tab. I Photochemical Properties | | |
|---------------------------------|--------------------------|----------------|
| Azoderivative | $\Phi_{E \rightarrow Z}$ | PSS (%) E:Z |
| 4-HO-Azo-Me | 0,18 | 52:48 |
| 2-HO-Azo-Me | — | — |
| HO-(Azo-Me) ₂ | 0,07 | 80:20 |
| MeO-(Azo-Me) ₂ | 0,14 | 25:75 |



In MeO-(Azo-Me)₂ the hydrogen bond is absent and photoisomerization occurs in both azo residues rising $\Phi_{E \rightarrow Z}$ and a rich *Z* (PSS) is achieved.

In conclusion the isomerization of HO-(Azo-Me)₂ is governed by an intramolecular hydrogen bond that associated with an ESIPT favor tautomeric forms that change the photochemical properties of the azo group.

¹ García-Amorós, J.; Velasco, D. *Beilstein J. Org. Chem.* **2012**, *8*, 1003.

Acknowledgement: CNPq and IQ-USP

42ª Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química: Eixos Mobilizadores em Química

Área: **INO**Nº de Inscrição: **00859**

Synthesis of DPPZ-BTDZ-Br as potential ligand for metallo-intercalator complex of ruthenium (II) derived from 1,10-phenanthroline

Mariana de O. T. Nogueira (PG),¹ Thamires da S. Luiz (IC),² Tanos C. C. França (PQ),¹ Fabio da S. Miranda (PQ),^{2*}.

tonellimariana@gmail.com; fsmiranda@id.uff.br

¹Departament of Chemical Engineering, Military Institute of Engineering – Rio de Janeiro/RJ - Brazil; ²Chemistry Institute, Federal Fluminense University – Niterói/RJ – Brazil.

Keywords: DPPZ, Benzothiadiazole, Bromation, DNA, Metallo-intercalator.

Highlights

Synthesis of a new planar ligand derivate from 1,10-phenanthroline as a promising DNA probe. C–Br as synthon for preparation of new polidentades ligands.

Abstract

Over the past decade, polypyridyl complexes of ruthenium (II) containing planar ligands derived from 1,10-phenanthroline have been extensively studied due to DNA interaction.^[1] These complexes present interesting photochemical, photo physical and electrochemical properties, attracting interest from both bioorganic and photochemical researchers.^[2] Moreover, they have been proposed as candidates to metallo-intercalators of DNA, prototypes of new drugs, biological probes and substances for photodynamic therapy.^[3] As intention of developing new DNA metallo-intercalator, we have synthesized the ligand DPPZ-BTDZ-Br from *o*-phenylenediamine with satisfactory yields (see synthetic route in Figure 1). The bromation results suggest that occurs preferentially in the phenanthroline moiety due to the interaction of the acid with the nitrogen, as well as the higher number of possible resonance forms in comparison with the benzothiazole portion. This ligand opens many perspectives towards the synthesis of new multidentate and multifunctional DNA intercalators, via C–C coupling and C–heteroatom coupling using C–Br bond as synthon reaction. Furthermore, many electrochemical, photochemical and photo physical phenomena can also be obtained from such ligands.

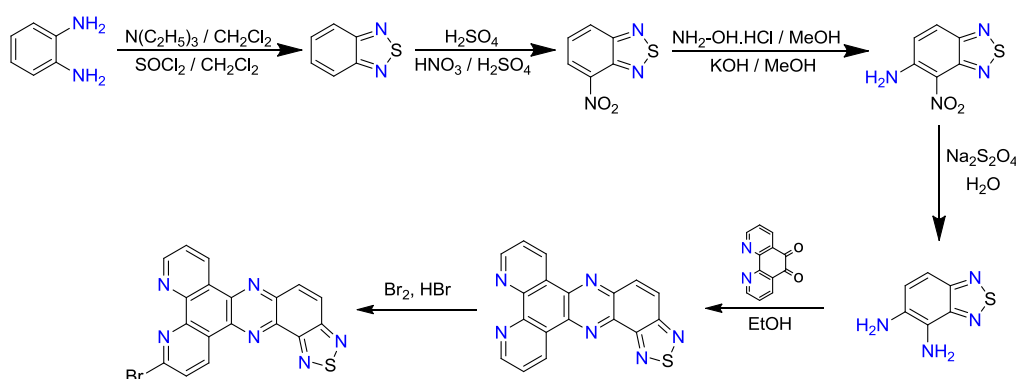


Figure 1. Synthetic route of the DPPZ-BTDZ-Br compound.

[1] Barolli, J. P., et al., *J. Braz. Chem. Soc.*, **2017**, 28, 1879-1889.

[2] Mital, M., Ziora, Z., *Coord. Chem. Rev.*, **2018**, 317, 434-458.

[3] Boynton, A. N., et al., *J. Am. Chem. Soc.*, **2016**, 138, 5020-5030.

Acknowledgments

To IQ-UFF multiusers laboratories (LAME and LaReMN), CAPES, CNPQ and FAPERJ. Grants: E-26/202.719/2018 and E-26/203.225/2015.

Área: MAT Nº de Inscrição: 49113

Hidrogéis baseados em quitosana enxertada com poli(ácido acrílico)/poli(acrilamida): cinética de intumescimento**Wesley, S. Araújo (IC)^{1*}, Francisco Helder A. Rodrigues (PQ)¹**
wesleysouza02@gmail.com; almeida_quimica@yahoo.com.br¹Coordenação de Química, Laboratório de Polímeros e Compósitos (LAPOLICOM), UVA

Palavras Chave: Hidrogéis, Quitosana modificada, Cinética de intumescimento.

Highlights

Hydrogels based on chitosan grafted poly(acrylic acid)/poly(acrylamide): swelling kinetics

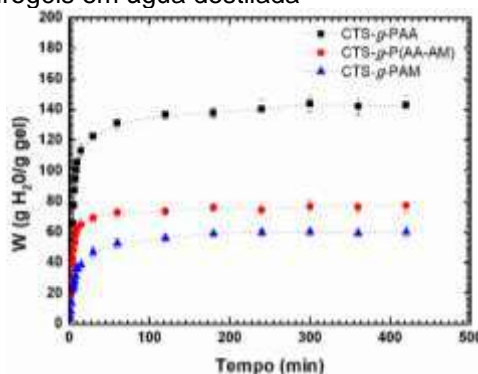
The process follow a second order kinetics with respect to the degree of swelling.

Swelling is strongly dependent on composition of the structural units in the hydrogels.

The hydrogen bonds introduce additional crosslinks to the hydrogel network decreasing its swelling capacity.

Resumo

Hidrogéis baseado em quitosana (CTS) enxertada com poli(ácido acrílico)/poli(acrilamida) foram sintetizados por copolimerização em solução via radical livre usando persulfato de potássio como agente iniciador e N, N'-metilenobisacrilamida como reticulante, e avaliados quanto à cinética de intumescimento em água destilada, com interesse no estudo destes sistemas como adsorventes alternativos de corantes ou íons metálicos. A Figura 1 mostra a cinética de intumescimento em água dos hidrogéis preparados com diferentes proporções de ácido acrílico (AA) e acrilamida (AM). Os perfis das curvas da cinética de intumescimento são bastantes semelhantes¹. Verificou-se que o grau de intumescimento teve um rápido aumento durante os primeiros 30 min imersão representando cerca de 90% do valor de equilíbrio neste intervalo de tempo. Em seguida, o grau de intumescimento aumentou lentamente até alcançar o equilíbrio (W_{eq}), que ocorre por volta de 60 min, cujo valor depende da composição do hidrogel. O processo seguiu uma cinética de segunda ordem em relação ao grau de intumescimento. Esse comportamento é típico de processos nos quais a difusão de solvente é controlada pelo relaxamento das cadeias².

Figura 1. Intumescimento dos hidrogéis em água destilada

O hidrogel CTS-g-PAA apresentou uma maior capacidade no equilíbrio ($W_{eq} = 140 \pm 6$ g H₂O/g gel), maior velocidade de absorção de água, e conseqüentemente, um menor tempo para atingir o equilíbrio (t_{eq}). Como esperado, o intumescimento é fortemente dependente da composição e do caráter hidrofílico dos grupos funcionais presentes nas unidades estruturais dos hidrogéis, variando na seguinte ordem: $-\text{COO}^- > -\text{COOH} > -\text{CONH}_2 > -\text{OH}$. Além disso, interações entre as unidades funcionais podem afetar o intumescimento, isto é, à formação de ligações de hidrogênio entre os grupos carboxílicos no PAA e os grupos amida no PAM. Essas ligações de hidrogênio introduzem ligações cruzadas adicionais à rede do hidrogel, diminuindo sua capacidade de intumescimento³.

Agradecimentos

Ao CNPq, à FUNCAP (BP3-0139-00257.01.00/18), UECE e à UVA.

¹Rodrigues, F. H. A., Fajardo, A. R., Pereira, A. G. B., Ricardo, N. M. P. S., Feitosa, J. P. A., & Muniz, E. C. *Journal of Polymer Research*, **2012**, 19, 1.²Karadag, E., Uzum, O. B., Saraydin, D. *Materials Design*. **2005**, 26, 265.³Mahdavinia, G. R., Pourjavadi, A., Hosseinzadeh, H., Zohuriaan, M.J. *Modified chitosan*. *European Polymer Journal*. **2004**, 40, 1399.

Área: MAT

(Inserir a sigla da seção científica para qual o resumo será submetido. Ex: ORG, BEA, CAT)

Nº de Inscrição: 00862

(Inserir o número de inscrição do autor que fez a submissão)

Immobilization of proinflammatory lectin (DwL) on sodium titanate nanotube

Thaiz B.A.R. Miguel (PQ),¹ Manuela O. Castro¹ (PQ), Emilio, C. Miguel² (PQ), Benildo S. Cavada³ (PQ), Kyria S. Nascimento³ (PQ), Odair P. Ferreira (PQ)¹

thaiz@fisica.ufc.br; opferreira@fisica.ufc.br

¹Laboratório de Materiais Funcionais Avançados (LaMFA), Departamento de Física, UFC; ²Central Analítica, UFC; ³Laboratório de Moléculas Biologicamente Ativas, Departamento de Bioquímica e Biologia Molecular, UFC.

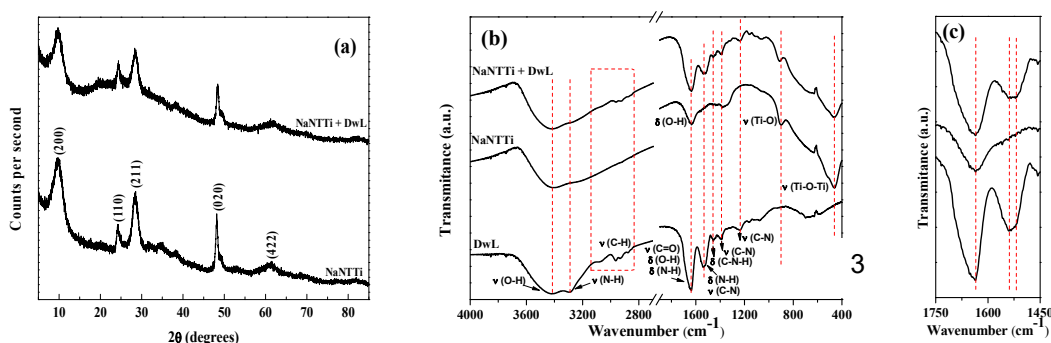
Palavras Chave: *bioconjugation, adsorption, protein, inorganic nanomaterials, nanohybrid.*

Highlights

Multifunctional Nanohybrid has potential of application in several areas;
Lectin was adsorbed on sodium titanate nanotubes;
The adsorbed lectin remained functional;

Abstract

Nanotechnology is growing every year and revealing materials that do not follow the physical and chemical principles of the extended solid. Such behavior reveals possibilities of new applications, potentialized when the nanomaterials are conjugated to biomolecules, forming multifunctional hybrids. The aim of this work was to prepare a nanohybrid from the interaction of sodium titanate nanotubes (TNT) with the proinflammatory lectin isolated from *Dioclea wilsonii* (DwL) seeds. Therefore, 10 mg/mL of TNT in 0.01 mol/L sodium phosphate buffer (PBS) pH 7.4 were sonicated for 20 min and then placed in contact with DwL solution (10 mg/mL in PBS). The resulting suspension was kept under stirring for 2 h at 37 °C and then centrifuged and washed with PBS and ultrapure water. The nanostructured system was oven dried at 37 °C and physicochemical characterization studies were carried out: XRD, FTIR, SEM and TEM. The results indicated that almost all of the lectin was adsorbed on sodium titanate nanotubes and that it remained functional (evaluated by interaction of carbohydrate with the nanohybrid), demonstrating that this interaction is viable and does not prevent the use of the protein functionality after its adsorption. The XRD and TEM results indicated that there was no significant change in both the structure (Figure 1a) and the morphology of the nanotubes. The FTIR spectra (Figures 1b and 1c) suggested the presence of the protein in the final nanomaterial. However, the mechanism of this interaction still needs to be elucidated. So, the methodology presented was simple, cheap and effective for the preparation of multifunctional hybrid nanomaterials.



Figures 1: (a) XRD and (b-c) FTIR analysis of titanate nanotubes (Na-NTTi) and nanohybrid (Na-NTTi+DwL)

Agradecimentos/Acknowledgments

Universidade Federal do Ceará (UFC), SisNano, CNPq, Capes, Funcap, Central Analítica-UFC

Área: INO

(Inserir a sigla da seção científica para qual o resumo será submetido. Ex: ORG, BEA, CAT)

Nº de Inscrição: 00863

(Inserir o número de inscrição do autor que fez a submissão)

Synthesis and characterization of Cu(II) complex derivate of oxamate ligand**Nathália A. Costa (IC),^{1*} Lucas H. G. Kalinke (PQ),² Danielle Cangussu (PQ).²**

nathaliaalmeidact@gmail.com; danielle_cangussu@ufg.br

Instituto de Química, Universidade Federal de Goiás, UFG,^{1,2}

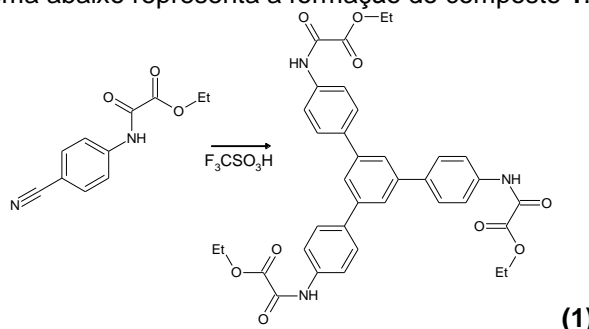
Palavras-chave: Síntese, Oxamato, Cobre(II).

Highlights

In this work we describe the preparation and characterization of the ligand of formula $H_3Et_3(TOPT)$ [TOPT = tris (4-phenyloxamate)triazine] and the complex of formula $[Cu_3(TOPT)_2]$.

Resumo/Abstract

Os polímeros de coordenação são formados a partir de ligantes orgânicos e íons metálicos. Ligantes do tipo oxamato vêm se mostrando versáteis devido à possibilidade de atuar como ponte entre íons metálicos, levando a formação de redes com diferentes tipos de arquitetura.[1] Os mesmos permitem a obtenção de estruturas metalosupramoleculares, chamados de metaloligantes, que atuam na construção de polímeros heterobimetálicos [2]. Neste trabalho foi feita a síntese e caracterização de um novo ligante oxamato de formula $H_3Et_3(TOPT)$ (**1**) e do complexo precursor inédito de Cu(II) de formula $[Cu_3(TOPT)_2]$ (**2**) [TOPT = tris(4-feniloxamato)triazina]. Para a obtenção do intermediário do composto **1** utilizou-se a 4-aminobenzonitrila na síntese do composto P-CNPO [CNPO = cianofenileno-oxamato] com um rendimento de 65,7%. O composto **1** foi obtido a partir da reação entre P-CNPO e F_3CSO_3H com um rendimento de 76,5%. O composto **2** foi obtido pela reação de **1** com um sal de Cu(II) em meio básico, obteve-se um rendimento de 39%. O esquema abaixo representa a formação do composto **1**.

**(1)**

Por RMN-H caracterizou-se os compostos P-CNPO e **1**. Para o composto **1** foi possível observar o primeiro multipletto, que se refere aos três H ligados ao N; o segundo, se refere aos H ligados ao anel aromático e, consequentemente, o último valor se refere aos nove H da metila ($11.38-10.82(m, 3H)^1$, $8.97-7.59(m, 15H)^2$, $4.33(dd, J=13.4, 6.6 \text{ Hz}, 6H)$, $1.33(t, 9H)^3$. Os compostos **1** e **2** foram caracterizado por espectroscopia na região do infravermelho e por análise elementar confirmando a fórmula proposta.

¹ Y. Journaux, *Et al.*, *Eur. J. Inorg. Chem.* 2018, 228.² C. Janiak, *Et al.*, *Dalton.* 2003, 14, 2781.**Agradecimentos/Acknowledgments**

CNPq, CAPES, UFG

Aplicação de aerogel de grafeno como fase extratora na determinação *on-line* de Cd²⁺ com detecção por FAAS

Grazielle Cabral de Lima (PG), Fabrcio Alves Borges (IC), Larissa de Castro (IC), Giovana de Fátima Lima (PQ), Pedro Orival Luccas (PQ), Eduardo Costa de Figueiredo (PQ).

fabricaoalvesborges@hotmail.com, graziunifal@yahoo.com.br

¹Instituto de Química, Universidade Federal de Alfenas (UNIFAL-MG).

Palavras Chave: extração em fase sólida, aerogel de grafeno, cádmio, FAAS.

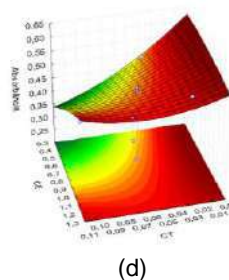
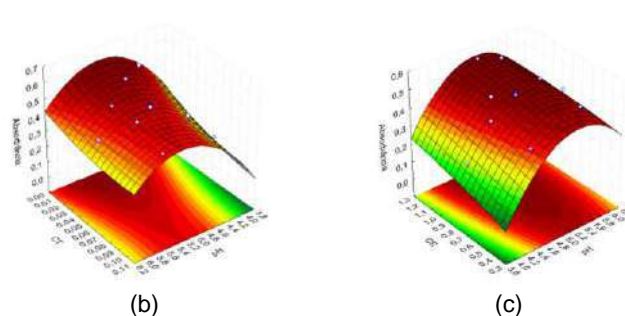
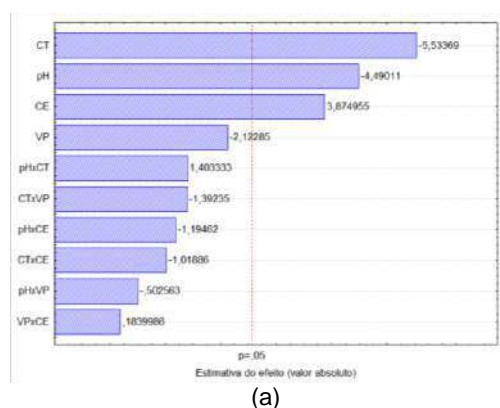
Highlights

Application of graphene airgel as extraction phase in the on-line determination of Cd²⁺ with detection by FAAS. Solid phase extraction; Graphene airgel as extractive material; Flow injection analysis; Multivariate optimization;

Resumo/Abstract

Considerando a exposição humana e meio ambiente aos metais tóxicos, é inquestionável a necessidade de monitoramento e quantificação desses contaminantes. Contudo, pré-tratamentos que visam eliminar interferências e/ou melhorar a detectabilidade podem ser necessários. A extração em fase sólida é uma excelente alternativa sendo o aerogel de grafeno (GA) um forte candidato a adsorvente, principalmente devido a elevada porosidade, área superficial, resistência mecânica com redes 3D interligadas e um sistema de elétrons π deslocalizados que pode formar fortes interações hidrofóbicas. Nesse estudo avalia-se o potencial extrator do GA na pré-concentração *on-line* de Cd²⁺ com sistema de análise em fluxo (FIA) e detecção por FAAS. O material foi sintetizado segundo P. Zang et al.¹. Neste sistema, percola-se 20 mL de amostra pela minicoluna (150 mg de GA) com eluição em HNO₃ e detecção por FAAS. Os fatores pH amostra (pHa), vazão pré-concentração (VP), concentração tampão (CT) e eluente (CE) foram otimizados com planejamento fatorial 2⁴ (Figura 1) seguido de Matriz de Doehlert para os 3 fatores significativos (pHa, CT, CE), gerando as superfícies de resposta na Figura 1. Nas condições ótimas (CE=1,2 mol L⁻¹, CT=0,049 mol L⁻¹, pH = 5,13) o sistema apresentou: faixa linear de 5 a 300 $\mu\text{g L}^{-1}$ ($r^2 = 0,9952$); LD e LQ de 1,67 e 5,58 $\mu\text{g L}^{-1}$ respectivamente; fator de pré-concentração (17); índice de consumo (1,18 mL); frequência de amostragem (20 análises/hora); precisão de 5,5% (Cd²⁺ 50 $\mu\text{g L}^{-1}$) e 2,24% (Cd²⁺ 200 $\mu\text{g L}^{-1}$). Estudos futuros incluem interferentes, exatidão, aplicação em amostras ambiental e/ou alimentícia.

Figura 1: (a) Diagrama de Pareto; Superfícies de resposta: (a) pHxCT; (b) pHxCE; (c) CExpH e d) CExCT.



Agradecimentos:



Referência Bibliográfica:

- [1] P. Zang et al., *Electrochimica Acta*, v. 212, p. 171–178, 2016.
- [2] Barros N. B. et al., 2a ed., Ed. Unicamp: Campinas, 2002

Área: AMB*(Inserir a sigla da seção científica para qual o resumo será submetido. Ex: ORG, BEA, CAT)***Nº de Inscrição:***(Inserir o número de inscrição do autor que fez a submissão)*

Matrix effects on the degradation of a mixture of pharmaceuticals by heterogeneous photocatalysis

Cleiseano E. S. Paniagua (PG)^a, Bárbara R. Gonçalves (PG)^a, Eduardo. O. Marson (PG)^a, Ivo Amildon Ricardo (PG)^b, Vinicius A. B. Paiva (PG)^a, Alam G. Trovó (PQ)^{a*}
alamtrovo@ufu.br; cleiseano.paniagua2@gmail.com

^a Universidade Federal de Uberlândia, Instituto de Química, Uberlândia, Minas Gerais, Brasil, CEP 38.400-902

^b Serviço Distrital de Educação Juventude e Tecnologia, 1202 Macia, Mozambique

Keywords: advanced oxidation process, sewage treatment plant effluent, surface water, titanium dioxide, toxicity.

Highlights

A TiO₂ concentration of 450 mg L⁻¹ was required in STP matrix; Synergistic effect on degradation efficiency by coupling TiO₂ and H₂O₂ in DW and SW; Antagonistic effect by coupling TiO₂ and H₂O₂ in STP

Abstract

Pharmaceuticals are not removed by conventional processes, being determined in different aqueous matrices. In this work, the simultaneous degradation of the pharmaceuticals gemfibrozil, hydrochlorothiazide and naproxen by heterogeneous photocatalysis using TiO₂ in suspension under black light irradiation was evaluated in deionized water (DW), surface water (SW) and sewage treatment plant (STP) effluent aiming to evaluate as the matrix composition affects the operational parameters and degradation efficiency. The results showed the strong influence of the matrix composition on operational parameters evaluated and degradation efficiency of the target compounds. For the higher complexity matrix, STP effluent, a TiO₂ concentration three times higher (450 mg L⁻¹) and a twice as long treatment time was required to reach the same degradation efficiency of the target compounds when compared to DW and SW matrices. In addition, the combination of 6 mg L⁻¹ H₂O₂ with 150 mg L⁻¹ TiO₂ increased the degradation rate and efficiency of the target compounds at DW and SW matrices. On the other hand, no synergistic effect was obtained in STP matrix using 450 mg L⁻¹ TiO₂ and ranging the H₂O₂ concentration from 50 up to 200 mg L⁻¹, as a consequence of the generation of electron-accepting specie from inorganic species naturally present in this matrix. Finally, on the basis of the toxicity results in real matrices, this technology can be used as an alternative for degradation of these target compounds.

Área: QPN

(Inserir a sigla da seção científica para qual o resumo será submetido. Ex: ORG, BEA, CAT)

Nº de Inscrição: _00869

(Inserir o número de inscrição do autor que fez a submissão)

Acetylcholinesterase and beta-secretase co-immobilized in agarose beads: development of off-line assay for ligand screening

Adriana Ferreira Lopes Vilela (PG)¹, Cesar Mateo (PQ)², Carmen Lucia Cardoso* (PQ),¹

ccardoso@ffclrp.usp.br

¹ Departamento de Química, Grupo de Cromatografia de Bioafinidade e Produtos Naturais, Faculdade de Filosofia, Ciências e Letras de Ribeirão Preto, Universidade de São Paulo, Ribeirão Preto, Brazil; ² Departamento de Biocatálisis, Instituto de Catálisis y Petroleoquímica (CSIC), Campus Universidad Autónoma de Madrid, Madrid, Spain

Key words: Acetylcholinesterase, beta-secretase, co-immobilization of enzymes, off-line dual-enzymatic assay

Highlights

An off-line dual-enzymatic assay to screen acetylcholinesterase and beta-secretase1 ligands was developed. Co-immobilization was performed via amine-glutaraldehyde reaction. The best conditions for the enzymatic assays were evaluated.

Abstract

Alzheimer's disease (AD) is a complex and multifactorial disease that is linked to pathological pathways. This knowledge has stimulated a substantial research effort to design multi-target ligands for AD treatment. The enzymes Acetylcholinesterase (AChE) and Beta-secretase (BACE1) are involved in AD etiology and represent the rationale behind the synthesis of new inhibitors to moderate AD forms [1]. To improve identification and characterization of multi-target ligands, fast and reproducible screening assays are necessary. Immobilized enzymes are key to reusing the enzyme and to providing more reproducible results as compared to the traditional enzyme soluble form [2]. Co-immobilization of targets is an innovative procedure that can be a useful tool to identify multi-target ligands. We describe the development of a new assay based on AChE and BACE1 co-immobilization on agarose beads. Co-immobilization involved three steps: first, agarose was activated with different chemical groups, which was followed by modification with glutaraldehyde solution and covalent attachment of the enzymes via amine reaction [3]. The dual enzymatic system was carefully characterized by using acetylcholine (ACh) and JMV2236 as substrates. The best conditions for the enzymatic assay with both enzymes were evaluated. Analyses for each enzyme were carried out off-line by using a liquid chromatography (LC) system coupled to a mass spectrometer (MS) equipped with an electrospray ionization (ESI) interface [4,5]; an open tubular fused silica capillary (30 cm x 0.375 mm x 0.1 mm I.D) was employed as column to inject the solutions after the enzymatic reaction. Kinetic parameters (K_{Mapp}) and inhibition assays were carried out. Tacrine and β -secretase inhibitor were used as standard inhibitors for system validation. The K_{Mapp} values were obtained for AChE and BACE1. Validation studies with inhibitors corroborated that the screening assay can identify and characterize reference ligands. The combination of these two enzymes in a single system offers the ability to screen and to identify possible multi-target inhibitors. This unprecedented method involves lower costs, measures the product from enzymatic hydrolysis by MS directly, does not give false-positive results, allows immediate recovery of the enzymatic activity, and presents specificity, selectivity, and sensitivity.

Acknowledgments

The authors thank FAPESP (201310710-1; 201602873-0), CNPq, and CAPES (Finance code 001) agencies and Ramón Areces foundation for financial support.

References

- [1] Anand R., Gill K.D, Mahdi A. A. Therapeutics of Alzheimer's disease: Past, present and future. *Neuropharmacology* 2014;76 (Part A):27-50.
- [2] Betancor L., Luckarift H.R. Co-immobilized coupled enzyme systems in biotechnology. *Biotechnology and Genetic Engineering Reviews* 2010;27(1):95-114.
- [3] de Melo, R. R., Alnoch R. C., Vilela A. F. L., Souza E. M., Krieger N., Ruller R., Sato H. H., Mateo C. New Heterofunctional Supports Based on Glutaraldehyde-Activation: A Tool for Enzyme Immobilization at Neutral pH. *Molecules* 2017; (22):1088.
- [4] Vilela A.F.L., Cardoso C.L. An on-flow assay for screening of Beta-secretase ligands by immobilised capillary reactor-mass spectrometry. *Analytical Methods* 2017; 9(14):2189-2196.
- [5] Vilela, A.F. L., Seidl, C., Lima, J. M., Cardoso, C. L. An improved immobilized enzyme reactor-mass spectrometry-based label free assay for butyrylcholinesterase ligand screening. *Analytical Biochemistry* 2018; (549): 53–57.

Área: TEO

(Inserir a sigla da seção científica para qual o resumo será submetido. Ex: ORG, BEA, CAT)

Nº de Inscrição: 870

(Inserir o número de inscrição do autor que fez a submissão)

Free energy profile of a model palladium catalyzed nucleophilic fluorination of phenyl bromide

Josefredo R. Pliego Jr. (PQ)¹.

pliego@ufsj.edu.br;

¹Departamento de Ciências Naturais, UFSJ

Palavras Chave: cross-coupling, nucleophilic fluorination, palladium catalysis, DFT calculations.

Highlights

- Exchange of bromide by fluoride in the transmetalation step is unfavorable by 5.4 kcal/mol.
- The overall free energy barrier is 42.4 kcal/mol and corresponds to reductive elimination step.

Resumo/Abstract

Incorporation of fluorine atom in aromatic rings via catalytic nucleophilic fluorination of phenyl halides has been investigated in the past decade. Recently, important advances in the palladium catalyzed process has been reported (*Acc. Chem. Res.* **2016**, 49, 2146-2157). In this work, the free energy profile for a model reaction system has been obtained. It was investigated the fluorination of phenyl bromide with CsF using allylpalladium(II) chloride dimer as the pre-catalyst. The calculations were done with the PBE and M06 functionals, and the solvent effect was included by the SMD model (toluene solution). The results are presented in the Figure 1. Trimethyl phosphine ligand is able to decompose the allylpalladium(II) chloride dimer, forming the tetracoordinate product that is 12.3 kcal/mol below of the reactants. Elimination of the allyl chloride and the oxidative addition of the phenyl bromide (TS1) has a barrier of 24.6 kcal/mol, thus this step is kinetically viable. The transmetalation step, using CsF(s), is unfavorable by 5.4 kcal/mol and the final reductive elimination step (TS2) has a very high free energy barrier of 42.4 kcal/mol. This first step of the present investigation confirms the unfeasibility of this reaction, which requires special ligands and pre-catalysts to be effective.

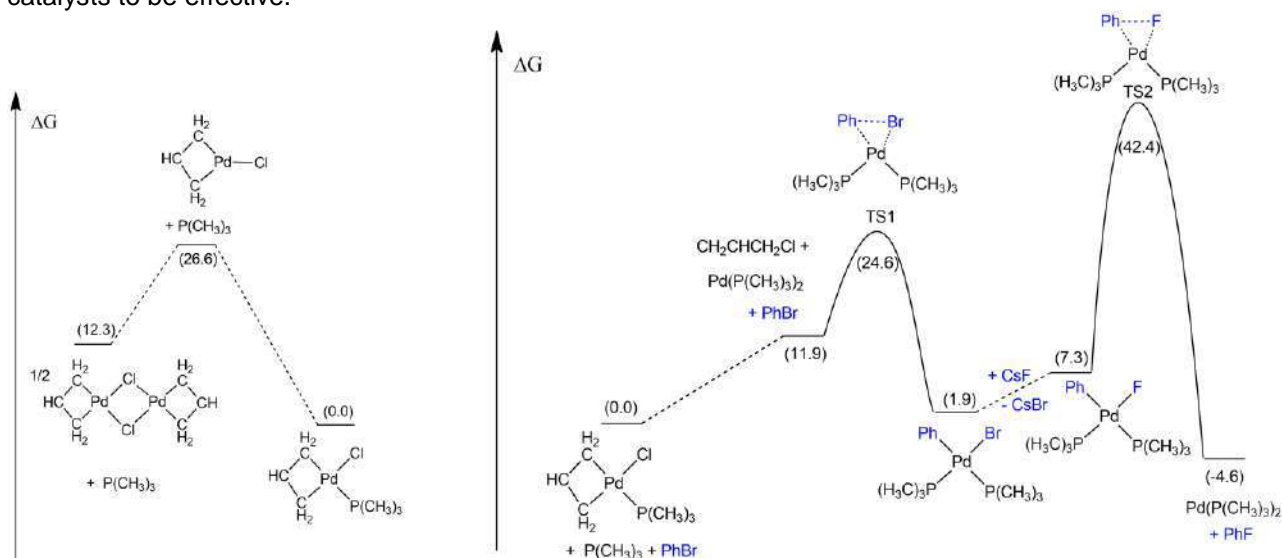


Figure 1: Free energy profiles obtained at M06/TZVP//PBE/SVP level, including solvent effect with SMD model. Units in kcal/mol.

Agradecimentos/Acknowledgments

CNPq, FAPEMIG, CAPES.

Thiol oxidation using selenium functionalized magnetic nanoparticles (MNP-Se)

Gabriela Pinheiro (IC)¹, Roberta R. Campedelli (PG)¹, Mariana Dal Farra (IC)¹, Juliano A. Rohers (PQ)², Ricardo F. Affeldt (PQ)¹ and Bruno S. Souza (PQ)¹.

gabrielappinheiro@gmail.com; bruno.souza@ufsc.br

¹Department of Chemistry, Federal University of Santa Catarina – UFSC, Florianópolis - SC; ²IFSul- Pelotas - RS

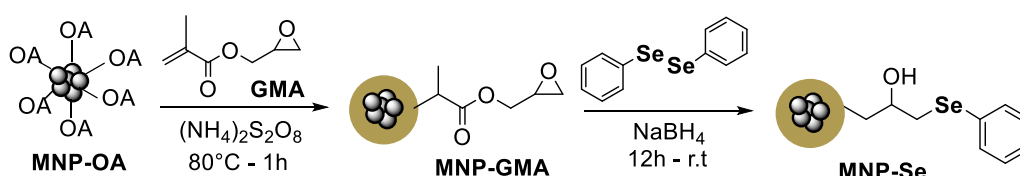
Keywords: magnetic nanoparticles, thiol oxidation, selenoether.

Highlights

Functionalization of polymer-coated magnetic nanoparticles with diphenyl diselenide is reported. The material is an efficient catalyst for oxidation of thiol to disulfide. Mild reaction conditions and easy catalyst recovery are attained.

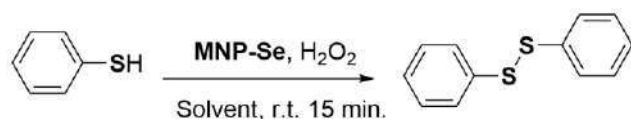
Abstract

Organoselenides have demonstrated glutathione peroxidase (GPx) like activity in the presence of hydrogen peroxide. The reaction produces hydroxy perhydroxy selenane, a strong oxidizing agent that converts thiols to disulfides.¹ In this context, we are interested on preparing higher oxidation states sulfur compounds using phenylselenoether functionalized magnetic nanoparticles as a catalyst of easy recovery. The catalyst is prepared as depicted in Scheme 1. Initially, 9.5 nm magnetic nanoparticles stabilized with potassium oleate (MNP-OA) were copolymerized with glycidyl methacrylate (GMA).² Then, the epoxide ring was opened with diphenyl diselenide.



Scheme 1. Synthesis and functionalization of NPMs.

The MNP-Se were tested on benzenethiol oxidation in different solvents (THF, H₂O, ACN and MeOH) at room temperature leading to diphenyl disulfide in 15 minutes as given in table below. Recovery of the MNP-Se is easy and no significant loss of catalytic activity was obtained in the second use (entry 2). These reactions are currently being optimized.



| Entry | Solvent | Yield (%) ^c |
|----------------|------------------|------------------------|
| 1 | THF | 63 |
| 2 ^a | THF | 59 |
| 3 | MeCN | 47 |
| 4 | H ₂ O | 54 |
| 5 ^b | MeOH | 80 |

Conditions reaction: 5 mg MNP-Se, 1 eq. H₂O₂, r.t. 1 mL solvente, ^areuse. ^b10 eq. H₂O₂. ^cIsolated yields.

- V. Nascimento, E. E. Alberto, D. W. Tondo, D. Dambrowski, M. R. Detty, F. Nome and A. L. Braga, *J. Am. Chem. Soc.*, 2012, **134**, 138.
- W. Wang, Y. Xu, D. I. C. Wang and Z. Li, *J. Am. Chem. Soc.*, 2009, **131**, 12892.
- M. Tiecco, L. Testaferri, F. Marini, S. Sternativo, C. Santi, L. Bagnoli and A. Temperini, *Tetrahedron*, 2007, **63**, 5482.

Acknowledgments

CNPq process No 455181/2014-4, INCT-Catálise and PPGQMC-UFSC for financial support.

Área: **EDU**Nº de Inscrição: **00874**

Um estudo sobre as práticas pedagógicas no ensino de Química com turmas do ensino médio

Mayara Vale de Andrade (IC)¹, Ellen Cristina Costa da Silva (PQ)¹, José Felício da Silva (P)^{1*}.

vallymayara@gmail.com; ellensilva@yahoo.com.br; j.felicio@bol.com.br.

¹Departamento de Química, CEUNI-FAMETRO.

Palavras Chave: *Ensino de Química, Educação Pública, Processo de Ensino-Aprendizagem, Ensino Médio, Química.*

Highlights

A study on pedagogical practices in teaching Chemistry to high school classes. The importance of the analysis in the teaching/learning process of chemistry, for the formation of human being and understanding world.

Resumo

O estudo das ciências da Natureza possibilita ao homem contemplar traços de arquitetura de inteligência em sua própria criação, e perceber que, compreender os estudos da Química, possibilita vislumbrar toda essa engenhosidade de forma a acrescentar valores para o seu próprio desenvolvimento e posteriormente transmiti-lo para as gerações futuras. A educação, é o fator principal para a formação do caráter do ser humano, quanto melhor a sua qualidade, melhor será seus resultados perante a sociedade e compreensão de mundo. Com isto, deve-se haver uma análise constante, em prol de saber o seu rendimento no processo de ensino-aprendizagem.

Uma análise sobre o Ensino de Química em Escolas da rede pública da Cidade de Manaus, foi executado por uma aluna do Curso de Licenciatura em Química do Centro Universitário Fametro, em prol de analisar o a visão do aluno em relação à metodologia utilizada e qualidade no processo de ensino-aprendizagem na disciplina de Química, em turmas de Ensino Médio. O trabalho foi desenvolvido em 5 Escolas da rede Estadual de Ensino, com visitas contínuas durante 1 semestre em cada escola, e por meio de observações em sala de aula, seguida por questionários com os docentes atuantes como profissionais de Química e 467 discentes para a análise geral do Ensino de Química nestas Escolas. Com os resultados (figura 1) observou-se que mais de 50% dos alunos mostraram-se satisfeitos com o Ensino de Química e menos da metade estão insatisfeitos, com o auxílio da acadêmica nas escolas. Esses resultados ocorreram devido ao fato que, os professores utilizaram atividades diferenciadas em sala de aula como: Atividades demonstrativas no cotidiano, experimentos com materiais de baixo custo na própria sala de aula e o auxílio da aluna para novas metodologias.

É de devida importância, a análise contínua sobre o processo de educação de Química no ambiente escolar, onde, em diversas escolas, a mesma vem sendo retratada de forma errônea deixando os discentes com sentimentos de incapacidade em apreender a disciplina.



Figura 1: Análise do ensino de Química nas escolas antes e depois.

CHAGAS, A. P. **Como se faz química: uma reflexão sobre a química e a atividade do químico.** Campinas: Editora da Unicamp, 1989.

MOYSÉS, Gerson Luís Russo; MOORI, Roberto Giro. **COLETA DE DADOS PARA A PESQUISA ACADÊMICA: UM ESTUDO SOBRE A ELABORAÇÃO, A VALIDAÇÃO E A APLICAÇÃO ELETRÔNICA DE QUESTIONÁRIO.** Foz do Iguaçu, PR, Brasil, 2007.

Área: ANA

Nº de Inscrição: 00875

Assessment of analytical performance for polar compound characterization in crude oils by high resolution mass spectrometry

Rafael S. Xavier* (IC), Dayane M. Coutinho (PG), Gabriela Vanini (PQ), Thamara A. Barra (PG), Daniela França (PG), Débora A. Azevedo (PQ).

rafaelsalesxavier@hotmail.com; debora@iq.ufrfj.br

Laboratório de Química Orgânica Molecular e Ambiental (LAGOA), Instituto de Química, Brazil.

Palavras Chave: Petroleum, Polar compounds, Repeatability, Intermediate precision, Mass spectrometry.

Highlights

Assessment of repeatability and intermediate precision for Orbitrap mass spectrometry. Analyses of real petroleum samples without pre-fractionation steps.

Resumo/Abstract

The chemical characterization of polar organic compounds, which contain the heteroatoms Nitrogen, Oxygen and Sulfur, found in oil samples is a tough task because of the vast number of compound classes with different properties and concentration. Due to its analytical difficulties, high precision and accuracy techniques are extremely useful to obtain relevant data about the oils. The advances in mass spectrometry techniques, in special with the development of Orbitrap MS, it was even more possible to achieve reliable and relevant data about the oil composition^{1,2,3}.

Nevertheless, it is important to verify the quality of chemical measurement of this technique by the evaluation of analytical parameters, such as precision, that is calculated by the relative standard deviation (RSD%). This parameter can be obtained in two different levels: intermediate precision (inter day analysis) and repeatability (analysis in short period of time)⁴. Thus, this study consists on the assessment of precision to reach better characterization of oil samples with different °API values using high resolution mass spectrometry Orbitrap with electrospray ionization (ESI) source in the negative mode.

Three crude oil samples were selected according to their °API values (17.1, 28.0 and 37.8). Samples were prepared in triplicate by weighing 0.5, 1.0 and 2.0 mg of each one and dissolving them in a mixture of 1:1 toluene/methanol followed by addition of a solution 0.1% NH₄OH. The final concentrations were 0.5, 1.0 and 2.0 mg mL⁻¹ and samples were analyzed in the negative ionization mode.

The mass spectra obtained showed that the peak intensity increases along with the concentration of each sample and it was observed that the intensity decreases in samples with higher °API values. Besides that, for the 37.8 °API oil, a higher number of compound classes was identified at 2.0 mg mL⁻¹, however with higher RSD% for the less abundant classes. For the 17.1 and 28.0 °API oils, the identified classes had lower RSD% values at 1.0 mg mL⁻¹. Considering all samples and their concentrations, most of RSD% values were lower than 20%.

Thus, these results allowed to evaluate the analytical performance for ESI(-)-Orbitrap MS through the achievement of higher reliability data to the characterization of the polar compounds, which had acceptable RSD% values. In addition, it was possible to identify the same class distribution ([N], [O₃], [O₂], [O₃S], [NO₂]) in the inter day studies for the heavier crude oil.

[1] Vanini *et al.*; Microchemical Journal. 137 (2018).

[2] Colati *et al.*; Fuel. 108 (2013).

[3] Martins *et al.*; J. Braz. Chem. Soc. 28 (2017).

[4] ANVISA. Resolução – RE nº 899, de 29 de maio de 2003.

Agradecimentos/Acknowledgments

Os autores agradecem aos órgãos de fomento CNPq, Capes e Faperj pelo suporte financeiro.

Equilibrium studies on the adsorption of Cu²⁺ ions from aqueous solutions by chitosan-g-poly(acrylic acid)/cellulose nanowhiskers

Ana Karen M. C. Farias (IC)¹, Alana A. Lourenço (IC)¹, Carlos E. de C. Magalhães (PQ)², Francisco Helder A. Rodrigues (PQ)^{1*}

karencastrof@gmail.com; almeida_quimica@yahoo.com.br

¹Coordenação de Química, Laboratório de Polímeros e Compósitos (LAPOLICOM), UVA; ²Coordenação de Química, UECE

Keywords: Nanocomposite hydrogels, Isotherm, Cellulose nanowhiskers; Cu²⁺ ions; Wastewater remediation.

Highlights

The experimental data were better explained by the Langmuir adsorption isotherm.
The Langmuir adsorption isotherm suggested a monolayer formation and spontaneous process

Abstract

A series of superabsorbent hydrogels composites based on the biopolymer chitosan (CTS) grafted poly(acrylic acid) and cellulose nanowhiskers (CNWs) were synthesized by solution polymerization according to the procedure described Spagnol et al.¹, with the interest in the study of these systems as alternative adsorbents the of metal ions from aqueous solutions. The equilibrium data to Langmuir and Freundlich isotherm models were fitted to the equilibrium adsorption data to shed light on how the dye molecules interact with the adsorbent surfaces. The isotherm parameters calculated from these models by linear regression method are given in Table 1.

Table 1 Isotherm model parameters for Cu²⁺ ions adsorption on CTS-g-poly(acrylic acid)/CNWs10 wt%.

| Isotherm | | Parameters | CTS-g-poly(acrylic acid)/CNWs |
|------------|--------|---|-------------------------------|
| Langmuir | Type I | q _e (mg.g ⁻¹) | 325,54 |
| | | q _{max} (mg.g ⁻¹) | 343,64 |
| | | k _{LI} (L.mg ⁻¹) | 6,27 x10 ⁻³ |
| | | R _{LI} | 9,94 x10 ⁻⁴ |
| | | R ² | 0,99598 |
| Freundlich | | k _F ((mg.g ⁻¹)(L.mg ⁻¹) ^{1/n}) | 63,98 |
| | | n | 4,74 |
| | | 1/n | 0,21102 |
| | | R ² | 0,60487 |

The Langmuir isotherm fitted well with the experimental data with R² values considerably higher than those calculated from the Freundlich isotherm, which indicate that the adsorption process of Cu²⁺ ions on the CTS-g-PAA/CNWs10 wt% composites is driven by the formation of a dye monolayer on the adsorbent surfaces. In this case, such surfaces show a homogeneous morphology and a finite number of identical sites. Further, the q_{m,cal} values are in agreement with the q_e values as demonstrated in Table 1. Other studies using hydrogel for Cu²⁺ ions removal have found similar behavior^{2,3}.

Acknowledgments

To CNPq, FUNCAP (BP3-0139-00257.01.00/18), UECE and UVA.

¹Spagnol, C.; Rodrigues, F.H.A.; Pereira, A.G.B.; Farjado, A.R.; Rubira, A.F.; Muniz, E.C. *Carbohydrate Polymers*. **2012**, *87*, 2038.

²Wen-Bo, W.; Da-Jian, H.; Yu-Ru, K.; Ai-Qin, W. *Colloids and Surfaces B: Biointerfaces*, **2013**, *106*, 51.

³Xiaohuan, W.; Yian, Z.; Aiqin, W. *Journal of Hazardous Materials*. **2009**, *68*, 970.

42ª Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química: Eixos Mobilizadores em Química

Multifunctional Hybrid Material constituted by Prussian Blue Complex and Perylene Salt

¹Caio L.C. Carvalho (PG), ¹Iara S. Rocha (PG)*, ¹Janildo L. Magalhães (PQ), ¹Welter Cantanhêde (PQ)

caiolenon2011@gmail.com; iaraufpi@hotmail.com

¹LAS - Laboratório de Automontagem Supramolecular, Departamento de Química, Centro de Ciências da Natureza, Universidade Federal do Piauí (UFPI), Teresina-PI.

Keywords: Hybrid material, Prussian Blue complex, Perylene Salt, Electrochemical properties

Highlights

A new hybrid material was prepared by precipitation method. Prussian blue-Perylene salt (PB-PTK) showed optical and electrochemical properties. PB-PTK hybrid is attractive for sensors applications.

Abstract

The use of chemistry tools permit preparation of new structures multifunctional aiming control their physical and chemical properties.¹ Prussian blue (PB) and perylene-3,4,9,10-tetracarboxylate tetrapotassium salt (PTK) have been the focus of intense research due to their properties as optical, electrochemical, photophysical, etc.^{2,3,4} We report the synthesis and characterization of a hybrid material (PB-PTK) by chemical precipitation of iron salts in the perylene solution at pH ~ 7.0.³ The UV-vis spectrum (Figure 1A) of PB-PTK showed absorption bands which are characteristics of the two isolates materials with maximum absorption band at 680 nm attributed to the intervalence band of Prussian blue. Additionally, the absorbance peaks at 438 and 468 nm were attributed to the electronic transitions of 0→1 and 0→0 of the perylene, respectively.² The cyclic voltammogram (Figure 1B) for PB-PTK exhibited two redox pairs, attributed to the conversion of Prussian blue (PB) in Prussian white (PW) and PB in Prussian green (PG), respectively.⁴ It can be observed that half wave potentials and peak-to-peak separation are similar to the Prussian blue complex. Moreover, it was observed that current peak intensities of the two redox processes increased in more than 250 %. In the case PTK molecules improve electrons transfer without affecting the electrochemical reversibility of Prussian blue complex. The supramolecular self-assembly strategy for PB-PTK production was successful performed. Although further electrochemical and spectroscopic studies with different electrolytes and immobilization processes are required to completely understand the operating performance of a material, we believed that PB-PTK material may be interesting for development of new platforms for application in nanomedicine (e.g. electrochemical sensors for clinical analysis and photodynamic cancer therapy).

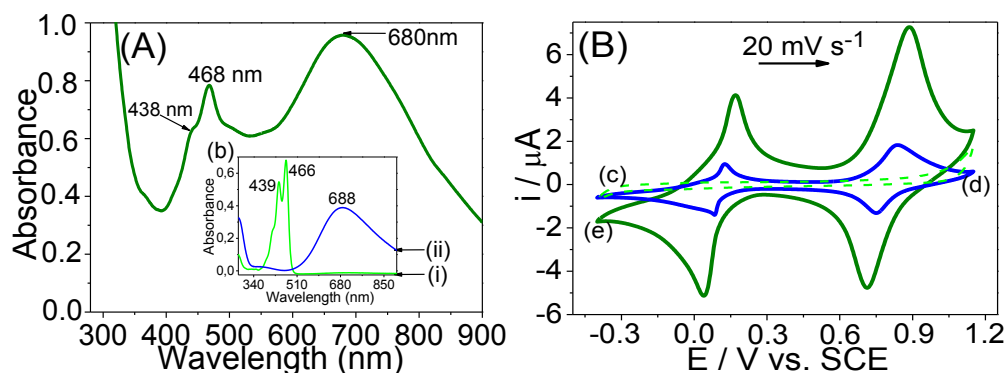


Figure 1. (A) UV-vis absorption spectrum for PB-PTK. *Inset:* (i) UV-vis absorption spectrum of PTK and (ii) UV-vis absorption spectrum of PB. (B) Cyclic voltammograms for: (c) Bare glassy carbon electrode, (b) PB complex and PB-PTK hybrid material. Electrolyte: 0.1 mol L⁻¹ KCl and T = 25 °C.

Acknowledgments

CAPES and CNPq.

¹Long, J. et al. Dalton Trans., **2016**, 45, 17581-17587.

²Hariharan, P. S. et al. Optical Materials, **2017**, 64, 53–57.

³Huajian, C. et al. RSC Advances, **2017**, 7, 248-255.

⁴Lin, C. et al. Biosensors and Bioelectronics, **2018**, 30, 168-174.

Área: INO

Nº de Inscrição: 00878

Synthesis and characterization of shigaite-type material at room temperature

Suelen A. C. Pereira (IC)¹, Maria C. N. Corrêa (IC)¹, Kássia L. L. Marinho (PG)^{2*}, Renata de S. Nascimento (PG)², Thays C. C. Lavra (PG)³, Bruno A. M. Figueira (PQ)², José M. R. Mercury (PQ)³

suelen.aurora@gmail.com; kassialene@gmail.com

¹Instituto de Engenharia e Geociências, UFOPA; ²Pós Graduação em Sociedade, Ambiente e Qualidade de Vida, UFOPA; ³Pós Graduação em Engenharia de Materiais, IFMA.

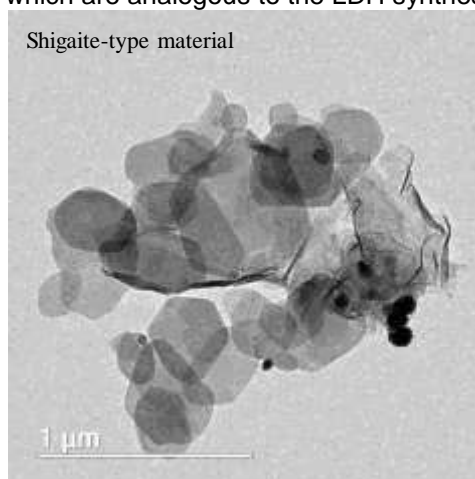
Keywords: Layered double hydroxide, Shigaite, Synthesis, Characterization.

Highlights

Shigaite, a rare layered double hydroxide (Mn/Al-SO₄) has been obtained at room temperature. The characterization investigation has been performed by X-ray diffraction.

Abstract

This work deals with the synthesis of anionic clay with shigaite-type structure by co-precipitation route. Shigaite is a rare mineral belonging to the layered double hydroxide (LDH) class with the general formula Al₄Mn₇(OH)₂₂(SO₄)₈H₂O. The final product characterization was performed by X-ray diffraction, infrared spectroscopy, scanning electron microscopy and high-resolution transmission electron microscopy with EDS. The results have showed that shigaite-type material could be obtained at room temperature for 1 day with a high degree of crystallinity and with no impurities. According XRD analysis, the shigaite-type phase could be identified with 11,5 Å interlayer distance, rhombohedral (R-3 space group), unit cell with $a = 9.51 \text{ \AA}$, $c = 33.10 \text{ \AA}$ and $V = 2594.68 \text{ \AA}^3$. FTIR spectrum of the product presented bands around 3434, 1654, 1115, 1105, 958, 775, 615, 533 and 420 cm⁻¹ and could be assigned to the layered framework structure. The shigaite-type material had typical platy shapes, which are analogous to the LDH synthesized by hydrothermal synthesis.



Acknowledgments

National Council for Scientific and Technological Development (No. 420169) and Coordination for the Improvement of Higher Education Personnel (No. 88881.160695), LAMIGA Laboratory (UFPA) and UFOPA supported this work. The authors thank the Center of Microscopy-UFMG.

Aprendizagem baseado em desafios: uma experiência no ensino de química focando a interdisciplinaridade

Brayan I. Teodoro (IC),¹ Eduarda C. Saponi (IC),¹ Joyce T. Silva (TC),¹ Kaique R. Gonçalves (IC),¹ Kauê Z. Luiz (IC), Walter J. Salcedo(PQ)² e Ruth F.V.V. Jaimes (PQ).^{1*}

*rfvillam@iq.usp.br; ruth.jaimes@ufabc.edu.br ¹CCNH - Universidade Federal do ABC (UFABC) ; ²EPUSP

Palavras Chave: Aprendizagem baseado em desafios, exploração interdisciplinar.

Highlights

Challenge-based learning as the interdisciplinary methodology.

Resumo/Abstract

Pesquisas recentes mostram que, mais do que nunca, os cursos de graduação têm recebido alunos com deficiências em sua formação escolar. Entre os diversos fatores responsáveis está o próprio sistema de ensino, estruturado em disciplinas isoladas. Esse tipo de estrutura impossibilita que os estudantes de hoje percebam as conexões existentes entre os diferentes conteúdos, o que levaria naturalmente a um aprendizado interdisciplinar. Assim, surge a questão: o que deve ser feito para estimular na presente geração de estudantes um aprendizado em que os conteúdos ministrados construam uma base intelectual mais inspiradora? Além disso, espera-se que esses conteúdos permitam aos estudantes sair de uma forma passiva de aprendizagem, colocando-os como um elemento ativo ao longo desse processo. A Aprendizagem Baseada em Desafios (ABD)^{1,2} é uma alternativa que vem possibilitando a construção de bases intelectuais mais inspiradoras. O método apresenta algumas características peculiares (Fig. 1), das quais podem ser destacadas: cooperação, ação, engajamento, investigação e diversidade de habilidades. Em particular, a ABD propõe que todos os alunos são capazes de aprender e que as disciplinas servem como ponto de contraste e não como guia. No Ensino em Química, a ABD ainda tem pouca difusão no Brasil como método pedagógico. De fato, existem pouquíssimos trabalhos focando a interdisciplinaridade. O objetivo principal do presente trabalho foi investigar e desenvolver a *Aprendizagem de Química Baseado em Desafios focando a interdisciplinaridade*. A investigação foi realizada com uma turma de 25 alunos do 1º quadrimestre da disciplina “Base Experimental das Ciências Naturais” (BCEN), da UFABC. Os alunos tiveram 6 semanas para desenvolver o desafio em grupos de 5 alunos. A experiência foi realizada com o

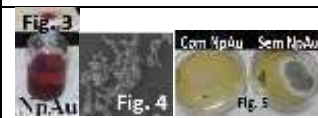


Fig. 1. ABD-Apple Classrooms of Tomorrow-Today (ACOT2)³.



Fig. 2 Ciclo de Aprendizagem Baseado em Desafios.

intuito de colocar o aluno como elemento ativo na construção de conhecimentos essenciais (conceituais) teóricos e práticos. Para isso, buscou-se a aplicação de estratégias e a aquisição de conhecimentos interdisciplinares para desenvolver uma solução viável. A Fig. 2 mostra uma sugestão da organização em ciclos estruturados das



atividades que foram seguidas pelos alunos. A escolha do desafio foi inspirada na experiência de um dos integrantes do grupo, que foi contagiado com uma superbactéria ao visitar seu pai na UTI de um hospital. A questão básica que contextualizou o cenário para o desafio foi “*Metais nobres, como ouro, tem propriedades bactericidas?*”. As hipóteses foram discutidas e, após identificar as possíveis soluções, optou-se por explorar as propriedades intensificadas das partículas do ouro quando estão em níveis nanométricos e uni-las às propriedades cicatrizantes da Quitosana. Para tal foram sintetizadas as nanopartículas de ouro (NPAu) (Fig 3) e caracterizadas por UV-vis e MEV (Fig. 4). Também foram realizados testes bactericidas em meios de cultura utilizando manobras assépticas com e sem as NPAu e/ou Quitosana (Fig.5). Verificou-se o efeito sinérgico bactericida da quitosana integrado a NPAu. Os resultados foram apresentados no XIV simpósio BECN, na forma de pôster. Para avaliar o nível cognitivo dos alunos foram aplicadas 15 questões orais individuais e em pares e 15 testes escritos. Os testes foram gravados, transcritos e analisados estatisticamente. Três dos cinco alunos manifestaram a preferência pela realização do teste em pares. Alguns conteúdos contemplados na avaliação foram: particularidades do ouro, propriedades macro, micro e nanoscópicas, peculiaridades da síntese e caracterização das NPAu, propriedades da Quitosana, testes bactericidas, entre outros. Devido ao acompanhamento muito próximo dos alunos foi possível observar o interesse e engajamento dos mesmos no aprendizado e aprofundamento nas áreas apresentadas pelo tema-desafio. Verificou-se um elevado nível cognitivo dos alunos pelas respostas das questões essenciais. A ABD é relevante pelo seu caráter inter e multidisciplinar, conseguindo potencializar a criticidade e criatividade dos alunos. O método mostra-se promissor e inovador para uma formação global e inclusiva que permitirá que o estudante consiga realizar conexões entre os conteúdos de diferentes áreas da ciência.

¹Alves et al. *Quim. Nova*, 2011 (34),7,1275-1280; ²Santiago et al. *J. Chem. Educ.*, 2016 (3) 456-469; ³Learning in the 21st Century. http://ateneu.xtec.cat/wiki/form/wikiexport/_media/materials/jornades/jt101/bloc1/acot2_background-1.pdf. (acesso em Junho 2018)

Agradecimentos/Acknowledgments

Ao XIV Simpósio Base Experimental das Ciências Naturais da UFABC.

42ª Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química - SBQ

Área: ELE

(Inserir a sigla da seção científica para qual o resumo será submetido. Ex: ORG, BEA, CAT)

Nº de Inscrição: 00880

(Inserir o número de inscrição do autor que fez a submissão)

Electro-Active Photonic Device for Bioanalytical Applications

Klester S Souza (PQ),^{1*} Melissa Rodrigues (PG),² Marcelo B Pereira (PQ),² Tarso L Kist (PQ),³ Sergio M. Mendes (PQ),⁴ Flavio Horowitz (PQ),²

klester.santos@ufrgs.br;

¹Instituto de Química UFRGS; ² Instituto de Física UFRGS; ³ Departamento de Biofísica UFRGS; ⁴ Department of Physics and Astronomy, University of Louisville/USA.

Key words: Biosensor, Optical Waveguide, Spectroelectrochemistry, Methylene Blue.

Highlights

An optical electrochemical spectroscopy technique based on an electro-active optical waveguide (SM-EA-IOW) is being used for developing a highly sensitive oligonucleotide-based biosensing systems.

Abstract

An optical absorbance electrically modulated strategy using a single-mode, electro-active, integrated optical waveguide (SM-EA-IOW) has been showing promising results reaching very low limit of detection. The breakthrough of this device relies on the ability to interrogate very small fractions of a full monolayer while offering a much longer effective pathlength. Therefore, even those molecules with weak optical changes under redox events can be optically monitored for spectroelectrochemical transduction. In this work, an optical electrochemical spectroscopy technique based on SM-EA-IOW is being used for developing a highly sensitive biosensor for detection of virus disease. Figure 1 shows the experimental set up used. The first step was to assemble the experimental apparatus and prove its robustness for the spectroelectrochemical transduction. As probe molecule we used Methylene Blue (MB) since its features a reversible change in optical absorption throughout a transition in oxidation states. Using purely optical measurements with guided light, the electrochemical response of the MB was monitored while AC potential modulation was applied to the surface of the EA-IOW device. From the experiments we were able to reconstruct the faradaic current density obtaining the value of the formal potential $E_f = -179$ mV and current density of $i_p = 1,26 \times 10^{-6} \text{ A} \cdot \text{cm}^{-2}$. The results provided a straightforward identification of the redox process related to the MB on the device surface and pointed out a promising future of the SM-EA-IOW as a biosensor.

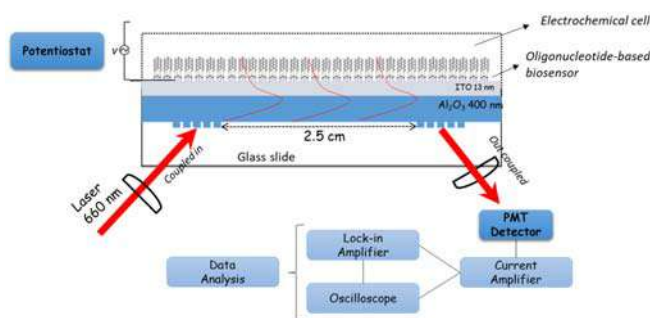


Figura 1: Scheme of the experimental setup.

Adsorção e dessorção de íons Cu^{2+} a partir de hidrogéis de quitosana enxertado com poli(ácido acrílico) e nanowhiskers de celulose

Alana A. Lourenço (IC)¹, Ana Karen M. C. Farias (IC)¹, Carlos E. de C. Magalhães (PQ)², Francisco Helder A. Rodrigues (PQ)^{1*}

Alanaaraujo180@gmail.com; almeida_quimica@yahoo.com.br

¹Coordenação de Química, Laboratório de Polímeros e Compósitos (LAPOLICOM), UVA; ²Coordenação de Química, UECE

Palavras Chave: Hidrogéis superabsorventes, Nanocompósitos, íons metálicos, adsorção-dessorção, reuso.

Highlights

Adsorption and desorption of Cu^{2+} ions from hydrogels based on chitosan grafted poly(acrylic acid) and cellulose nanowhiskers

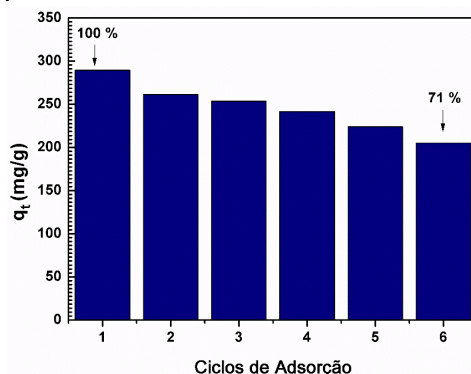
Nanocomposite hydrogels is a high performance recyclable adsorbent.

Nanocomposite hydrogels present outstanding capacity to be employed in the remediation of Cu^{2+} ions contaminated wastewaters

Resumo

Hidrogéis nanocompósitos baseado em quitosana (CTS) enxertada com poli(ácido acrílico) e nanowhiskers de celulose (10% NWCs) foram sintetizados¹, e a capacidade de regeneração e de reutilização foi avaliada através de vários ciclos de adsorção ($[\text{Cu}^{2+}] = 1000 \text{ mg.L}^{-1}$; $\text{pH} = 4,0$; Tempo de contato: 30 min) e dessorção ($[\text{HCl}] = 0,1 \text{ mol/L}$; Tempo de contato: 30 min). Uma solução de NaOH 0,1 mol/L foi usada como agente de regeneração. A concentração residual de íons Cu^{2+} foi determinada por espectroscopia de absorção atômica (Shimatzu Modelo AA-7000), através de uma equação linear obtida a partir de uma curva analítica que correlaciona a absorção com a concentração do metal ($\text{ABS} = 1,6 \times 10^{-4}[\text{Cu}^{2+}] - 9,65 \times 10^{-3}$, $R^2 = 0,9984$). A capacidade de adsorção do hidrogel compósito em cada ciclo de adsorção-dessorção de íons Cu^{2+} é mostrada na Figura 1.

Figura 1. Capacidade de adsorção do hidrogel compósito (CTS-g-PAA/10% NWCs) durante vários ciclos de adsorção-dessorção de íons Cu^{2+} .



Observou-se que a capacidade de adsorção (q_e) dos hidrogéis nanocompósitos apresentou uma diminuição na eficiência de adsorção de aproximadamente 29 %, quando comparados, o primeiro (289 mg/g) e o sexto (205 mg/g) ciclo de adsorção. Wen-Bo W. *et al.*² reportaram que hidrogéis do tipo semi-IPN baseado em quitosana enxertado com poli(ácido acrílico) e gelatina, apresentava q_e após o 5º ciclo de adsorção-dessorção de íons Cu^{2+} de aproximadamente de 154 mg/g. A elevada eficiência de adsorção de íons Cu^{2+} durante os vários ciclos de adsorção-dessorção pode ser atribuída à regeneração da maioria dos grupos carboxilatos presentes no nanocompósito em estudo, proporcionada pelo agente de regeneração (solução de NaOH).

Agradecimentos

Agradecimentos: Ao CNPq, à FUNCAP (BP3-0139-00257.01.00/18), UECE e à UVA.

¹Spangnol, C.; Rodrigues, F.H.A.; Pereira, A.G.B.; Farjado, A.R.; Rubira, A.F.; Muniz, E.C. *Carbohydrate Polymers*. **2012**, *87*, 2038.

²Wen-Bo, W.; Da-Jian, H.; Yu-Ru, K.; Ai-Qin, W. *Colloids and Surfaces B: Biointerfaces*, **2013**, *106*, 51.

Novel mixed transition metal oxide: $Ru_xW_yO_z$ - Synthesis and application

Caroline B. Aquino (PG),^{1,2} **Sergio H. Domingues (PQ)**^{1,2*}.

carolinebrambilla.aquino@gmail.com; shdomingues@makcenzie.br

¹MackGraphe - Graphene and Nanomaterials Research Center, Mackenzie Presbyterian University, São Paulo, Brazil;

²Engineering School, Mackenzie Presbyterian University, 01302-907 São Paulo, SP, Brazil.

Key Words: Mixed transition metal oxide, tungsten oxide, ruthenium oxide, energy storage devices.

Highlights

Novel mixed transition metal oxide $Ru_xW_yO_z$ with potential application in energy storage devices of high efficiency.

Abstract

Mixed transition metal oxides (MTMO) are extremely interesting materials, due the several possibilities of structures and properties. The structural configuration consists in oxides with two different cations as $A_xB_yO_z$ (where A and B are transition metals). The multiple cations valences and synergistic effect allows the increase of some properties like, high conductivity and electrochemical activity, which contribute for uncounted applications, mainly in energy storage devices.^[1] Between metal oxides, ruthenium oxide (RuO_2) has been used, owing excellent electrochemical properties, such as wide electrical potential range, high conductivity and specific capacitance.^[2] However RuO_2 shows many disadvantages, it is expensive and toxic, reducing severely its applicatio. An interesting alternative is focused on the combination of RuO_2 with other materials, like metals or oxides. This could decrease the amount of Ru in the oxide. In this way, we combined ruthenium with tungsten oxide (WO_3), through simple method, in order to obtain a novel MTMO. WO_3 is a low cost, abundant, environmentally friendly, and also shows some unique properties.^[3] The development of novel MTMO structure ($Ru_xW_yO_z$) was based on in the modified polyol method, using nonionic surfactant (triblock copolymer) and chloride salts of each metal as precursors. The nanomaterial obtained as characterized for spectroscopy and morphologic techniques, that ensure the successful of material synthesized, as shown in the **Figure 1**. Raman spectra showed the main bands of the material oxides (A), scanning electron microscopy (SEM) in (B) exhibit the morphology of unpublished nanomaterial and energy-dispersive X-ray spectroscopy (EDS) in (C) corroborate with A and B, proving the presence of two oxides in the structure. Preliminary studies also show promising application in energy storage devices.

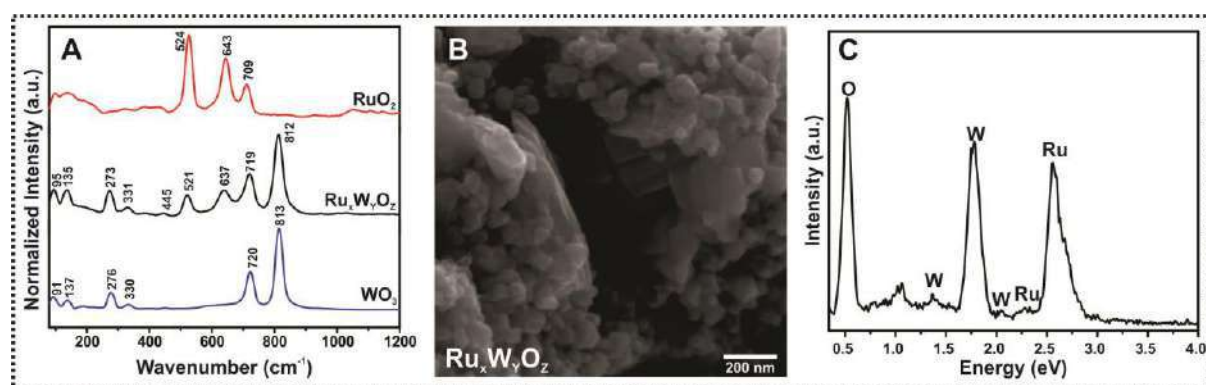


Figure 1. Raman spectrums of transition metal oxides and mixed metal oxide in (A), SEM image and EDS spectrum to $Ru_xW_yO_z$ sample in (B) and (C), respectively.

Acknowledge: Mackenzie Presbiterian Universisty (UPM), FAPESP (2018/02142-0 and 2017/21988-5), CNPq (403544/2016-5), Materials Chemistry Group (GQM – UFPR), LNNano and INCT of Carbon Nanomaterials. **References:** [1] C. Yuan, H.B. Wu, Y. Xie, X.W.D. Lou, *Angewandte Chemie International Edition*, 53 (2014) 1488-1504. [2] B. Fugare, B. Lokhande, *Materials Science in Semiconductor Processing*, 71 (2017) 121-127. [3] J. Chu, D. Lu, X. Wang, X. Wang, S. Xiong, *Journal of Alloys and Compounds*, 702 (2017) 568-572.

1,2,4-triazole as organocatalyst for organophosphates degradation: a kinetic and computational study.

Juliano M. Fernandes (IC),^{1*} Leociley R. A. Menezes (PG)² and Renan B. Campos (PQ)¹.

*jfernandes@alunos.utfpr.edu.br

¹Departamento Acad. de Química e Biologia, Universidade Tecnológica Federal do Paraná – UTFPR, Curitiba-PR;

²Departamento de Química, Universidade Federal do Paraná – UFPR, Curitiba-PR

Keywords: 1,2,4-triazole, nucleophilic organocatalysis, desphosphorylation reactions.

Highlights

- 1,2,4-triazole can act as strong N-nucleophile for degradation of organophosphates.
- Phosphorylated intermediate formed is easily hydrolyzed.
- Theoretical calculations suggest concerted mechanisms and the nitrogen atoms 1 and 2 as the main nucleophilic centers of 1,2,4-triazole.

Abstract

The search for improving degradation processes of organophosphorus compounds (OPs) has attracted attention due to, among other reasons, the growth of obsolete stocks of pesticides.^[1] In light of the proven efficiency of imidazole (IMZ) in promoting these reactions,^[2,3] the reactivity of its analog 1,2,4-triazole (TAZ) has been investigated. Indeed, kinetic studies performed in pseudo-first order conditions using activated triester diethyl-2,4-dinitrophenylphosphate (DEDNPP) and pesticide Paraoxon (Figure 1A) revealed that TAZ acts as strong and selective nucleophile in both neutral and anionic forms (the most reactive form). Rate enhancements up to 10^4 and 10^9 -fold compared to the spontaneous hydrolysis of the DEDNPP and Paraoxon, respectively, were observed (Figure 1A). TAZ showed higher reactivity than IMZ in pH 8.5-10 toward both OPs (up to 4000 times) due to some presence of anionic form of TAZ, which is accessed in milder alkaline solutions (pK_a (IMZ)=14.0; pK_a (TAZ)=10.3). Successive ³¹P NMR spectra acquired from the reaction medium revealed that the DEDNPP cleavage promoted by nucleophilic attack of TAZ occurs exclusively via phosphorus atom (Figure 1B), leading to the formation of INT1 (detected at -8.9 ppm), which is quickly hydrolyzed (authentic catalytic process). Theoretical calculations performed at M06-2X/6-311++G(d,p) level suggest concerted mechanism (Figure 1B) for the reaction of both neutral and anionic TAZ with DEDNPP. Calculated activation barriers also revealed nitrogen atoms 1 and 2 as the main nucleophilic centers for both forms of TAZ. Specifically for the neutral form, it was observed that 4H-TAZ tautomer is more reactive than the two others, showing activation barrier of 18.6 kcal mol⁻¹ — which is the closest to the experimental barrier of 20.6 kcal mol⁻¹. In short, it was evidenced the remarkable catalytic activity of TAZ in promoting degradation of two OPs, which may encourage studies focused on anchoring it in different scaffolds to obtain new macromolecular catalysts.

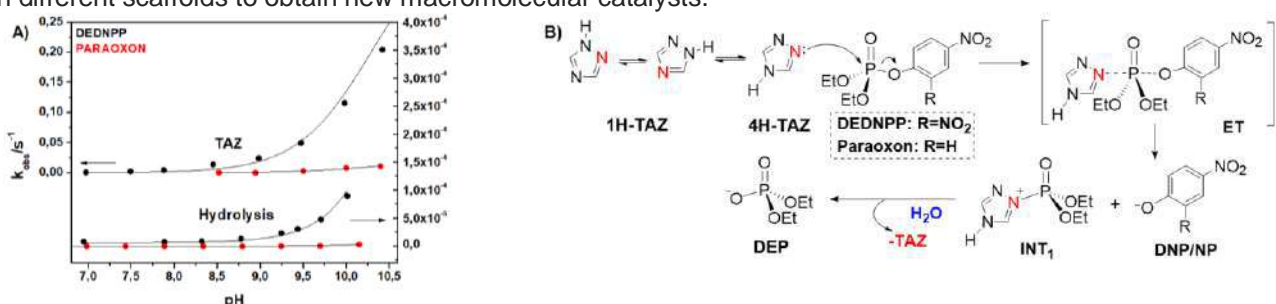


Figure 1. A) Kinetic pH profiles for the reactions (25 °C) of TAZ (0.5 mol L⁻¹) with DEDNPP and Paraoxon and the hydrolysis of OPs B) Proposed catalytic mechanism of DEDNPP and Paraoxon cleavage promoted by TAZ.

Acknowledgments

HPC – UTFPR, Fundação Araucária, CAPES, Grupo de Catálise e Cinética (GCC) and Tantillo Group.

References

1. Kim, K., et al. *Chem. Rev.*, (2011) 111, 9.
2. Orth, E. S., et al. *F. J. Org. Chem.*, (2011) 76, 19.
3. Campos, R. B., et al. *Chem. Eur. J.*, (2016) 22, 43.

Molecular Docking Applied to the Development of New *Leishmania* spp. Metalloprotease Inhibitors

Luan S. Amaro (IC),¹ Catarina N. Del Cistia (PQ),¹ Arthur E. Kümmerle (PQ),² Carlos Mauricio R. Sant'Anna (PQ).¹

santanna@ufrj.br

¹ Departamento de Química Fundamental, Instituto de Química, UFRRJ.

² Departamento de Química Orgânica, Instituto de Química, UFRRJ.

Keywords: *Molecular docking, metalloproteases, leishmaniasis.*

Highlights

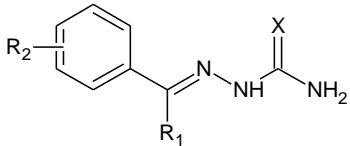
Metalloproteases are virulence factors in leishmaniasis. Molecular docking in a *Leishmania* metalloprotease identified carbazones and thiosemicarbazones as promising compounds to act as its inhibitors.

Abstract

Parasites of the genus *Leishmania* have developed sophisticated ways of subverting the innate immune response, allowing their infection and propagation in the macrophages of the mammalian host. Among the various *Leishmania* virulence factors identified and considered important for the development of leishmaniasis are zinc metalloproteases¹. Studies of our group have demonstrated the feasibility of using molecular modeling tools for the design of effective inhibitors of metalloproteinases with anti-hemorrhagic action in vitro and in vivo². The objective of the present work is to employ the same techniques to identify metalloprotease inhibitors as prototypes of new drugs for the treatment of leishmaniasis. The compounds tested were the same semicarbazones and thiosemicarbazones explored by our group in the previous work² which identified metalloprotease inhibitors and are presented in Table 1. Their structures were prepared and optimized with the semiempirical PM6 method available in Spartan'14 (Wavefunction). We used GOLD 5.6 (CCDC) for a molecular docking study with the only *Leishmania* metalloprotease available in the Protein Data Bank (1LML, 1.86 Å resolution)³. The analysis was done in

triplicate and the best docking results were obtained with the Chemscore fitness score function, presented in Table 1.

Table 1: Best fitness scores (Chemscore function)



| Comp. | X | R ₁ | R ₂ | Fitness score |
|-------|---|---|---------------------|---------------|
| 2a | S | H | H | 29,1 |
| 2b | S | H | 4-OMe | 27,4 |
| 2c | S | H | 4-Br | 29,5 |
| 2d | S | H | 4-Cl | 25,0 |
| 2e | S | H | 3-OH, 4-OMe | 26,1 |
| 3a | O | H | 4-OMe | 23,4 |
| 3b | O | H | 4-CO ₂ H | 24,5 |
| 3c | O | H | 4-Cl | 25,6 |
| 3d | O | H | 2,4-OMe | 25,6 |
| 3e | O | H | 4-OH | 23,3 |
| 3f | O | H | 3-OH, 4-OMe | 24,7 |
| 3g | O | H | 3-OH | 22,1 |
| 5a | S | (CH ₂) ₂ CO ₂ H | 4-OMe | 25,0 |
| 5b | S | (CH ₂) ₃ CO ₂ H | 4-OMe | 26,8 |

All docking solutions presented a coordination between the X atom (O or S) with the catalytic Zn atom of the active site, with the best docking results related to the thiosemicarbazones, in accordance with our previous results.² These structures will be explored for the design of structural modifications aiming the improvement of the interaction profile with the *Leishmania* metalloprotease.

Acknowledgments

CNPq, CAPES, INCT-Inofar, FAPERJ

¹ Isnard, A. et al., *Frontiers Cell. Infect. Microbiol.*, 2, 72 (2012).

² Ferreira, F. B. et al., *ACS Med. Chem. Lett.*, 8, 1136-1141 (2017).

³ Schlagenhauf, E. et al., *Structure* 6 1035-1046 (1998)..

Área: ORG

Nº de Inscrição: 49152

Synthesis and characterization of new 2,1,3-benzoxadiazole derivative.

Gustavo C. Costa (IC)¹, Suelen S. da Silva (TC)¹, Antonio Chepluki (IC)¹, Natalia Preve (IC)¹, Cassiano Tomasi (IC)¹, Fernando Pelisser (PQ)¹, Fábio Z. Galetto (PQ)¹, Claus Pich (PQ)¹, Sumbal Saba (PQ)¹, Jamal Rafique (PQ)², Hugo de Campos Braga (PQ)³, Fabricia Nunes (PG)⁴, André A. Vieira (PQ)⁴, Felipe Grillo (PQ)⁵, Tiago E. A. Frizon (PQ).^{1*}

cantarelli.sl98@gmail.com; tiagofrizon@gmail.com*

¹Federal University of Santa Catarina (UFSC); ²Federal University of Mato Grosso do Sul (UFMS); ³Federal University of São Paulo (UNIFESP); ⁴Federal University of Bahia (UFBA); ⁵Federal Institute of Espírito Santo (IFES).

Key words: Benzoxadiazole, OLEDs Highly Fluorescent.

Highlights

- Flat and conjugate molecular structure.
- Extended conjugation and highly fluorescent.
- Potential application in organic solar cells and OLEDs.

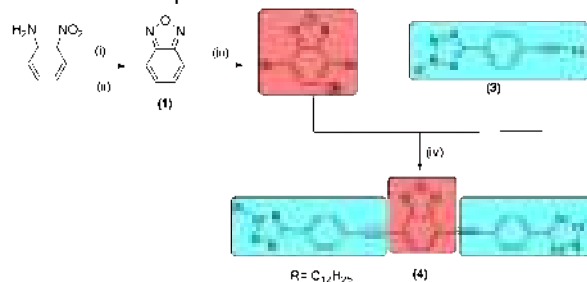
Introduction

Benzoxadiazole, also known as benzofuran, has a conjugated flat and bicyclic molecular structure. The compounds derived from this heterocyclic core have extended conjugation and are with highly fluorescent. Due to the presence of oxygen atom in the heterocycle, benzoxadiazole is more electronegative as compared to 2,1,3-benzothiadiazole and this electronegativity is responsible for forming coplanar and quinoid structures, giving better stability of the devices manufactured¹. The advantages in the production of devices containing benzoxadiazole derivatives are in the low cost, flexibility and improvement in the performance of electronic devices². Therefore, in this work we report the synthesis, and the characterization of a benzoxadiazole derivative, containing a terminal alkyl chain of 12 carbon atoms.

Results and Discussion

The synthesis of 2,1,3-benzoxadiazole is based on the cyclization of 2-nitroaniline with sodium hypochlorite, catalytic TBAB in basic medium followed by reduction of the *N*-oxide group using PPh₃ in xylene to result the heterocycle 2,1,3-benzoxadiazole (1) in 75% yield. In the next step, the selective bromination of 2,1,3-benzoxadiazole (1) at positions 4 and 7 was carried out to give 4,7-dibromo-2,1,3-benzoxadiazole (2) (Scheme 1). Subsequently, the Sonogashira's coupling reaction between the dibromide (2) and two equivalents of the terminal aryl acetylene (3), afforded the desired compound (4). After purification by column chromatography, the desired product was obtained in 88% yield. Figure 1 shows the ¹H NMR spectrum of the final product (4). The presence of three signals in the low field region can be observed, two doublets referring to the aromatic hydrogens of the side aromatics groups at 8.21 and 7.78 ppm and a singlet for the central aromatic hydrogens at 7.63 ppm. It is also observed, in the high field region, the presence of the signals referring to the hydrogens of the

side alkyl chains, thus confirming the synthesis of the desired final compound.



Scheme 1. Synthetic route used in the preparation of the final compound (4), where (i) TBAB, NaOH, NaClO, Ethyl Ether; (ii) PPh₃, Xylene; (iii) Br₂ / HBr; (iv) PdCl₂ (PPh₃)₂, CuI, triphenylphosphine (C₆H₅)₃P, Et₃N.

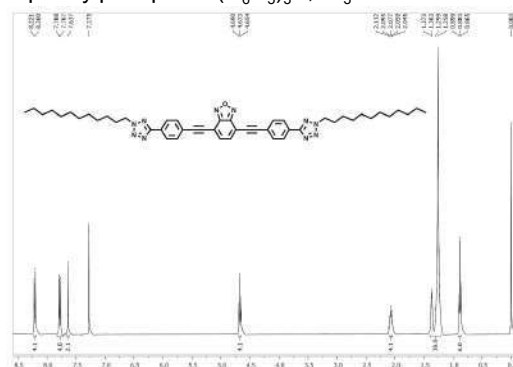


Figure 1. ¹H NMR spectrum of component (4) in CDCl₃ (400 MHz).

Conclusions

Herein, we report an efficient synthetic route to obtain the final compound (4), leading to desired compound in 88% yield. Analysis for thermal stability, photochemical evaluation and OLED prototype are being carried out.

Acknowledgments

UFSC, CNPq, LNLs and CEBIME.¹

¹ Liu, z., et al. *J. Mater. Chem. C*, vol. 3, p. 9145-9153. 2015.

² Regis, E., et al. *Dyes Pigm.*, vol. 157, p. 109-116. 2018.

Exploring the rumen fluid metabolome using Molecular network

Rafaela T. R. Almeida (PG),¹ Daniele M. Zanzarin (IC),¹ Rodolpho M. Prado (PQ)², Carla Porto(PQ)³, Geraldo T. dos Santos (PQ)², Sharon A. Huws (PQ)⁴, Eduardo J. Pilau (PQ)*.¹

ejpilau@uem.br, rafaela.takako@gmail.com

¹Departamento de Química, UEM; ²Departamento de Zootecnia, UEM; ³Master in Science, Technology and Food Safety and Cesumar Institute of Science, Technology and Innovation – ICETI - UNICESUMAR; ⁴Medical Biology Centre, Queen's University Belfast.

Palavras Chave: Rumen, Molecular network, Mass Spectrometry, Metabolomics.

Highlights

Rumen microbial secretome is key to improve feed efficiency and prospect novel biotechnological functionalities. We present the first study using Molecular Network approach to explore the rumen fluid metabolome.

Abstract

The rumen is a complex anaerobic environment enriched in microorganisms, which are responsible to degrade feed material. Exploring the rumen microbial secretome is essential to improve feed efficiency, decrease methane emission, prospect novel functionalities, such as novel enzymes and antimicrobials. The Molecular Networking (MN) tool based in mass spectrometry allows users to visually and structurally evaluate related metabolites with similar fragmentation patterns providing the possibility to interpret large metabolomics data sets and prospect metabolites. We identified some molecular features using the GNPS (Global Natural Products Social Molecular Networking) library (Figure 1). We identified the dicarboxylic acids: azelaic acid ($[M+H]^+$ m/z 189.112, decanedioic acid ($[M+H]^+$ m/z 203.127) and dodecanedioic acid ($[M+H]^+$ m/z 231.159), which are possibly derived from biohydrogenation of plant fatty acids. 3-indoleacetic acid ($[M+H]^+$ m/z 176.071), a product from the breakdown of tryptophan was also identified. Finally, monensin $[M+Na]^+$ at m/z 693.415, a feed additive commonly used to enhance animal feed use was observed. Its analogues, monensin B $[M+Na]^+$ at m/z 679.402 and monensin methyl ester $[M+Na]^+$ at m/z 707.433, were also observed.

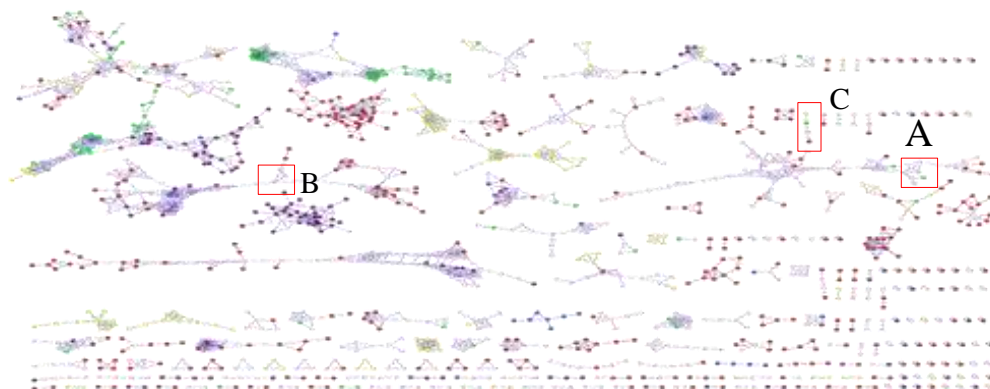


Figure 1: Molecular network. Cluster of molecular families (A) dicarboxylic acids, (B) 3-indoleacetic acid and (C) monensin family.

Rafaela Takako Ribeiro de Almeida, et al "Exploring the rumen fluid metabolome using liquid chromatography-high-resolution mass spectrometry and Molecular Networking, Scientific Reports, vol. 8, 17971 (2018).

Acknowledgments

This work was supported by the 'Complexo de Central de Apoio à Pesquisa (COMCAP)' from the Universidade Estadual de Maringá. This project had the support of the grants 401590/2014-3-CNPq, 168384/2017-5-CNPq, 155675/2016-8, 0673/13-CT-Infra-FINEP and CAPES.

Chemical characterization by LC-MS/MS and antimicrobial activity on crude extracts of *Humiria balsamifera* (Aubl)

Edelson de J.S. Dias* (PG),¹ Antônio J.C. Filho (PQ),¹ Fernando J.C. Carneiro (PQ),¹ Cláudia Quintino da Rocha (PQ),¹ Luís Cláudio Nascimento da Silva (PQ),¹ Juliane Cutrim Marques (IC)¹

prof.antoniofilho@ifma.edu.br; edelson.sa@acad.ifma.edu.br

¹Chemical department, IFMA

Key words: (*Humiria*; *Mirim*; *Characterization*; *Antimicrobial*; *Microrganisms*).

Highlights

Identification of substances in crude extracts of *H. balsamifera* (Aubl) by Liquid Chromatography coupled to a Mass Spectrometer and antimicrobial test against antibiotic resistant bacteria.

Resumo/Abstract

Humiria balsamifera (Aubl), popularly known as "mirim" is a tree of the family *Humiriaceae*, widely distributed in the Amazon basin. In Maranhão State, it is very abundant on Baixo Munim region, mainly in the municipality of Morros where it was collected. The collected leaves and bark samples were ground and cold extracted with organic solvents following an order of polarity (hexane, ethyl acetate and methanol) for obtain the crude extracts. Characterization of the ethyl acetate and methanol extracts of bark and leaves of *H. balsamifera* was done by LC-MS/S providing the identification of 11 substances of which 10 were first identified for this species with the exception of bergenin, which had already been isolated from *H. balsamifera*. bergenin is the major compound in the plant, was identified in all extracts. Crude extracts from *H. balsamifera* leaves were tested against antimicrobial resistant strains (*Staphylococcus aureus*, *Pseudomonas aeruginosa*, *Listeria monocytogenes*, *Salmonella enterica* and *Escherichia coli*) to evaluate the Minimum Inhibitory Concentration (MIC). The AcOEt and MeOH extracts were effective against *Staphylococcus aureus* inhibiting the same with a concentration of 0.78 mg/mL.

| Serial dilution of extracts | | | | | | | | | | |
|--|-------------------------------|------------------------------|----------------------------|---------------------------------|------|------|------|------|------|------|
| Column | 2 | 3 | 4 | 5 | 6 | 7 | 8 | 9 | 10 | 11 |
| Con. mg/mL | 6.25 | 3.12 | 1.56 | 0.78 | 0.39 | 0.19 | 0.09 | 0.04 | 0.02 | 0.01 |
| Minimum Inhibitory Concentration (mg/mL) | | | | | | | | | | |
| | <i>S. aureus</i> ATCC 6538 | <i>E. coli</i> ATCC 25922 | <i>S. enterica</i> ATCC | <i>L. monocytogenes</i> ATCC | | | | | | |
| Extract Hex | 1.56 | >6.25 | >6.25 | >6.25 | | | | | | |
| Extract AcOEt | 0.78 | >6.25 | >6.25 | 3.12 | | | | | | |
| Extract MeOH | 0.78 | >6.25 | 6.25 | 3.12 | | | | | | |

Some molecules identified by LC-MS/MS:

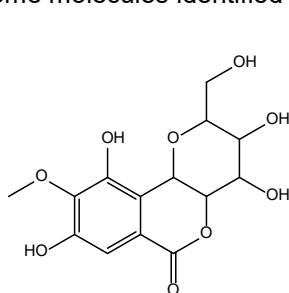


Figura 1: Bergenin

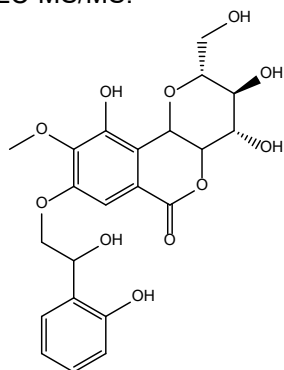


Figura 2: Hidroxi-benzoyl-bergenin

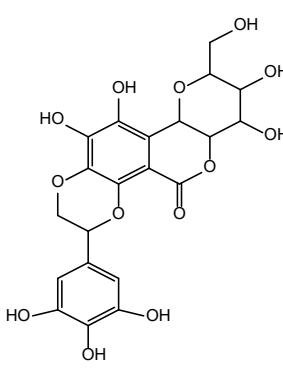


Figure 3: Galloyl-bergenin

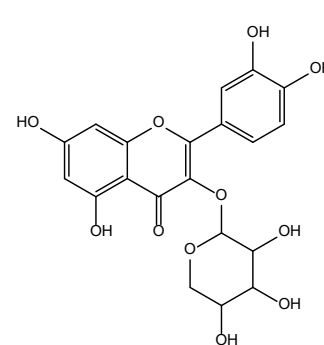


Figure 4: Quercetin-3-arabinoside

Área: ANANº de Inscrição: 00889

Avaliação dos métodos químico e eletrolítico de remoção de cobre no preparo de amostras de bijuterias para determinação de cádmio

Larissa N. Dina (IC),¹ Valéria A. Alves (PQ),¹ Luís A. da Silva (PQ).^{1*}

lari.dina@yahoo.com.br; luis.silva@uftm.edu.br

¹Departamento de Química, UFTM

Palavras Chave: Metais pesados, Cádmio, Potenciometria, Adição de padrão, Teste F, Teste t.

Highlights

Evaluation of the chemical and electrolytic methods of copper removal in preparation of samples of low cost jewelry for cadmium determination

Quantification of Cd was done by potentiometry; Cu was removed so as not to interfere with the measurements. The Cd content of the samples was well above 0.01%, allowed by the Brazilian legislation.

Resumo/Abstract

O cádmio apresenta alta toxicidade aos organismos vivos e ao meio ambiente. Determinou-se a concentração de cádmio em duas amostras de bijuterias (09-00 e 12-00) por meio da potenciometria e eletrodo seletivo a cádmio, utilizando-se o método da adição de padrão. Ensaios qualitativos evidenciaram a presença de cádmio nas amostras e que o íon cobre (Cu^{2+}) é um potencial interferente¹. Além disso, o fabricante do eletrodo informou sobre essa interferência. Portanto, a sua remoção prévia das amostras é necessária, por eletrólise ou por reação química¹. Avaliou-se neste trabalho se os referidos métodos de remoção de cobre das amostras produzem resultados semelhantes quanto à determinação de cádmio. Todas as medidas foram feitas em triplicata. A curva analítica apresentou uma excelente linearidade ($r = 0,99654$), e resultou numa equação de reta coerente com a equação de Nernst. O Quadro 1 mostra as concentrações de Cd^{2+} (%m/m) das amostras 09-00 e 12-00. Para comparação dos dois métodos de remoção de cobre nas análises das amostras, foram aplicados testes estatísticos². O teste F verificou a homogeneidade das variâncias (s^2) e o teste t verificou se as diferenças das médias das %Cd são decorrentes de variações aleatórias, ao nível de confiança de 95% (Quadro 1). A partir dos testes estatísticos concluiu-se que os dois métodos de remoção de Cu^{2+} não geraram diferenças significantes nos resultados e que ambos podem ser utilizados para remoção de Cu^{2+} , antes da determinação de cádmio nas amostras.

Quadro 1. Teste F entre as variâncias (s^2) e teste t entre as médias da %Cd (m/m) aplicados na comparação dos resultados referentes à determinação da % de cádmio nas amostras de bijuterias analisadas utilizando-se duas metodologias diferentes de remoção do cobre (interferente).

| Variável estatística ² | Amostra 09-00 | | Amostra 12-00 | |
|--|----------------------------|------------------|----------------------------|------------------|
| | Método de remoção de cobre | | Método de remoção de cobre | |
| | Eletrolítico | Químico | Eletrolítico | Químico |
| Média da %Cd (m/m) | 25,11 | 21,38 | 28,84 | 21,36 |
| s^2 (variância) | 3,64 | 3,77 | 4,53 | 2,33 |
| Mínimo | 22,26 | 17,10 | 26,08 | 18,67 |
| Máximo | 29,22 | 24,21 | 34,07 | 22,82 |
| IC para μ | 25,11 \pm 9,06 | 21,38 \pm 9,37 | 28,84 \pm 11,25 | 21,36 \pm 5,79 |
| $F_{\text{calculado}} < F_{\text{crítico}}$ | 1,07 < 19,00 | | 3,78 < 19,00 | |
| $F_{\text{calculado}} < F_{\text{crítico}}$: não houve diferença significativa na homogeneidade de s^2 entre os métodos (ao nível de confiança de 95%). As precisões estimadas para os métodos não diferiram estatisticamente entre si. | | | | |
| $t_{\text{calculado}} < t_{\text{crítico}}$ | -6,660 < 4,303 | | 3,339 < 4,303 | |
| $t_{\text{calculado}} < t_{\text{crítico}}$: as diferenças nas médias da %Cd (m/m), obtidas pelos métodos são decorrentes de variações aleatórias (ao nível de confiança de 95%). | | | | |

1 – PAIS, A. R. *et al.* **Quím. Nova**, v. 41, n. 10, p. 1218-1225, 2018.

2 – SKOOG, D. A. *et al.* **Fundamentos de Química Analítica**, 9ª ed., Cengage Learning: São Paulo, 2014.

Agradecimentos/Acknowledgments

À FAPEMIG, pelo apoio financeiro (Processo CEX-APQ-00585-11), bolsa de IC de L. N. D. - BIC/FAPEMIG e à Rede Mineira de Química, (RQ-MG), apoiado pela FAPEMIG (Processos: REDE-113/10; CEX-RED-00010-14).

42ª Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química: Eixos Mobilizadores em Química

Área: COL

(Inserir a sigla da seção científica para qual o resumo será submetido. Ex: ORG, BEA, CAT)

Nº de Inscrição: 00890

(Inserir o número de inscrição do autor que fez a submissão)

Kinetic sorption of bovine serum albumin onto chemically modified chitosan.

Fernanda S.C. dos Anjos (PQ),^{1*} Antonio Reinaldo Cestari (PQ)².

fernanda.anjos@univasf.edu.br

¹Colegiado de Engenharia de Produção, UNIVASF and Pós-graduação em Ciência e Engenharia de Materiais, UFS;

²Departamento de Química, Pós-graduação em Ciência e Engenharia de Materiais, UFS.

Keywords: Chitosan. Kinetic Model. Proteins.

Highlights

Membrane chitosans were crosslinked with citrate, TPP and APTES. Such materials are promising for using in proteins sorption.

Resumo/Abstract

Chitosans have interesting features, such as biocompatibility, biodegradability, good adherence and cellular affinity. The presence of amine (-NH₂) and hydroxyl groups (-OH) on chitosan structure enables their chemical modification using citrates, polyphosphates, organosilanes, among others. In the work, membrane chitosans were chemically crosslinked with citrates, tripolyphosphate and 3-amino-propiltrimetoxisilano were synthesized for application in sorption of proteins. By FTIR it was possible to observe the functional groups of citrates, tripolyphosphate and APTES, indicating the chemical modification of the chitosan membrane (Figure 01). Some mathematical models were used to evaluate the kinetic features of sorption of BSA onto the materials. Pseudo-first order, Pseudo-second order and order-variable (1) models were applied to investigate the adsorption kinetic of BSA on the chitosan membranes using the following equation [1]:

$$\ln \left(\ln \left(\frac{q_e}{q_e - q_t} \right) \right) = n \ln k_n + n \ln t \quad (1)$$

From a statistical analysis using standard deviation and chi-square methodologies, the so-called kinetic order-variable model has presented the best fittings in relation to comparisons between the experimental and theoretical values of BSA sorption. The values of the variable order sorption constants (k_n) were between 0.0002 and 264.91 min⁻¹ and the values of the n constants were between 0.142 and 1.492 min⁻¹. The Morris-Weber kinetic model has also suggested that intraparticle diffusion is an important mechanistic feature of BSA-membranes interactions. It has found that the membranous chitosan-modified materials are promising for using in processes, which demand interaction of proteins in aqueous media.

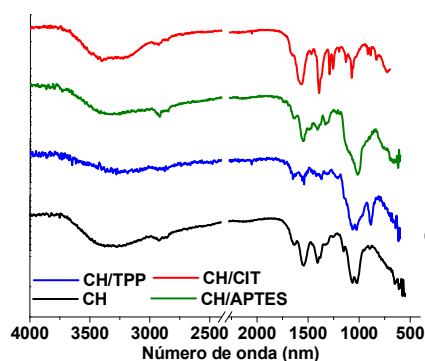


Figure 01: FTIR spectra of membrane chitosans were chemically crosslinked with citrate, tripolyphosphate and 3-aminopropiltrimetoxisilano

1. Yang, J. M., et al, Colloids Surfaces B Biointerfaces, v. 142, p. 98, 2016.

Área: MED

Nº de Inscrição: 00891

Novel glycosylated 1*H*-1,2,3-triazol α -glycosidase inhibitors with pharmacological potential as oral anti-hyperglycemic drugs

Rafael F. Dantas^{1*} (PQ), João M. Rezende-Neto¹ (TC), Thamiris Letícia C. de Aguiar (IC), Tereza Cristina S. Evangelista² (PG), Márcio Roberto H. Donza² (PG), Mario R. Senger¹ (PQ), Sabrina B. Ferreira² (PQ), Carlos R. Kaiser² (PQ), Floriano P. Silva Jr¹ (PQ).

email: rafael.dantas@ioc.fiocruz.br

¹Laboratory of Experimental and Computational Biochemistry of Drugs, Oswaldo Cruz Institute, Oswaldo Cruz Foundation, RJ, Brazil. ²Laboratory of Organic Synthesis and Biological Prospecting, Chemistry Institute, Federal University of Rio de Janeiro, RJ, Brazil.

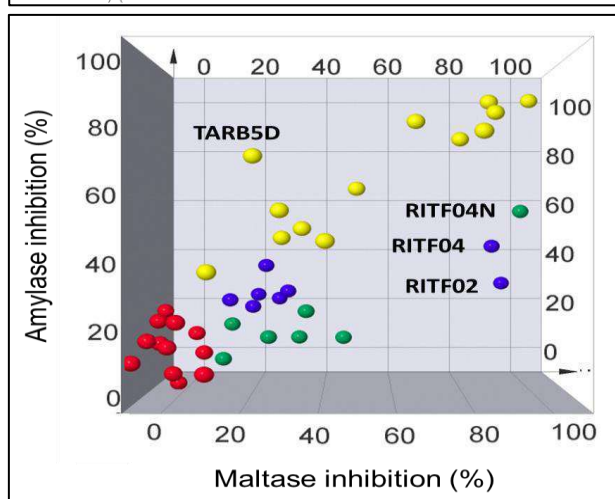
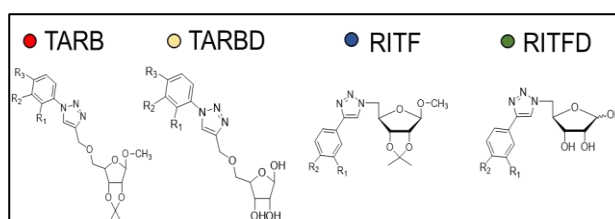
Keywords: Triazole, Click chemistry, Glycosidase inhibitors, Oral anti-hyperglycemic drugs, Type 2 diabetes.

Highlights

Two novel series of glycosylated 1*H*-1,2,3-triazoles were synthesized and screened at 100 μ M against porcine α -amylase and yeast maltase activities, presenting significant inhibitory activity.

Abstract

Oral anti-hyperglycemic drugs (OHD) are intestinal glycosidase inhibitors used to treat type 2 diabetes mellitus (DM2). Acarbose (GlucobayTM) is one of the OHD administered in clinics, but it has several adverse effects and its production is complex and costly. These limitations have driven the search for new drugs. In previous reports, our group reported different series of 1*H*-1,2,3-triazoles with *in vitro* glycosidase inhibitory activity and *in vivo* anti-hyperglycemic effect. In this work, we synthesized two novel series of glycosylated triazoles with unprotected (TARB and RITF) and protected carbohydrates (TARB and RITF) and screened them at 100 μ M against porcine α -amylase and yeast maltase activities, both models for human targets of OHD. The two libraries were synthesized by the copper-catalyzed 1,3-dipolar cycloaddition reaction. In the first one (RITF and RITFD), triazoles were obtained from azido derivative of D-ribose and different commercial alkynes derived from phenyl acetylene. The second library (TARB and TARB), was obtained from different aromatic azides as substrates for the reactions with the alkyne derivative of D-ribose. TARB series (yellow) showed the most active compounds for both enzymes. In contrast, all compounds from TARB series (red) were weak glycosidase inhibitors, as well as most of those from RITF (blue) and RITFD (green) series. RITF (2 and 4) and RITF04N presented selectivity towards maltase rather than α -amylase activity while TARB compounds presented a slight preference for inhibiting α -amylase, specially TARB5D. These results suggest that carbohydrate protection has a significant negative impact in the glycosidase inhibitory activity of TARB series. In RITFD and RITF series, the differences in enzymatic activity are more related to the type of substitution in the aromatic ring. Next, we will calculate the potency of the most active compounds and perform structure-activity studies.



Acknowledgments

CNPq, FAPERJ, FIOCRUZ, UFRJ

Synthesis and Characterization of a New Lanthanum Complex as a Catalyst in the Hydrolysis of Phosphate Ester Bonds

Carlos Alexandre Lucecki (PG),^{1*} Ademir Neves (PQ).¹

carlos_alexandrelucecki@hotmail.com

¹Departamento de Química, Universidade Federal de Santa Catarina (UFSC) – Laboratório de Química Bioinorgânica e Cristalografia (LABINC)

Keywords: Lanthanum Complex, Catalyst, Hydrolysis, Phosphate Ester Bonds.

Highlights

- A new lanthanum (III) complex was synthesized using a novel ligand named (H_2L^2) and subsequently characterized.
- The complex shows an efficient catalysis in the hydrolysis of 2,4-bis(dinitrophenyl)phosphate.

Abstract

The study of bioinorganic chemistry has been growing around the world and an interesting area of research are compounds capable of cleaving efficiently phosphodiester bonds. In this context, lanthanide ions have proven to be effective in this role, increasing the hydrolysis rate by several orders¹. This work shows the synthesis of a new lanthanum (III) complex using a novel ligand named ($H_2L^2 = 2-((bis(pyridin-2-ylmethyl)amino)methyl)-6-(((2-hydroxy-5-methyl-3-(((3-(methylamino)propyl)amino)methyl)benzyl)(pyridin-2-ylmethyl)amino)methyl)-4-methylphenol$). The complex was synthesized in methanolic solution by mixing $La(NO_3)_3 \cdot 6H_2O$ and the ligand H_2L^2 (1:1 stoichiometry) with stirring and heating (40 °C) for 45 min. After evaporation of the solvent, the solid obtained was recrystallized through the slow diffusion between hexane and acetonitrile, the crystals were obtained and submitted to X-ray analysis and were also characterized by FTIR, ¹H NMR, ESI-MS and UV-vis (figure 1). The complex shows an efficient catalysis in the hydrolysis of 2,4-bis(dinitrophenyl)phosphate and some tests are underway as pH effects and substrate concentration, where the analysis is performed by UV-Vis spectrophotometry observing the release of 2,4-dinitrophenolate a by-product of the hydrolysis containing a characteristic absorption band at (400nm).

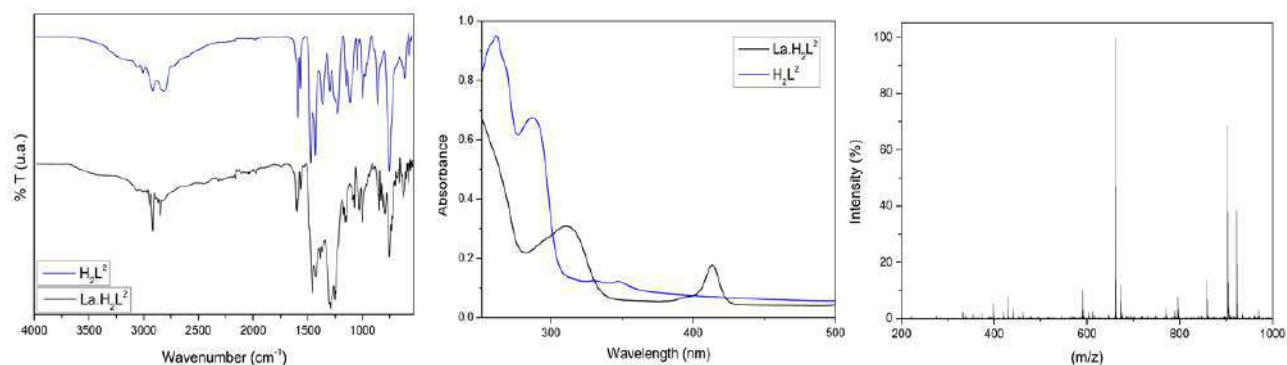


Figure 1. FTIR, UV-vis and ESI-MS analysis for lanthanum (III) complex.

Acknowledgments

The authors thanks CNPq, CAPES, FAPESC and INCT-Catálise for funding.

References

- (1) Camargo, M. A.; Neves, A.; Bortoluzzi, A. J.; Szpoganicz, B.; Martendal, A.; Murgu, M.; Fischer, F. L.; Terenzi, H.; Severino, P. C. New Gadolinium Complex with Efficient Hydrolase-like Activity: A 100-Million-Fold Rate Enhancement in Diester Hydrolysis. *Inorg. Chem.* **2008**, *47* (8), 2919–2921.

Área: EDU

Nº de Inscrição: 00895

Formação docente inicial para o ensino de química direcionando o estudo do projeto político pedagógico.

James M. Silva (IC),¹ **Reinaldo Ferreira (FM)**,³ **Maria Fernanda C. Gurgel (PQ)**².

James.silva19@gmail.com; mfcgurgel.ufg@hotmail.com

¹Departamento de Química, UFG.

² Instituto de Educação Matilde Margon Vaz, Rua 21 N°135, Setor Universitário, Catalão-Goiás.

Palavras Chave: Estágio em química, Prática docente inicial, Projeto Político pedagógico.

Highlights

Study of the political pedagogical project for undergraduate students.

Study of the project I politicize pedagogic for graduation pupils; Projection and organization of scientific inquiry, supervised internship, initial teacher training.

Resumo/Abstract

O Projeto Político Pedagógico (PPP) é um documento único desenvolvido de acordo com a realidade de cada instituição de ensino, regido pela LDB 9.394/96, em que é exposto propostas e metas educacionais a serem atingidas.¹Visando a importância da elaboração deste documento realizou-se um estudo do PPP de cinco escolas públicas na cidade de Catalão-GO, logo após elaborou-se um seminário apresentado para os alunos de estágio supervisionado 1 do ensino de química, disciplina responsável para a formação e aproximação dos alunos a realidade da escola como um todo, em seguida aplicou-se um questionário para avaliar a compreensão dos alunos sobre a importância da elaboração de um documento teórico prático que é de grande importância para os futuros profissionais da educação, uma vez que este documento deve ser atualizado constantemente, o contato do estagiário com o este documento fortalece o vínculo e o comprometimento com os métodos estabelecidos para a elaboração do PPP.²

Referências:

[1]-VEIGA, Ilma P.A. e CARVALHO. Projeto político-pedagógico da escola: uma construção coletiva. In: VEIGA, Ilma Passos da (org.). Projeto político-pedagógico da escola: uma construção possível. Campinas: Papirus, 1998. P.11-354.

[2]- GUEDES, Josenilson Viana; SILVA, Angela Maria Ferreira da; GARCIA, Luciane Terra dos Santos. Projeto político-pedagógico na perspectiva da educação em direitos humanos: um ensaio teórico. Rev. Bras. Estud. Pedagog., Brasília, v. 98, n. 250, p. 580-595, Dec. 2017. Available from <http://www.scielo.br/scielo.php?script=sci_arttext&pid=S2176-66812017000300580&lng=en&nrm=iso>. access on 18 Mar. 2019. <http://dx.doi.org/10.24109/2176-6681.rbep.98i250.2991>.

Agradecimentos/Acknowledgments

Ao programa de estágio do curso de Química grau licenciatura UFG regional catalão, ao Instituto de Educação Matilde Margon Vaz e em especial a minha orientadora Maria Fernanda do Carmo Gurgel.

Experimentação no ensino de células galvânicas para o ensino médio

Luís A. da Silva (PQ),¹ Bruno P. Diniz (PG),¹ Alice S. Alves(IC),¹ Leandro C. Lemes (PQ),² Valéria A. Alves (PQ),^{1,*}

luis.silva@uftm.edu.br; valeria.alves@uftm.edu.br

¹Departamento de Química, UFTM; ²Cursos de Engenharia, UFTM.

Palavras Chave: *Jigsaw*, Experimentação, Ensino de células galvânicas.

Highlights

Experimentation in the teaching of galvanic cells for high school.

This work presents experimental *kits*, for teaching galvanic cells, constructed with commercial and alternative batteries, which can be reproduced by Basic Education teachers along with their students.

Resumo/Abstract

A dificuldade apresentada pelos estudantes do Ensino Médio com o tema Eletroquímica fundamentou o desenvolvimento de *kits* experimentais para auxiliar no ensino de conceitos de células galvânicas, pilhas e baterias, e associações em série e/ou em paralelo (Figura 1). Foram utilizados os *kits* experimentais, A, B e C, confeccionados a partir de materiais de baixo custo e fácil acesso, que exploraram diferentes associações de pilhas comerciais e células galvânicas, visando ensinar conceitos de Eletroquímica, por meio da aprendizagem cooperativa utilizando o método *jigsaw*¹. Os alunos foram divididos em seis grupos de especialistas (GE). Foram distribuídos seis *kits* experimentais, relativos a três subtópicos de Eletroquímica: entendendo o funcionamento das pilhas comerciais, entendendo o funcionamento das células galvânicas, verificando a ocorrência das reações de oxidorredução. Cada subtópico foi trabalhado por dois GEs. Após isso, os GEs se separaram e foram formados seis grupos de base (GB), cada um contendo pelo menos um especialista de cada subtópico; cada GB consolidou a aprendizagem de todos os três subtópicos. Foi realizado um diagnóstico de como os alunos avaliaram a atividade didática proposta e verificado se a proposta contribuiu para auxiliar a aprendizagem dos estudantes. As respostas dos grupos, com relação aos trabalhos com os *kits* experimentais, foram classificadas em três níveis: “Incorpora”, “Tangencia” ou “Distancia”. A proposta didática, além de motivadora, auxiliou a aprendizagem dos estudantes, proporcionando bons resultados, que consolidam a utilização do método *jigsaw*, associado a atividades experimentais, no ensino de células galvânicas.

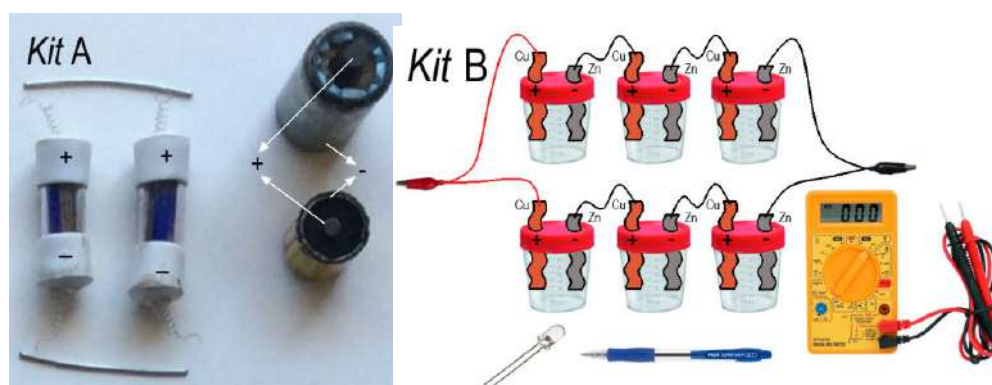


Figura 1 - Esquema mostrando a configuração dos kits A e B.

1. FATARELI, E. F., FERREIRA, L. N. A., FERREIRA, J. Q. e QUEIROZ, S. L. Método Cooperativo de Aprendizagem *Jigsaw* no Ensino de Cinética Química. **Química Nova na Escola**, n. 32, p.161-168, 2010.

Agradecimentos: O presente trabalho foi realizado com apoio da Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior - Brasil (CAPES) - Código de Financiamento 001 (Portaria nº 206 da CAPES, de 04/09/2018). À Rede Mineira de Química, (RQ-MG), pelo apoio concedido.

Área: ANA

Nº de Inscrição: 00899

Determinação de Ca, Fe, Na, Ni, V e Zn em amostras de óleo combustível industrial e marítimo na forma de emulsão empregando ICP OES

Bruno S. Carvalho (TC)^{1,2}, Letícia M. Costa (PQ)¹

lemalta41@gmail.com

¹Laboratório de Espectrometria Atômica e Química Analítica e Ambiental - LEAQUAA, Departamento de Química, Instituto de Ciências Exatas, Universidade Federal de Minas Gerais; ²Laboratório de Controle de Qualidade da Refinaria Gabriel Passos, Petróleo Brasileiro S.A.

Palavras Chave: emulsão, óleo combustível, *planejamento composto central*, ICP OES.

Highlights

Determination of Ca, Fe, Na, Ni and Zn in marine and industrial combustion oils after emulsion procedure by ICP OES

- Water-oil emulsion procedure was successful applied for marine and industrial oil samples;
- Validation presents good figures of merits;
- Water-oil emulsion procedure was simple, fast and accurate for quantification by ICP OES.

Resumo

O óleo combustível industrial é um produto utilizado para geração de energia térmica, composto basicamente por uma mistura complexa de correntes oriundas do processamento do petróleo e cuja base é o resíduo da destilação a vácuo (RV). Os combustíveis marítimos são produzidos a partir de formulações contendo principalmente frações pesadas da destilação (resíduos) e outros óleos diluentes [1]. Neste trabalho foi desenvolvido um método analítico para determinação de Ca, Fe, Na, Ni, V e Zn por espectrometria de emissão óptica com plasma indutivamente acoplado (ICP OES) com visão radial em amostras de óleo combustível industrial e marítimo na forma de emulsão água-óleo. O preparo das soluções emulsionadas foi otimizado aplicando-se planejamento composto central e as condições ótimas experimentais foram: 10% (m/m) de amostra, 10% (m/m) de Triton X-100®, 1,5 mL de tolueno e solução 5% (v/v) de água em n-butanol até a massa de 10 gramas de solução final. O procedimento proposto foi comparado com metodologia ASTM D-5708, empregando-se padrões organometálicos Conostan [2]. Para o procedimento proposto, padrões inorgânicos em meio aquoso e ítrio como padrão interno foram utilizados para minimizar os efeitos de viscosidade e tensão superficial. As soluções emulsionadas apresentaram boa estabilidade de formação, sendo facilmente retomadas a partir de agitação manual, com boa estabilidade dos analitos durante o intervalo de tempo analisado, proporcionando um adequado preparo de amostra condizente com trabalhos de rotina. O método apresentou boa sensibilidade, linearidade (avaliada após a verificação de *outliers* pelo teste de Grubbs e de homocedasticidade pelo teste de Cochran), precisão e exatidão (estabelecida pelo teste estatístico para *t*-pareado utilizando amostras de rotina e material de referência). A utilização de emulsões com a técnica de ICP OES foi uma boa estratégia para minimizar o tempo de análise, atentando para maior simplicidade, baixo custo operacional e menor geração de resíduos.

[1] Guia de informações técnicas da Petrobrás, 2013

[2] Norma ASTM D-5708, 2015, "Standard Test Methods for Determination of Nickel, Vanadium, and Iron in Crude Oils and Residual Fuels by Inductively Coupled Plasma (ICP) Atomic Emission Spectrometry"

Agradecimentos

DQ-UFMG, PPGQ-UFMG, CNPq, FAPEMIG, REGAP/CQ

Synthesis of naphthyridines with potential tubulin inhibitory activity

Beatriz M. Donolato (IC), Sâmia R. Lima (PG), Fernando A. S. Coelho* (PQ).

biadonolato@gmail.com; coelho@iqm.unicamp.br

Instituto de Química – UNICAMP – Departamento de Química Orgânica

Key words: Morita-Baylis-Hillman, Tetrahydro-1,8-naphthyridines, Antitumor.

Highlights

This project intends to synthesize a small set of tetrahydro-1,8-naphthyridines to explore their potentiality as antitumor agents, using Morita-Baylis-Hillman adducts as building blocks.

Abstract

Tubulin is an important target for the combat against cancer. The inhibition of the polymerization-depolymerization dynamics of this enzyme compromise directly the cellular division, preventing the cancer cell replication.¹

Recently, our research group has demonstrated, by *molecular docking* studies that a set of tetrahydronaphthirines binded efficiently on the tubulin active site, thus preventing cellular division. *In vitro* essays demonstrated that naphthirine **1** shows a inhibition profile quite similar to that of Colchicine, a known anti-mitotic agent.²

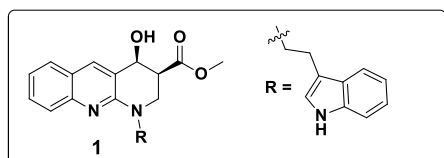
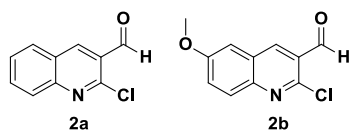


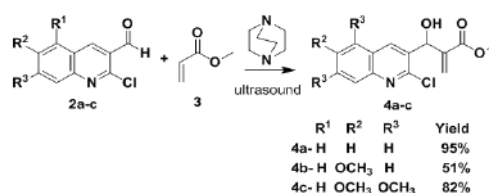
Figure 1. Tetrahydro-1,8-naphthirine derivative

Due to the potentiality of these naphthirines and antitumor agents, we proposed the diastereoselective synthesis of a new collection of tetrahydro-1,8-naphthirine, which will be evaluated *in vitro* against some cancer cells strains. We also intend to solve some issues found in our previously described the synthetic approach.

Initially, aldehydes **2a** and **2b** were prepared using a Vilsmeier-Haack formylation reaction.³

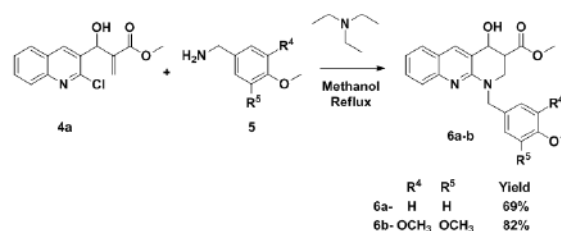


Aldehydes **2a** and **2b** created with methyl acrylate (**3**) in the presence of DABCO and ultrasound radiation to give Morita-Baylis-Hillman (MBH) adducts (**4**), in moderate to good yields (Scheme 1).⁴



Scheme 1. Synthesis of MBH adducts **4**.

After that, adduct **4a** was treated with amines **5a** and **5b** to furnish tetrahydronaphthirines **6a** and **6b** in only one step. A Michael addition reaction followed by an intermolecular S_NAr reaction explain the formation of these heterocycles, which were obtained in good yield and moderate diastereoselective ratio (2:1, Scheme 2).



Scheme 2. Synthesis of tetrahydro-1,8-naphthirines.

The diastereoisomers were separated by HPLC. Attempts to improve the diastereoselectivity of this approach are on going. To accomplish that, we intend to protect the secondary hydroxyl with voluminous protecting groups. The oxidation of the secondary hydroxyl groups followed by the asymmetric reduction of the new carbonyl group are on going in order to get the enantio enriched compounds after chiral chromatographic separation.

References

- Jordan, M. A.; Wilson, L. *Nat. Rev. Cancer.* **2004**, 4, 253.
- Santos, M. S. *et al. J. Org. Chem.* **2016**, 81, 6626.
- Srivastava, A.; Singh, R. M. *Indian Journal of Chemistry*, **2005**, 44B, 1868.
- Coelho, F. *et al. Tetrahedron.* **2002**, 58, 7437.

Acknowledgments

We thank Fapesp for financial support and Unicamp for their search infrastructure.

Avaliação da atividade anti-helmíntica *in vitro* e *in vivo* de ácidos diterpênicos isolados de *Baccharis sphenophylla* (Asteraceae)

Deborah P. Sessa (PG),^{1*} Simone S. Grecco (PQ),² Vinícius C. Rodrigues (IC),³ Josué de Moraes (PQ),³ João Henrique G. Lago (PQ).¹

deborah_sessa@hotmail.com

¹Centro de Ciências Naturais e Humanas (CCNH), Universidade Federal do ABC; ²Laboratório de Biologia Química, Universidade Anhanguera de São Paulo; ³Núcleo de Pesquisa em Doenças Negligenciadas (NPDN), Universidade de Guarulhos.

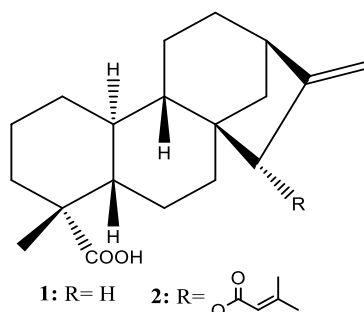
Palavras Chave: Asteraceae, *Baccharis sphenophylla*, ácido senecioloxil-ent-caurenóico, *Schistosoma mansoni*

Highlights

Evaluation of *in vitro* and *in vivo* anthelmintic activity of diterpenes acids isolated from *Baccharis sphenophylla* (Asteraceae). In this work was evaluated the anthelmintic activity (against *Schistosoma mansoni* adult worms) of hexane extract from leaves of *B. sphenophylla*. As this material displayed activity, it was subjected to a bioactivity-guided fractionation to afford two diterpenes: *ent*-caurenóico (**1**) and 15 α -senecioloxil-*ent*-caurenóico (**2**) acids. Compounds **1** and **2** displayed *in vitro* schistosomicidal activity with LC₅₀ = 26.0 and 11.6 μ M, respectively. In *in vivo* assay, the oral treatment with compound **2** at a single dose (400 mg/kg) in mice harboring a chronic *S. mansoni* infection significantly reduced worm burden, egg production, and hepato and splenomegaly.

Resumo

Com cerca de 400 espécies, distribuídas em todo o mundo, o gênero *Baccharis* tem apenas 20% de suas espécies estudadas química ou biologicamente. Dentre os metabolitos descritos para esse gênero, destacam-se diterpenos e flavonoides.¹ Estudos anteriores com *B. sphenophylla* descrevem a composição química do óleo essencial bem como avaliação *in vitro* das atividades antimalárica e anti-*T. brucei*.² No entanto, estudos sobre a composição química e avaliação do potencial farmacológico dos constituintes fixos são ainda desconhecidos. Inserido em um estudo que visa a prospecção de espécies vegetais com atividade antiparasitária, o extrato hexânico das folhas de *B. sphenophylla* mostrou atividade *in vitro* frente a *Schistosoma mansoni*, um dos principais agentes etiológicos da esquistossomose, e foi submetido a fracionamento cromatográfico biomonitorado gerando dois compostos ativos: ácidos *ent*-caurenóico (**1**) e 15 α -senecioloxil-*ent*-caurenóico (**2**), ambos isolados pela primeira vez nesta espécie vegetal. Os compostos isolados foram então avaliados quanto ao potencial anti-helmíntico *in vitro* frente a vermes adultos de *S. mansoni*, sendo os valores de LC₅₀ determinados como 26,0 e 11,6 μ M, respectivamente. Além disso, os compostos mostraram reduzida toxicidade frente às células vero (CC₅₀ > 100 μ M) e, conseqüentemente, valores de SI de > 3,8 e > 8,6. A partir da análise dos resultados obtidos e da comparação das estruturas dos diterpenos **1** e **2**, foi possível inferir que a presença do grupo senecioloxil ligado ao C-15 do esqueleto *ent*-caurenóico é responsável pelo aumento significativo da atividade biológica.



Considerando que o composto **2** foi o mais ativo *in vitro*, o efeito dessa substância foi avaliado *in vivo* usando camundongos infectados experimentalmente com adultos de *S. mansoni* (infecção crônica). Sumariamente, o composto **2** administrado oralmente (dose única de 400 mg/kg) causou uma redução de 61,9% na carga parasitária. Outrossim, o número de ovos imaturos (oograma) e ovos nas fezes foi significativamente menor nos animais tratados com o composto **2**, com uma redução de aproximadamente 70%. Assim, os resultados obtidos neste estudo além de contribuir para as considerações quimiotaxonômicas de *B. sphenophylla*, permitiram a descoberta de um novo agente anti-helmíntico oriundo da biodiversidade brasileira o qual apresentou um melhor grau de seletividade frente ao fármaco padrão (praziquantel), mostrando-se, portanto, um potencial protótipo no combate à esquistossomose.

Referências: ¹Campos, F.R. et al. *Chem. & Biodiv.* **2016** 1-17. ²Budel, J.M. et al., *Molecules*; **2018** 1-20

Agradecimentos: FAPESP, CNPq e CAPES

42ª Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química - SBQ

Área: ANA

Nº de Inscrição: 00903

Avaliação de procedimentos de extração de pesticida carbamato seguindo os preceitos da química verde

Gabriel P. Bragaia (IC),^{1*} Wanessa R. Melchert (PQ).¹

***gabrielbragaia@usp.br**

¹Escola Superior de Agricultura “Luiz de Queiroz” – ESALQ/USP

Palavras Chave: Propoxur, Química verde, Carne bovina, Extração, Sistema de análises em fluxo.

Highlights

Analysis of carbamate pesticide extraction procedures following the precepts of green chemistry

Minimization of reagent consumption and residue generation;
Propoxur pesticide quantification;
Principles of green chemistry.

Resumo/Abstract

A Química Verde busca a prevenção da poluição a partir do desenvolvimento de soluções inovadoras com menor impacto ambiental com o uso de menor quantidade de reagentes e emprego de procedimentos que não produzam resíduos tóxicos.

Pesticida carbamato, como o propoxur, é um inseticida de ação rápida utilizado no controle de pulgas oportunistas e moscas, sendo aplicado nas instalações e nos animais infestados. Procedimentos de extração de propoxur da carne bovina são morosos e utilizam grandes volumes de solventes orgânicos (até 200 mL de acetona ou acetonitrila por extração). Este trabalho tem como objetivo avaliar procedimentos de extração de pesticida carbamato de amostras de carne bovina seguindo os preceitos da química verde.

Os estudos de extração foram realizados com amostras de carne bovina dopadas com quantidades conhecidas de propoxur $1,67 \times 10^{-3}$ mol L⁻¹ e os equipamentos avaliados foram ultrassom, aparelho de vórtex, mesa agitadora e sistema de análises em fluxo com agitador vibratório. A quantificação foi realizada por extração em ponto nuvem pelo método do azul de indofenol em 640 nm.

Para a mesa com agitação orbital e aparelho de ultrassom, as porcentagens de extração foram estimadas em $23 \pm 0,91$ e $29 \pm 4,9\%$, respectivamente. Além da baixa porcentagem obtida, o aparelho de ultrassom apresentou pontos com diferentes intensidades, afetando a precisão das extrações. Para o aparelho de vórtex e sistema de análises em fluxo, as porcentagens de extração foram estimadas em $66 \pm 4,1$ e $95 \pm 1,9\%$, respectivamente. O sistema de análises em fluxo foi o procedimento que demonstrou melhor eficiência de extração, além de ser um procedimento on-line, o que reduz os erros pelo analista e favorece o aumento da frequência de análises com redução drástica de resíduos gerados.

Agradecimentos/Acknowledgments

À FAPESP (processo 2018/07051-3) pela bolsa concedida.

Área: EDU*(Inserir a sigla da seção científica para qual o resumo será submetido. Ex: ORG, BEA, CAT)***Nº de Inscrição: 00906***(Inserir o número de inscrição do autor que fez a submissão)*

Tintas indígenas e o Ensino de Química

Mara Elisa Fortes Braibante (PQ)*, Vânia Costa Ferreira Vanuchi (PG)**marafb@gmail.com; vanuchivania@gmail.com.***Departamento de Química, UFSM; Programa de Pós-Graduação em Educação em Ciências: Química da Vida e Saúde, Santa Maria, RS.**Palavras Chave: tintas indígenas, cultura indígena, oficina temática, funções orgânicas.*

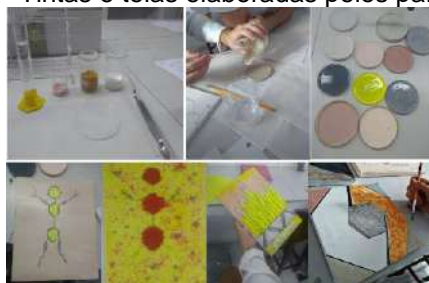
Highlights

Indigenous paints and the chemistry teaching. The objective of this work was to promote the insertion in the teaching of Chemistry the knowledge about indigenous culture through the conceptual approach of paints, so that students develop scientific.

Resumo

Em 2008, ficou estabelecido pela legislação brasileira de nº 11.645, a obrigatoriedade da inclusão da temática indígena, no currículo da educação básica. Diante do exposto, buscamos desenvolver ações que visam promover um ensino contextualizado, por meio desta temática. Neste trabalho apresentamos uma oficina temática que foi nomeada “Tintas Indígenas”, desenvolvida com 23 estudantes regularmente matriculados na terceira série do Ensino Médio, do colégio Tiradentes da Brigada Militar de Santa Maria-RS. O Tema foi trabalhado, apresentando inicialmente aos estudantes, a importância da pintura corporal para a sociedade indígena, a composição química de algumas tintas utilizadas por estes povos, e a composição Química dos pigmentos naturais empregados nestas tintas. Após, foi desenvolvido uma atividade experimental (Figura 1), cujo objetivo, foi confeccionar tintas, utilizando pigmentos oriundos do saber indígena, tais como açafraão, urucum e argilas coloridas. Durante a atividade, cada estudante recebeu uma tela branca e um pincel, para que pudessem pintar com as tintas que elaboraram. Essa atividade proporcionou a inserção de forma contextualizada de alguns conceitos químicos, tais como: Solução, concentração, misturas, diluição, cadeias carbônicas, funções orgânicas e grupos funcionais, assim como proporcionou discussões sobre a composição química de uma tinta de uso geral. Por meio da análise dos instrumentos de coleta de dados (Questionários e estudo dirigido) percebemos que antes da realização das atividades, a maioria dos participantes possuía pouco conhecimento sobre “os conteúdos trabalhados” e que pouco conheciam sobre a cultura indígena. Ao final da atividade, aplicamos os mesmos instrumentos de coletas de dados e percebemos pelas respostas dos estudantes, fortes indícios de aprendizagem. Portanto com estes dados podemos concluir que as atividades desenvolvidas na oficina temática “Tintas Indígenas”, foram uma excelente estratégia e contribuíram não só para o entendimento e assimilação de conceitos químicos relacionados às tintas indígenas, como também mostrou-se eficiente na inserção de tópicos referente a temática “indígena”, nas aulas da educação básica e com isto contribuiu com o ensino e aprendizagem dos estudantes.

Figura 01- Tintas e telas elaboradas pelos participantes.



Agradecimentos



Solar cell of a new hybrid MWCNT@P3HT: construction and characterization

Luiza De L. Ferreira* (PG), Tcharles A. L. Fengler (IC), Hállen D. R. Calado (PQ)

luizadl@yahoo.com.br; hallendaniel@yahoo.com.br;

Departamento de Química, Universidade Federal de Minas Gerais.

Keyword: solar cell; hybrid; carbon nanotube; poly(3-hexylthiophene).

Highlights

Organic photovoltaic cells (OPVs) are an attractive approach to developing solar energy conversion devices due to the simple and inexpensive techniques needed for processing the photoactive layer.

Abstract

The large world energy demand and the need to minimize environmental impacts point to solar energy as an alternative source of promising energy due to its high exploration potential, which is the direct conversion of sunlight into electricity. The interconnected nanogrids formed by the insertion of MWCNT in the polymer matrix results in materials with better optoelectronic properties. In this work, a new multi-walled carbon nanotube (MWCNT) and poly (3-hexylthiophene) (P3HT) hybrid was synthesized via microwave reaction and then polymerization in situ. The devices were mounted according to the FTO / PEDOT configuration: PSS / MWCNT @ P3HT / Al. The fluorine doped indium oxide (FTO) substrates were pretreated. Thin films of the materials were obtained via *spin coating* technique. After metallization (Al), the devices were tested in a solar simulator, obtaining the curve $I \times V$ shown in Figure 1-a. The photovoltaic performance parameters of this device are shown in Table 1. Through these results it is possible to conclude that it was possible to obtain a solar cell using the MWCNT@P3HT as the active layer. Factors such as inert atmosphere and optimization of film thickness are important to obtain better efficiency.

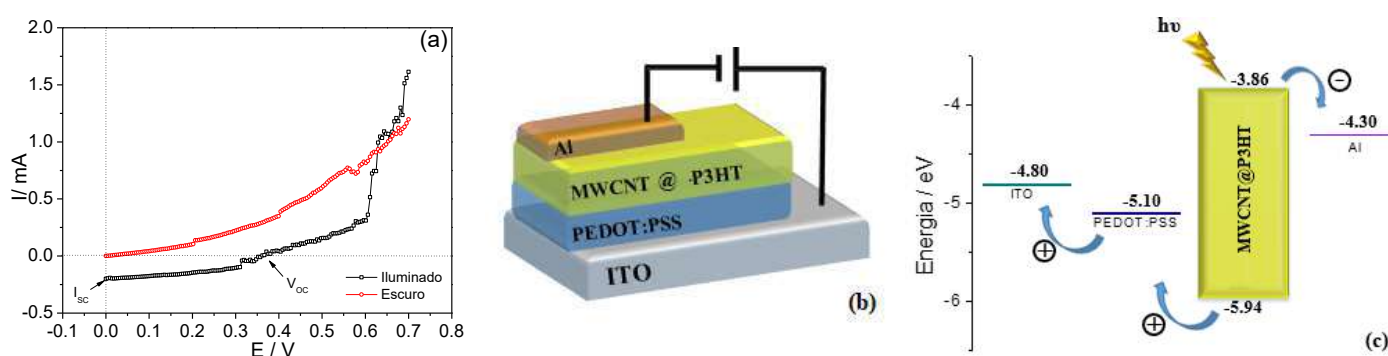


Figure 1: (a) A photocurrent-voltage curve for solar cell, illustrating dark and illuminated curve. (b) Solar cell configuration with active layer MWCNT@P3HT previously coated with a conductive polymer (PEDOT: PSS). (c) Short-circuit conditions where an exciton dissociates at the interface.

Table 1: Parameters of performance of the photovoltaic device.

| | I_{sc} / mA | V_{oc} / V | P_m / mW | $FF / \%$ | $\eta / \%$ |
|------------|----------------------|---------------------|-------------------|-----------|-------------|
| MWCNT@P3HT | 0.19 | 0.37 | 0.03 | 45 | 0.03 |

Acknowledgments

CNPq, FAPEMIG, CTNano/UFGM.

Área: QPN Nº de Inscrição: 00909

Seasonality effect on volatile profile of *Heliotropium indicum* from northern Ceara state (Brazil).

Emanuella Cristina dos Santos Moita (IC),¹ Dâmaris C. Aguiar (IC),¹ Vanessa Moreira Frota (IC),¹ Francisco Fernandes de Araújo (IC),¹ Geovany Amorim Gomes (PQ),¹ Jean Parcelli C. do Vale (PQ),¹ Paulo Nogueira Bandeira (PQ),¹ Hécio Silva dos Santos (PQ),¹ Tigressa Helena S. Rodrigues (PQ)^{1*}.

manuellacristinamoita@gmail.com; thelenasr@yahoo.com.br

¹Universidade Estadual Vale do Acaraú, UVA.

Palavras Chave: *H. indicum*, Volatiles, Seasonality, Phytol.

Highlights

- Influence of seasonality (rainy and dry seasons) on volatile profile of *H. indicum* aerial parts.
- Phytol is the major component in rainy (73.63%) and dry (89.78%) seasons.

Resumo/Abstract

Heliotropium indicum, belongs to the family Boraginaceae, is a native plant of tropical America. Commonly known as fedegoso, is used in folk medicine due to its biological properties, such as anti-inflammatory, antinociceptive, gastroprotective, among others. It is known that environmental conditions may influence the metabolites of plant species and its properties. Thus, at different geographic locations metabolic composition was found to vary within the season it was submitted. In the Ceara state (Brazil) there are the rainy and dry seasons, which probably influence the secondary metabolites production of a large plant species. Based on this, the aim of this work was to evaluate the seasonality influence on the volatile composition of *H. indicum* from northern Ceara state (Brazil). Aerial parts of *H. indicum* were obtained in the rainy and dry seasons in 2018. The essential oil from fresh material was obtained by hydrodistillation in Clevenger apparatus and analyzed by gas chromatography–mass spectrometry (GC-MS) using capillary column (RTX5-MS). According to the results, it was identified 15 compounds from *H. indicum* essential oil. Phytol is the predominant component in rainy (73.63%) and dry (89.78%) seasons, with higher value at driest season. This component is a diterpene alcohol with important anti-inflammatory properties, which has been studied in phytotherapeutic ointment formulation. In the rainy season, fatty alcohols such as arachidyl alcohol (7.3%), behenic alcohol (1.68%) and n-octadecanol (0.74%) were identified, with applications in cosmetics and also dermatological ointments. Based on this, volatile profile results of *H. indicum* allowed the identification of important secondary metabolites for future studies of its pharmacological potential and the influence exerted by the seasons at northern Ceara state on its chemical composition.

Agradecimentos/Acknowledgments



Área: AMB

(Inserir a sigla da seção científica para qual o resumo será submetido. Ex: ORG, BEA, CAT)

Nº de Inscrição: 00910

(Inserir o número de inscrição do autor que fez a submissão)

Pesticide determination by cloud point extraction

João Luiz L. Neto (IC),¹ Priscila A. R. de Sousa* (PG),¹ Liliam Q. Tavares (PG),¹ Mário G. Júnior (PQ),¹ Luciana M. Coelho (PQ),¹.

joao-luiz93@hotmail.com; rodriguessousa41@hotmail.com*

¹Departamento de Química, Universidade Federal de Goiás (UFG) – Regional Catalão

Palavras Chave: Extração, Ponto Nuvem, Pesticida, Planejamento fatorial.

Highlights

Techniques such as cloud point extraction should be used in agrotoxic analysis methods.

The technique facilitates the preconcentration of these compounds, their detection and quantification in samples.

Resumo/Abstract

As áreas agrícolas são potenciais fontes de contaminação devido ao grande uso de agrotóxicos nas lavouras, entre os diversos agrotóxicos destaca-se o 2,4 D utilizado no controle de plantas daninhas sendo facilmente lixiviado no solo oferecendo risco de contaminação das águas. Diversas técnicas tem sido utilizadas para identificação e quantificação dos agrotóxicos em diferentes matrizes. Uma técnica que tem ganhando destaque é a Extração por Ponto Nuvem (EPN), a qual se enquadra nos princípios da "Química Verde". A metodologia utilizada nesse trabalho para extração/pré-concentração do 2,4 D por EPN é apresentada na Figura 1. As condições de estudo basearam-se no Planejamento Fatorial 2³, com três variáveis e dois níveis (Tabela 1).

Figura 1: Condições utilizadas na EPN.

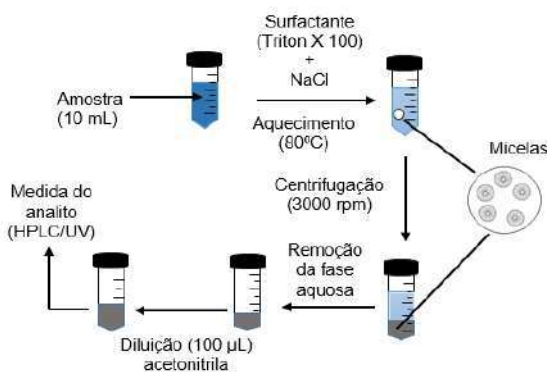


Tabela 1: Condições utilizadas no estudo de Planejamento Fatorial (n=3).

| Experimento | Surfactante (%) | Tempo de aquecimento (min) | NaCl (%) |
|-------------|-----------------|----------------------------|----------|
| 1 | 0,5 | 10 | 0,5 |
| 2 | 2 | 10 | 0,5 |
| 3 | 0,5 | 60 | 0,5 |
| 4 | 2 | 60 | 0,5 |
| 5 | 0,5 | 10 | 1 |
| 6 | 2 | 10 | 1 |
| 7 | 0,5 | 60 | 1 |
| 8 | 2 | 60 | 1 |
| 9 (C) | 1,25 | 35 | 0,525 |
| 10 (C) | 1,25 | 35 | 0,525 |
| 11 (C) | 1,25 | 35 | 0,525 |

As condições otimizadas em HPLC foram: comprimento de onda de detecção 210 nm; fase móvel: ACN/H₂O (60:40 v/v); vazão de 1,0 mL min⁻¹; volume de injeção de 20,0 µL. As figuras de mérito estudadas foram LD (0,001 µg mL⁻¹), LQ (0,005 µg mL⁻¹), linearidade (0,9902), tempo de retenção (3,1 min). O tratamento dos dados obtidos demonstrou que a variável surfactante possui influência significativa ao nível de 95% de confiança, fato que exigiu a exploração dessa variável em outros níveis de concentração (0,25; 0,5; 1,0; 2,0; 2,5; 3,0% (m/v)). Após análises as melhores condições experimentais considerando o surfactante (%), tempo de aquecimento (min) e NaCl (%) foram de 3,0; 10; 0,5, respectivamente, obtendo-se com tais condições um fator de pre-concentração de 19,3.

Agradecimentos/Acknowledgments

Agradecimentos a Universidade Federal de Goiás – Regional Catalão, ao Programa de Pós-Graduação em Química e a FAPEG.

"Synthesis and application of quinoline derivatives as corrosion inhibitors in stainless steel AISI 430 in acidic medium".

Vitor F. Moreno (PG),^{1*}, Giovanni C. dos Santos (PG),¹Luiz Carlos da Silva-Filho (PQ)¹.

vitorfmoreno@hotmail.com

¹ Chemistry Department, School of Sciences, UNESP-Bauru, Av. Eng. Luiz Edmundo Carrijo Coube, 14-01, CEP 17033-360, Vargem Limpa, Bauru, S.P, Brazil

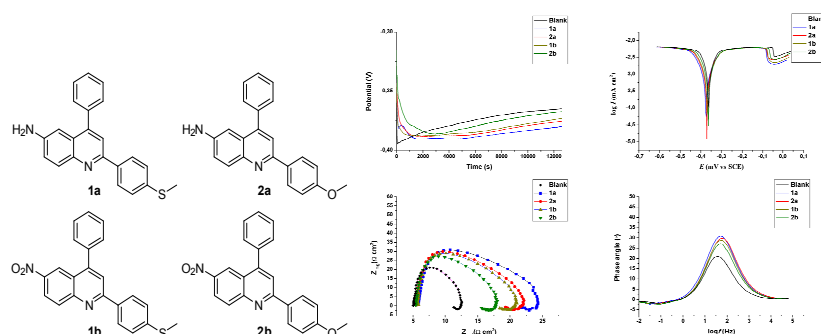
Keywords: Niobium pentachloride, Multicomponent Reactions, Quinoline Derivatives, Corrosion Inhibitors, AISI 430.

Highlights

In recent years the quinoline derivatives have been attracting interest in many studies related to corrosion inhibitors, mainly because they are considered green molecules and are readily obtainable. Here, we synthesize the molecules by multicomponent reactions in sequence using NbCl₅, as the reaction promoter, without the use of heating or inert atmosphere. Then we tested the application of these molecules to corrosion inhibitors in the AISI 430 steel attacked by HCl 1mol.L⁻¹ and perform the electrochemical measurements.

Resumo/Abstract

The nitroquinoline derivatives were synthesized through multicomponent reactions (MCRs) using NbCl₅ as a promoter.¹ The production of the aminoquinolines was performed directly by one-pot using the reducing agent NbCl₅/Zn as developed by the authors of this study.² After the synthesis, solutions were prepared to 150 mg.L⁻¹ of the organic compounds in EtOH. We immersed the plates of the polished AISI 430 steel (1cm²) in these solutions for 3 hours at 25°C.³ The electrochemical analyses were performed in a potentiostat using Pt electrodes and SCE. The results show that there was less electrochemical activity in the samples using adsorbed organic molecules compared to blank. The best results were obtained with the aminoquinolines (**1a** and **2a**) because of the NH₂, an electron-donor group. In nitroquinolines the NO₂ acts as an electron withdraw group and decrease the electrochemical activity. Compound **1a** exhibited better performance than **2a** by the presence of the S atom which has the most available electrons, resulting in a better adsorption of the molecule in the steel. The study showed that all the molecules can show an interaction of available heteroatom electrons (e.g. S, N) and the π conjugate system with stainless steel d orbitals, thus showing the importance of the quinoline compounds in inhibiting corrosion.



References:

- [1] Santos, G.C., et al. *J. Fluoresc.* 2017, 27, 271.
- [2] Santos, G. C., Moreno, V. F. & da Silva-Filho, L. C. *Tetrahedron*, 2018, 74(42), 6144-6149.
- [3] Singh, P., Srivastava, V., & Quraishi. *J.Mol. Liq.* 2016, 216, 164-173.

Agradecimentos/Acknowledgments

FAPESP, CAPES, CNPQ, PROPE-UNESP e CBMM.

Synthesis and characterization of Cobalt (II) Hydroxysalicylate obtained by the co-precipitation method.

Andressa Xavier Ferreira Lefchak (IC),¹ Kauani Caldato (IC),¹ Leandro Zatta (PQ)¹.

Andressa.lefchak@gmail.com

¹Departamento de química, Universidade Tecnológica Federal do Paraná, UTFPR, Via do Conhecimento, Pato Branco, PR, 85503-390, Brasil

Keywords: Cobalt(II) Hydroxysalicylate, co-precipitation, salicylate.

Highlights

The Cobalt shows biological activities (antifungals and antimicrobial). The obtention and characterization of Cobalt(II) Hydroxysalicylate may lead to studies of possible biological relevance

Resumo/Abstract

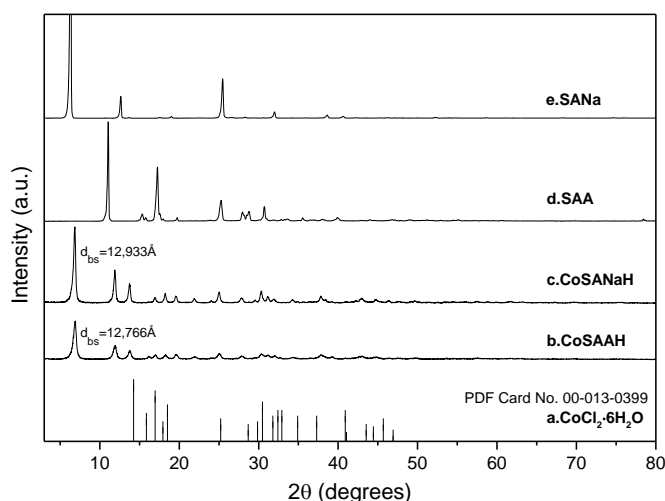


Figure 1. XRD patterns a. CoCl₂·6H₂O; b. CoSAAH; c. CoSANA; d. SAA; e. SANA.

The cobalt(II) hydroxysalicylates (CoSAAH and CoSANA) was obtained by the co-precipitation method using NH₄OH, CoCl₂·6H₂O, salicylic acid (SAA) and sodium salicylate (SANA) as precursors.

Figure 1 shows the XRD patterns of the samples. Comparing the materials obtained with different precursors (SAA or SANA) was observed a similar diffraction profile between the samples, characteristic of layered materials, with some other phases in minor content (not identified at the moment). No displacements in relation to the main peak positions and no characteristic phases of the precursors are observed in the obtained materials.

The sample obtained with sodium salicylate (SANA) showed peaks with higher relative intensity. The obtained materials showed the more intense peak at 6.92° (2θ), in addition, the samples have two harmonics peaks, indicating the lamellar structure. The basal spacing of the samples determined by Bragg's law was 12,8 Å. By comparing, the principal differences reside in the relative peak intensities, it is possible to perceive a slight difference, with CoSAAH being the most promising due to the higher intensity and the thinner XRD peaks, that indicates a good crystallinity of the solid, besides that the sodium salicylate consumes less hydroxide precursor in its synthesis, being environmentally friendly. Due to few reports in the literature about the evaluated materials, the obtained results motivate a more detailed investigation.

Determinação direta de Ca, Mg, Mn e Zn em alginatos odontológicos comerciais utilizando amostragem em suspensão por FIA – F AAS

Graziela F. B. Cruz* (PG),¹ **Pamela S. M. Rocha** (PG),^{1*} **Ricardo J. Cassella** (PQ),¹

grazi.qa@gmail.com

¹Universidade Federal Fluminense, Departamento de Química Analítica, Outeiro de São João Batista s/n, Niterói - RJ.

Palavras Chave: (Determinação direta, Metais, Amostragem em suspensão, Alginatos odontológicos).

Highlights

Direct determination of Ca, Mg, Mn and Zn in commercial dental alginates using slurry sampling by FIA - F AAS.

Development of a method for direct injection of the solid sample for determination of metals. Flow injection analysis to inject solid suspension samples into F AAS. Automated sample treatment for further determination of Ca, Mg, Mn e Zn by F AAS.

Resumo/Abstract

O alginato odontológico é muito utilizado na moldagem de próteses dentárias expondo os pacientes às substâncias que foram incorporadas ao material durante a fabricação. O objetivo deste trabalho é o desenvolvimento de uma metodologia para introdução direta do alginato odontológico e determinação de Ca, Mg, Mn e Zn utilizando FIA - F AAS. Para formação da suspensão o alginato é adicionado a uma solução contendo surfactante e ácido. Com intuito de obter a melhor condição para a suspensão foi avaliada a influência da massa de alginato (2,5 a 50 mg de alginato para 50 mL). Em seguida, foram avaliados os surfactantes CPC, CTAB, Triton X-100, Triton X-114 e Tween 20 nas concentrações de 0,25 % m/v para o primeiro e segundo, 1 % m/v Tween 20 e 10 % m / v para os dois últimos. Para estudo comparativo foram avaliados os dois melhores, CPC e Triton X-100. Foi realizada também a avaliação da influência da concentração da solução de HNO₃ (0,2 e 1,6 mol . L⁻¹). A melhor condição foi observada com Triton X-100 a 1 % m / v, solução de HNO₃ 0,6 mol . L⁻¹ e massa de amostra igual a 12,5 mg. Para quantificação dos analitos nas seis amostras foram construídas curvas de adição na suspensão. A metodologia proposta apresentou ótimos resultados para determinação direta dos metais em alginatos por FIA - F AAS, podendo ser aplicada na investigação de outros analitos neste tipo de matriz.

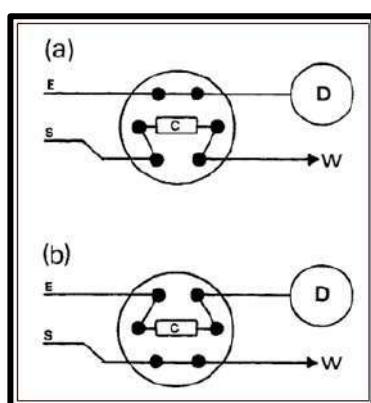


Figura 1: Esquema da válvula de seis saídas utilizada para injeção direta da suspensão no equipamento. S: entrada da suspensão, W: descarte, E: entrada do eluente, C: alça de amostragem e D: detector (F AAS)

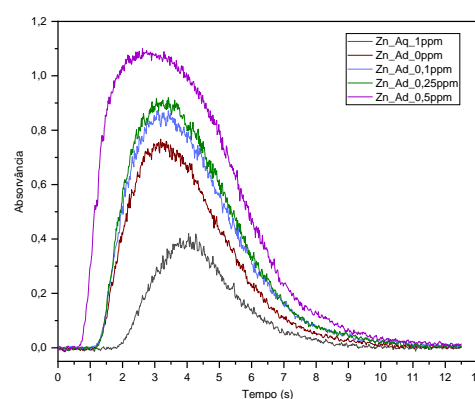


Figura 2: Picos obtidos para Zn em solução aquosa e na suspensão de alginato odontológico com diferentes adições do analito.

Agradecimentos/Acknowledgments

CAPES, CNPq e FAPERJ.

Área: ANA _____

(Inserir a sigla da seção científica para qual o resumo será submetido. Ex: ORG, BEA, CAT)

Nº de Inscrição: **00914**

(Inserir o número de inscrição do autor que fez a submissão)

A reagentless procedure for determination of biodiesel in blends with diesel or vegetable oils

Samara Soares* (PG), **Fábio R. P. Rocha** (PQ).

soaressamara@usp.br

Centro de Energia Nuclear na Agricultura, Universidade de São Paulo

Keywords: Transesterification, Ethanol, Blends, Biodiesel quality control, Green chemistry

Highlights

A simple strategy to detect biodiesel adulteration by vegetable oils or determine biodiesel amount in diesel blends. Environmental friendly procedure requiring only water and ethanol. Analytical determination based on the turbidity of the sample in function of the percentage of biodiesel.

Resumo/Abstract

Biodiesel is produced from renewable sources (vegetable oils or animal fats), and it is marketed mixed with diesel. The characteristic species of biodiesel is the alkyl ester content, which must be at least 96.5% (v/v). Currently the percentage of biodiesel mixed with diesel is 10% (v/v). The official method EN 14078 to quantify biodiesel in the mixture with the diesel is based on infrared spectroscopy, whereas the official method EN14103 for determining the ester content in biodiesel is based on gas chromatography with flame ionization detector. Both have disadvantages, such as the high complexity of the data obtained by the infrared method and the high cost of the chromatographic one. In this work, it is proposed a simple and green volumetric method to determine biodiesel in diesel blends or to detect adulteration of biodiesel by vegetable oils. It is based on the differences of solubility of the components with an ethanol:water solution, which increases with the biodiesel content. The volume of the solution (titrant) required to yield a turbid mixture with the sample dissolved in ethanol is taken as analytical parameter (Figure 1). For 400 μL of the diesel:biodiesel blends, a linear response was obtained up to 25% (v/v) biodiesel ($V = -0.202 + 0.055C$, $r = 0.993$). For 250 μL of the biodiesel:vegetable oil blends linear responses were obtained up to 0-50% (v/v) and 50-80% (v/v), described by equations $V = 0.114 + 0.050C$, $r = 0.996$ and $V = -2.5 + 0.076C$, $r = 0.994$, respectively. For biodiesel:diesel blends, the coefficient of variation ($n = 10$) and the detection limit (99.7% confidence) were estimated at 6.8% and 7.0% (v/v), respectively; the corresponding values for the biodiesel:vegetable oil blends were 5.8% and 20.0% (v/v). The procedure requires only ethanol and water as titrant and generates ca. 10 mL of residue per determination. The results agreed with those obtained by the reference procedures at the 95% confidence level. The proposed procedure is then an environmental friendly alternative to the official methods.

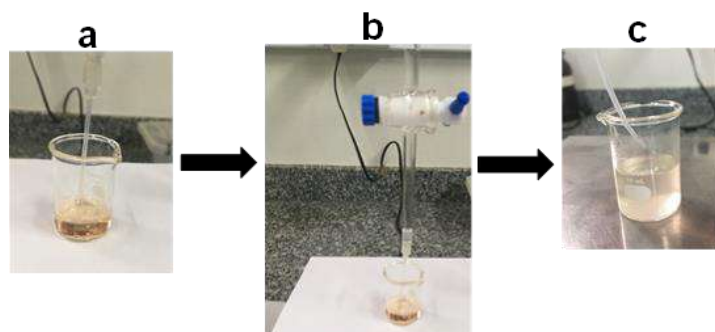


Figure 1. Steps of the volumetric procedure. (a) sample diluted in ethanol, (b) titration with ethanol:water solution under constant agitation, (c) turbid mixture indicating the end-point.

Acknowledgments

FAPESP (processo 2018/07687-5), CNPq e CAPES.

Unraveling the reactivity of imidazole towards organo(thio)phosphates: N-alkylation vs N-phosphorylation

Valmir B. Silva (PG)* and **Elisa S. Orth (PQ)**

valmir-baptista@hotmail.com;

Department of Chemistry, UFPR

Palavras Chave: (Organophosphorus, Pesticide, Kinetics, Reaction Mechanism, Detoxification).

Highlights

- Imidazole undergoes preferably N-alkylation with organothiophosphates (P=S), under mild conditions.
- N-phosphorylation occurs exclusively with organophosphates (P=O).

Resumo/Abstract

Imidazole (IMZ) is a heterocyclic amine encountered in several enzymatic active sites, crucial in phosphoryl transfer process. Due to this role, IMZ shows an interesting potentiality towards P-O bond cleavage. Many organophosphorus compounds are well-known as toxic pesticides and chemical warfare agents. Their efficient detoxification is strongly related to the mechanism in order to assure less toxic products and few side reactions. Herein, we evaluated the reactions of IMZ with various organo(thio)phosphates: Methyl Parathion¹ and Parathion, and compared with analogues Paraoxon and diethyl 2,4-dinitrophenyl phosphate (DEDNPP). A thorough kinetic study (UV-Vis spectroscopy) was carried out as well as ³¹P and ¹H NMR. Previous results showed that IMZ attacks the phosphoryl center in organophosphates.^{2,3} Our results showed that with organothiophosphates, IMZ attacks preferentially the aliphatic carbons and in a minor degree the phosphoryl center. The products DEPT and DNP were monitored by UV-vis spectroscopy showing the preference to IMZ attack at aliphatic carbon.

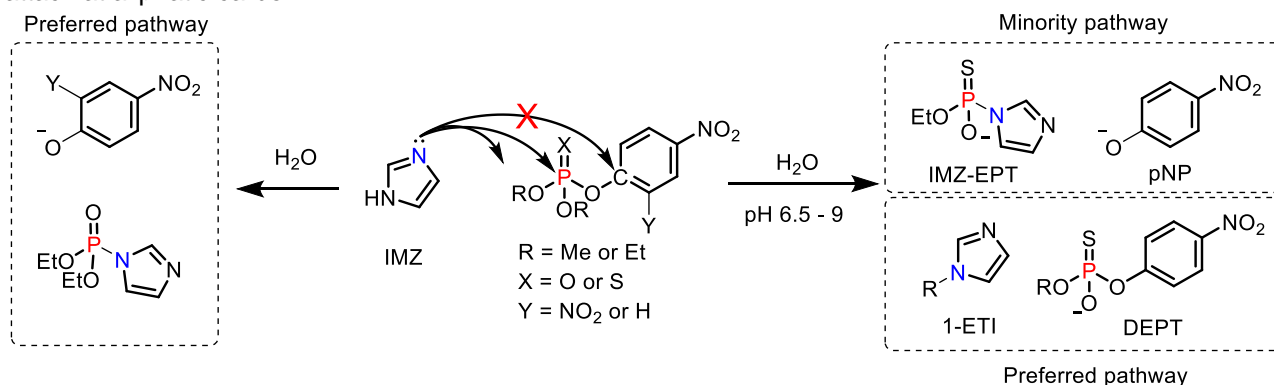


Figure 1 – Parathion, ethyl parathion, paraoxon and DEDNPP evaluated in reactions with IMZ

The NMR analysis confirmed the results observed in the kinetic study where it was possible to observe the key species PNP, DEPT and 1-ETI. Parathion was less reactive in relation to the analogous Methyl-parathion and in both cases the N-alkylation of IMZ was the preferred pathway. This reaction understanding permits unraveling the structure-reactivity relation of IMZ with organothiophosphates to develop prominent detoxify agents.

Agradecimentos/Acknowledgments

UFPR, CAPES, CNPq, PhosAgro/UNESCO/IUPAC, Fundação Araucária and L'Oréal-UNESCO-ABC

References:

¹Silva, Valmir B., et al. *Chem. Eur. J.* (2019): 817-822.

²Orth, E. S., et al. *J. Mol. Catal. A: Chem.* (2015): 93-98.

³Orth, E. S et al.: *J. Org. Chem.*, (2011), 8003-8008.

Área: AMB

(Inserir a sigla da seção científica para qual o resumo será submetido. Ex: ORG, BEA, CAT)

Nº de Inscrição: 00918

(Inserir o número de inscrição do autor que fez a submissão)

Hydrothermal synthesis of maghemite from bauxite mining residues from Amazon Region

Renata de Sousa Nascimento (PG),¹ Kássia Lene Lima Marinho (PG),¹ Bruno Apolo Miranda Figueira (PG),¹ Igor Alexandre Rocha Barreto (PG),² Marcondes Lima da Costa (PQ)²

brunoufopa@hotmail.com; rsnufopa@hotmail.com

¹Pós Graduação em Sociedade, Ambiente e Qualidade de Vida, UFOPA. ² Pós Graduação em Geologia e Geoquímica, UFPA.

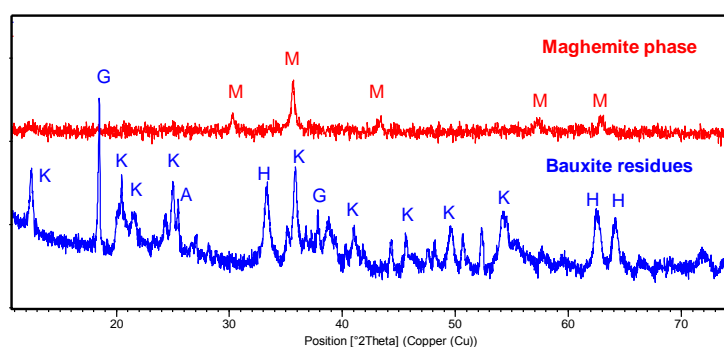
Keywords: maghemite, hydrothermal, synthesis, bauxite, mining residues, Amazon Region.

Highlights

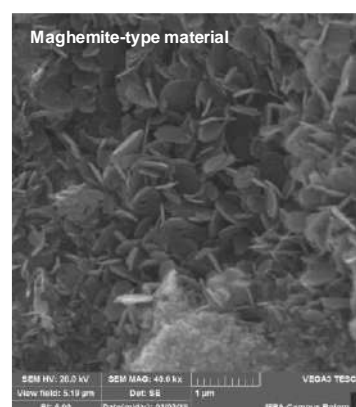
The bauxite mining residues were converted into maghemite-type material from mining residues from Amazon; The co-precipitation method for obtaining iron oxide nanoparticles is presented; The iron oxide particles showed spherical plates morphology.

Abstract

A facile hydrothermal route was developed to obtain maghemite phase, employing bauxite mining residues from Amazon Region as low-cost starting material. The residues were characterized by X-Ray Diffraction (XRD) and X-Ray Fluorescence Spectrometry (XDF), which revealed high percentage of Fe₂O₃ (56.021 wt. %), which could be reported to the hematite mineral. According to the results obtained, maghemite could be synthesized at 80 °C for 48 hours. The XRD analysis showed typical peaks of the cubic maghemite crystal, having cell parameters: $a = 8,34 \text{ \AA}$ and $V = 582,56 \text{ \AA}^3$. The crystallite size using XRD was 22 nm (Scherrer Equation). The FT-IR spectra, showed characteristic OH stretching and HOH vibrational bands at 3430 cm⁻¹ and 1600 cm⁻¹ due to the adsorbed water in the sample. The vibrational bands at 892 cm⁻¹, 579 cm⁻¹ and 440 cm⁻¹ can be attributed to the stretching vibration mode of the Fe-O bond, which agrees well with maghemite FTIR typical bands. The material exhibited morphology in the form of spherical plates and the average size around 0.5 μm. The results revealed that this bauxite mining residues were favorable to obtain maghemite phase without impurities.



A = anatase, G = gibbsite, H = hematite, K = kaolinite, M = maghemite.



Acknowledgments

This work was supported by National Council for Scientific and Technological Development (No. 420169) and Coordination for the Improvement of Higher Education Personnel (No. 88881.160695), LAMIGA laboratory (UFPA) and UFOPA.

Área: EDU

Nº de Inscrição: 00919

StoichiometryGame: an alternative method for the General Chemistry teaching in the Pharmacy graduation course.

Maria Eduarda C. Thedy (IC),^{1*} Juliano B. Azeredo (PQ).¹

eduarda.candido.thedy@hotmail.com

¹Universidade Federal do Pampa

Palavras Chave: *Teaching, Game, General Chemistry, Stoichiometry.*

Highlights

As an alternative teaching method, a ludic activity was developed to reinforce the stoichiometry content of the General Chemistry class, focused on correct chemical reactions assembly and balancing.

Resumo/Abstract

Increasingly, it's notorious that the teacher needs to innovate in his teaching methods. In the Chemistry subjects, which students show great difficulties, it's important that traditional teaching method makes use of alternative resources. In this context, there are educational games: they stimulate the learning and the memories consolidation, they favor teamwork and are useful in the knowledge construction¹. They also serve to strengthen, review and exercise several content, added to fun². A game was developed focusing on the stoichiometry content of the General Chemistry discipline in the UNIPAMPA Pharmacy graduation course, pointing to the assembly and correct balancing of chemical reactions. Participants were divided into groups, which competed against each other. The game had a "lottery box", with balls in three different colors; each color represented a difficulty level: yellow (easy), red (intermediate) and blue (difficult). Each color had its corresponding envelope, and in this envelope were the chemical reaction reagents and products, disorganized, with a clue to help its assembly; the group, after getting a color, had 5 minutes to assemble the equation and balance it properly; if they were right, they earned a point. The group with the highest score would be the winner. At the end, the students had to answer an evaluation questionnaire:



| |
|--|
| 1. Your own performance during the game: Insufficient (0%); Regular (0%); Good (14%); Very good (64%); Great (22%). |
| 2. Classmates performance in your own group: Insufficient (0%); Regular (0%); Good (0%); Very good (0%); Great (100%). |
| 3. Classmates performance in the opposing group: Insufficient (0%); Regular (0%); Good (0%); Very good (15%); Great (85%). |
| 4. Importance of the proposed activity, in a grade of 0-10: Grade 10 (100%). |
| 5. Importance of the academic monitoring realization in extra-class hours for General Chemistry subject, in a grade of 0-10: Grade 10 (100%). |

After the obtained results, it was concluded that the activity complied with its proposal of the teaching innovation in Chemistry. This work remains in constant development and improvement for subsequent applications.

Bibliographic References:

¹ CAPPS, K. Chemistry Taboo: An Active Learning Game for the General Chemistry Classroom. *Journal of Chemical Education*, Florida, v. 85, n. 4, p. 518, 2008.

² PIPPINS, T.; ANDERSON, C. M.; POINDEXTER, E. F.; SULTEMEIER, S. W.; SCHULTZ, L. D. Element Cycles: An Environmental Chemistry Board Game. *Journal of Chemical Education*, Texas, v. 88, p. 1112-1115, 2011.

Agradecimentos/Acknowledgments

The authors thank to UNIPAMPA for their support.

A new approach for the synthesis of α -alkylidene- γ -butyrolactones, mediated by an halonium ion.

Aline S. B. de Oliveira (IC), Lucas A. Zeoly (PG), Fernando Coelho* (PQ).

95aline.s@gmail.com; coelho@iqm.unicamp.br

Instituto de Química – UNICAMP – Departamento de Química Orgânica

Key-words: Morita-Baylis-Hillman, γ -Lactone, α -Alkylidene- γ -butyrolactone

Highlights

An approach for the synthesis of α -alkylidene- γ -lactones was developed. The strategy is based on a cyclization reaction mediated by an halonium ion, from Morita-Baylis-Hillman (MBH) adducts.

Abstract

The γ -lactones (butyrolactones), specially, α -alkylidene- γ -lactones (Figure 1) are found in several substances from natural source. Recent studies have demonstrated that this structural arrangement is related to a great diversity of biological activities, being its exocyclic-diene portion responsible for these activities.¹

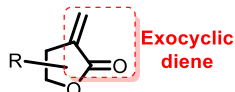
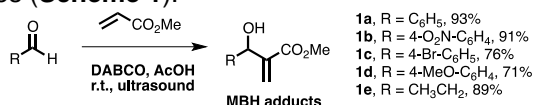


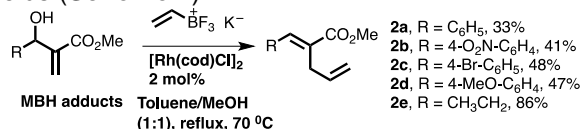
Figure 1. α -Alkylidene- γ -lactone skeleton

This work was initiated by the preparation of the Morita-Baylis-Hillman (MBH) adducts. Some commercially available aldehydes were treated with methyl acrylate, acetic acid and DABCO in the presence of ultrasound radiation to afford adducts **1a-e** in good to excellent yields and short reaction times (Scheme 1).



Scheme 1. Synthesis of MBH adducts

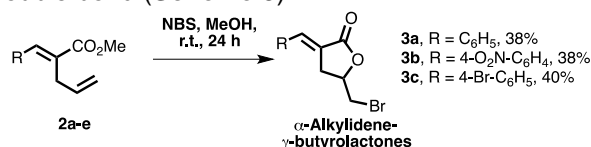
These adducts were, therefore, used as substrate for a vinyl homologation reaction, through a 1,4-addition mediated by rhodium (Rh).² This reaction allowed the preparation of alkenes **2a-e** in moderate yields (Scheme 2).



Scheme 2. 1,4-Addition reaction catalyzed by Rh

Alkenes **2a-e** were treated with NBS (N-bromosuccinimide) in methanol, at room

temperature, to give the corresponding lactones **3a-c** in moderate yields. We believed that this intramolecular lactonization reaction is mediated by the presence of a halonium ion, formed by the interaction between NBS and the electron-rich double bond (Scheme 3).



Scheme 3. Synthesis of α -alkylidene- γ -lactones

The α -alkylidene- γ -lactones **3a-c** were obtained in one sole step in moderate yields. Unfortunately, a complex mixture was obtained when alkenes **3d** and **3e** were used as substrates. Additional studies are ongoing in order to solve this issue and increase the scope of this methodology.

The presence of water seems to be crucial for the intramolecular cyclization occurs. We are performing some essays to understand the role of the water in this process and also to clarify the mechanism of this transformation. As far as we know, this is the first report on the synthesis of this lactone by this approach.^{3,4}

References

- (1) Eicher, T.; Hauptmann, S.; Speicher, A. *Bioactive Heterocyclic Compound Classes*; **2012**;
- (2) Navarre, L.; Darses, S.; Genet, J.-P. *Adv. Synth. Catal.* **2006**, *348*, 317–322.
- (3) Lee, C. –W. *et al. Heterocycles* **1997**, *45*, 943–948;
- (4) Park, H. S. *et al. Tetrahedron Lett.* **2008**, *49*, 1616–1618.

Acknowledgments

We thank Fapesp (2018/00299-0) for undergraduated fellowship and for financial support (2018/02611-0). We also thank Institute of Chemistry/Unicamp for research infrastructure.

Área: INO

Nº de Inscrição: 00922

Synthesis of new $[\text{Ru}(\text{II})(\text{L})_n(\text{Bipy-Naphthylamide})_m]^{2+}$ ($\text{L}=\text{Bipys}$; $n=1-2$, $m=1-3$) Complexes with Deep-Red/Near-Infrared Emission

Clayton M-Souza(PG), Vínicius C.-Carpentero(IC), Claudio L. Donnici(PQ) and M.H. Araujo(PQ)*.

*mharaujo@ufmg.br

Departamento de Química, Universidade Federal de Minas Gerais.

Keywords: Ru(II) poly-pyridil complexes, 2,2'-bipyridine, 4,4'-bis-carboxyfunctionalized-2,2'-bipyridines, Deep-red/NIR emitters.

Highlights

Rational planning on synthesis and photochemical investigation of 7 new $[\text{Ru}(\text{II})(\text{L})_n(2,2'\text{-Bipy-4,4'}\text{-CO-1-naphthyl})_m]^{2+}$ complexes with deep-red/NIR emission for development of advanced DSSC sensitizers.

Abstract

It is expected that by 2050 world energy demand will be greater than the supply and newer, cleaner, safer and better energy resources must be used; however 1 hour of solar irradiation equals our annual energy consumption. Solar photovoltaic cells can directly convert sunlight into electrical power and these devices have been investigated and applied for sustainable and renewable sources of clean energy. A variety of transition-metal complexes and organic dyes has been successfully employed as sensitizers in dye-sensitized solar cells (DSSCs) thus far. However, in terms of photovoltaic performance and long-term stability, Ru(II) polypyridyl complexes comprise the most successful family of DSSCs sensitizers, especially the carboxylic derivatives, due to their appropriate redox, spectroscopic, and excited-state properties. The DSSC systems described by Grätzel in 1991, ruthenium complexes endowed with thiocyanate ligands (N3, N719 or "black dye"), and even other similar analogues have maintained a clear lead in performance and represent one of the most remarkable methodologies for large-scale, low-cost, efficient conversion of sunlight to electricity and power production from renewable energy sources even until today. Indeed, much attention has been given to the development of newer, more efficient and better Ru(II) polypyridinic sensitizers as can be clearly noticed by many papers, patents and special reviews about this strategic technologic and scientific research field. In this work, the synthesis of new ruthenium(II) complexes with 2,2'-bipyridine (L_1) and other 2,2'-bipyridine 4,4'-functionalized ligands, such as: $-\text{CO}_2\text{H}$ (4,4'-dicarboxy-, L_2), $-\text{CO}_2\text{Et}$ (4,4'-diethoxycarbonyl-, L_3) and 4,4'-bis-[N,N-(naphthalen-1-yl)acetamide] (**Bipy-CONPh**) are reported. The functionalized 2,2'-bipyridines were prepared (80-95%), according to the literature methods, starting from 4,4'-dimethyl-2,2-Bipy, which is oxidized to the 4,4'-dicarboxy analogue L_2 and subsequently transformed in the corresponding diester L_2 , or the bis-amide **Bipy-CONPh** derivatives. Di- μ -chloro-(η^4 -cycloocta-1,5-diene)ruthenium(II) was obtained as a precursor complex for preparation of the intermediate complexes *cis*-[bis-(L_2)dichloro]ruthenium(II) ($\text{L}=\text{L}_1, \text{L}_2$ and L_3) and from these ones the following 6 novel complexes were synthesized (56-91%): $[\text{Ru}(\text{L}_1/\text{L}_2/\text{L}_3)_2(\text{Bipy-CONPh})]^{2+}$ and $[\text{Ru}(\text{L}_1/\text{L}_2/\text{L}_3)(\text{BipyCONPh})_2]^{2+}$. The tris-amide derivative $[\text{Ru}(\text{Bipy-CONPh})_3]^{2+}$ was synthesized (89%) directly from the reaction between ruthenium trichloride and excess of **Bipy-CONPh**. All compounds, starting materials, intermediates and final products were characterized by the usual spectrometric and physicochemical techniques. Afterwards, the photophysical properties were investigated, such as Stokes displacement, molar absorptivity coefficient (ϵ) and quantum fluorescence yield (Φ) were evaluated. The crystallographic structure of $[\text{Ru}(\text{Bipy})_2(\text{Bipy-CONPh})(\text{PF}_6)_2]$ was determined. All complexes present intense (ϵ , $1.38\text{-}4.1110^4 \text{ Lmol}^{-1}\text{cm}^{-1}$) deep-red emission (640-670 nm, DMSO) with quite reasonable quantum yields (0.11-0.16) for $[\text{Ru}(\text{L}_3)(\text{BipyCONPh})_2]^{2+}$ and $[\text{Ru}(\text{Bipy-CONPh})_3]^{2+}$. These new Ru(II) complexes present remarkable deep-red/Near-Infrared emission and they might be promising DSSC sensitizers.

Acknowledgments

CNPq (311409/2014-8), INCT-MIDAS, FAPEMIG (CEX PPM 281-17, APQ-02715-14, APQ-02523-14), CAPES (Finance Code 001) and Rede Mineira de Química (RQ-MG).

Área: QPN

Nº de Inscrição: **00923**

Dereplication of cytotoxic extracts of endophytic fungi obtained from *Casearia arborea* (Salicaceae) using molecular network approach.

Augusto L. dos Santos (PG)¹, Livia Soman de Medeiros (PQ)¹, Marisa Ionta (PQ)², Renato O. Horvath (PG)², Marisi G. Soares (PQ)³, Marcelo M. P. Tangerina (PQ)⁴, Marcelo J. P. Ferreira (PQ)⁴, Patricia Sartorelli (PQ)^{1*}.

aug.snt@gmail.com; patty.sart@gmail.com

¹Instituto de Ciências Ambientais, Química e Farmacêutica, UNIFESP; ²Instituto de Ciências Biomédicas, UNIFAL; ³Instituto de Química, UNIFAL; ⁴Instituto de Biociências, USP.

Keywords: *Casearia arborea*, Endophytic fungi, Dereplication, GNPS, Molecular network.

Highlights

Forty seven endophytic fungi were isolated from *Casearia arborea* (Salicaceae). Ethyl acetate extracts were prepared (94) and evaluated from cytotoxic activities in four tumor cell lines. Twenty five extracts showed cytotoxic activity which were investigated through dereplication process using GNPS database.

Twenty compounds were identified including polyketides, terpenoids, furanones and piperazines.

Resumo/Abstract

Plants and microorganisms are present in human history furnishing a large use in food and popular medicine. Nowadays the drug discovery process includes the study of many medicinal plants and their microorganisms have shown promising results in the search for bioactive substances. About 80% of the new anti-tumor chemical entities approved since 1981 to 2014 are inspired/derived from natural products¹. In the last three decades the study with endophytes have shown the promising potential to find new cytotoxic prototypes.² Considering that *Casearia* genus shows various cytotoxic clerodane diterpenes³ and its endophytic microbiota is unknown, the leaves of *C. arborea* were collected in Alfenas (MG, Brazil) and the endophytic fungi were isolated according to literature⁴. Forty seven fungi were isolated and cultivated in PD broth and rice. Ethyl acetate extracts (94) were evaluated against four tumor cell lines (MCF7, HepG2, A549 and HT144)⁵, at concentration of 10 µg.mL⁻¹. Active extracts were investigated through dereplication using the GNPS platform (Global Natural Products Social Molecular Network)⁶ based on the results of MS/MS mass spectra obtained by HPLC-HRMS analysis. So, there were twenty five active extracts (cell viability ≤ 70%): ten from the rice medium and fifteen from the BD broth culture. The LC-HRMS/MS analysis were obtained in a C-18 column (100 x 2.1 mm, Kinetex 2.6µ) and mobile phase H₂O (0,1% formic acid) and ACN (0.1% formic acid) beginning with 15% of ACN, keeping constant for 1 min. and gradually up to 95% until 10 min. and keeping constant for 4 min. MS/MS spectra were obtained in a QToF ESI-(+) mode. All the MS/MS data was then converted to .mzXML format to perform the dereplication on GNPS for database matches. Twenty compounds were identified, but only ten substances showed high quality match, including six polyketides and some derivatives, terpenoid, pentalenolactone, ralfuranone and a dioxopiperazine (figure 1).

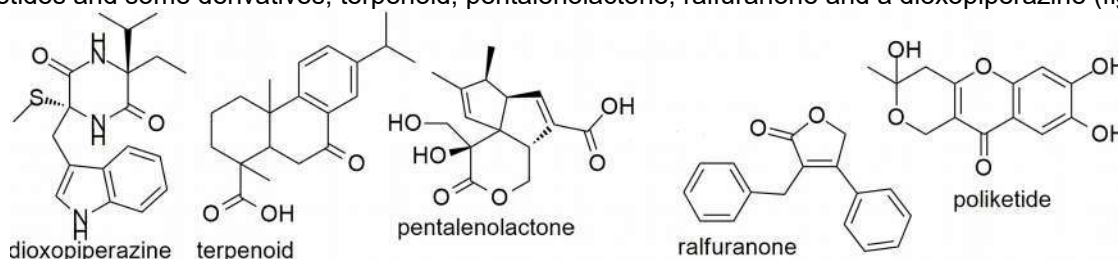


Figure 1: Compound classes identified via GNPS.

References: ¹Newman & Cragg, *Journal of Natural Products*, 79: 629, **2016**. ²Kharwar et al., *Natural Products Reports*, 28, 1208, **2011**. ³Xia et al., *Phytochemistry Reviews*, 14: 99, **2015**. ⁴Momesso et al., *Química Nova*, 31: 1680, **2008**. ⁵Al-Nasiry et al., *Human Reproduction*, 22: 1304, **2007**. ⁶Wang et al., *Nature Biotechnology*, 34: 828, **2016**.

Agradecimentos/Acknowledgments

Às agências de fomento: CAPES, CNPq, FAPESP.

Área: QPN

Nº de Inscrição: 00926

Chemical profile of *Crotalaria spectabilis* extracts and evaluation of nematode control in *Heterodera glycines*

Helena M. Russo (PG)¹, **Tamires Scupinari** (PG)^{2*}, **Anna Beatriz S. Ferrari** (PG)², **Estela O. Nunes** (PQ)³, **Vanderlan S. Bolzani** (PQ)¹, **Maria Luiza Zeraik** (PQ)²

helenamrusso@gmail.com; **tscupinari@yahoo.com.br**

¹NuBBE, Department of Organic Chemistry, Institute of Chemistry, São Paulo State University (UNESP), Araraquara, SP, Brazil; ²Departament of Chemistry, Londrina State University (UEL), Londrina, PR, Brazil; ³Empresa Brasileira de Pesquisa Agropecuária (EMBRAPA-Soja), Londrina, PR, Brazil.

Palavras Chave: *Crotalaria spectabilis*, monocrotaline, quantification, mass spectrometry, *Heterodera glycines*

Highlights

C. spectabilis extracts shows nematicidal and nematostatic effects in *H. glycines*.
Monocrotaline quantification by LC-MS was effective in determining this compound's amounts in *C. spectabilis* extracts.

Abstract

The quality of soybean production can be affected by phytonematoids such as *Heterodera glycines*, which damage soybean plants by attacking their roots and hindering the absorption of nutrients.¹ *Crotalaria spectabilis* (Fabaceae) is known in agriculture due to its potential in nematode control and presents high levels of pyrrolizidine alkaloids, which are responsible for the toxic activity of this plant.² Thus, the objective of this work is to study the chemical profile of the NaHCO₃ and EtOH 80% extracts from *C. spectabilis* seeds and leaves by liquid chromatography coupled to mass spectrometer (LC-MS), to evaluate its potential in *H. glycines* nematode control and to perform a quantification of the toxic pyrrolizidine alkaloid monocrotaline by mass spectrometry in these extracts. The *C. spectabilis* seeds and leaves extracts were obtained by cold extraction in an industrial blender. The *H. glycines* nematodes were exposed to these extracts in order to evaluate their nematicidal (% mortality) and nematostatic (% immobility) effects in final extracts concentrations of 5, 10 and 20 mg mL⁻¹. For all the 4 extracts, the nematostatic effects were above 85% immobility in 5 mg mL⁻¹, while the NaHCO₃ extracts presented more than 90% mortality in 20 mg mL⁻¹. On the other hand, the EtOH 80% seed extract resulted in 43% nematode mortality and EtOH 80% leaves extract didn't show any nematode mortality. The extracts were then analyzed by LC-MS (positive ionization mode) to determine the chemical compounds responsible for the nematicidal and nematostatic effects. Three pyrrolizidine alkaloids were tentatively identified by comparing the fragmentation pattern with the previous reported in the literature^{3,4}: monocrotaline (**1**), monocrotaline N-oxide (**2**) and senecionine N-oxide (**3**). The EtOH 80% seeds extract presented compounds **1-3**, EtOH 80% leaves extract presented compounds **1** and **2**, while extract NaHCO₃ seeds extract presented compounds **1** and **3**. From the compounds identified by LC-MS, monocrotaline was the only one reported in the literature to demonstrate a nematicidal effect and could, therefore, be responsible for the effect observed in the present experiment. Monocrotaline was quantified by LC-MS technique, resulting in 2.19±0.13 µg mL⁻¹ for EtOH 80% leaves extract, 128.52±2.02 µg mL⁻¹ for EtOH 80% seeds extract and 12.87±0.86 µg mL⁻¹ for NaHCO₃ seeds extract. The extracts obtained presented interesting results aiming the nematode *H. glycines* control for soybean planting and the presence of pyrrolizidine alkaloids demonstrate their effectiveness in these assays.

References: ¹Jain, S. et al. PLoS ONE, v. 11, n. 7, p. 1–13, 2016. ²Oka, Y. Applied Soil Ecology, v. 44, n. 2, p. 101–115, 2010. ³Avula, B. et al. Food Chemistry, v. 178, p. 136–148, 2015. ⁴Ruan, J. et al. Journal of Mass Spectrometry, v. 47, p. 331–337, 2012.

Acknowledgments

The authors acknowledge Fundação Araucária, CNPq and FAPESP for the financial support.

Área: MAT*(Inserir a sigla da seção científica para qual o resumo será submetido. Ex: ORG, BEA, CAT)***Nº de Inscrição: 00927***(Inserir o número de inscrição do autor que fez a submissão)*

Temperature, pressure and volume relationship in the crystallization process of TiO₂ anatase by hydrothermal synthesis.

Marcelo H. Armoa (PQ),¹ Miguel Jafelicci Jr. (PQ),² Laudemir C. Varanda (PQ),³

mharmoa@gmail.com

¹Faculdade de Tecnologia Nilo De Stéfani de Jaboticabal, CEETEPS; ²Departamento de Físico-Química, Instituto de Química de Araraquara, UNESP; ³Instituto de Química de São Carlos – USP.

Palavras Chave: *nanoparticles; photocatalist; crystallite size; particle size.*

Highlights

Physical-chemistry characterization of nanoparticles; anatase grow and nucleation rate; comparison between crystalline structure parameters.

Resumo/Abstract

TiO₂ nanoparticles with high crystallinity was obtained by (i) Ti⁰ oxidation by hydrogen peroxide in alkaline medium, and (ii) heating of resulting solution from (i) at 343,15 K were prepared and subsequent hydrothermal treatment of the precursor colloidal dispersion. The time, pressure (2 – 25 atm), fill degree of the reactor (40 – 95 %) and the temperature (393,15 – 503,15 K) were controlled in order to understand the synthetic process. X-ray diffractions (XRD) and transmission electron microscopy (TEM) techniques were used to verify the influence of the relation between the state variables in the crystallization process of anatase, establishing the contour conditions. It was verified that anatase nanoparticles with different sizes determined by BET (d_{BET}) and TEM (d_{TEM}), respectively, and average crystallite size (t_c) were obtained varying the synthesis conditions. The crystallization process can be favored by isochoric increase of the pressure, isobaric increase of the temperature or by isothermal decrease of pressure. It is considered that these relationships are as important for the intended chemical transformation process as other variables such as pH, ionic strength, type of electrolyte used or aging time, widely discussed in the literature as a way to control the properties of the system as crystallinity, presence and proportion of crystalline phases, particle size and shape, surface area and other physical-chemical properties of these materials. Materials based on titanium dioxide can be used in heterogeneous catalysis, photocatalysis, surface wettability control, transmembrane permeability control and other technological applications.

Agradecimentos/Acknowledgments

Instituto de Química de Araraquara (UNESP); CAPES;

Área: ANA

Nº de Inscrição: 00929

Correlation between the thermal behavior of trivalent lanthanides and yttrium isonicotinate and the lanthanide contraction

Wilhan D. G. Nunes* (FM),¹ **José A. Teixeira** (FM),² **André L. C. S. do Nascimento** (PG),² **Massao Ionashiro** (PQ),^{3,4} **Flávio J. Caires** (PQ)

wilhan.nunes@ifro.edu.br

¹Instituto Federal de Rondônia – IFRO, Campus Ji-Paraná, Ji-Paraná, RO, Brazil; ²Instituto Federal do Paraná – IFPR, Campus Paranavaí, Paranavaí, PR, Brazil; ³Universidade Estadual Paulista (Unesp), Instituto de Química, Araraquara, SP, Brazil; ⁴Universidade Estadual Paulista (Unesp), Faculdade de Ciências, Bauru, SP, Brazil.

Palavras Chave: Analytical chemistry, Thermal analysis, Thermogravimetry, Rare earth metals, Inorganic synthesis

Highlights

The lanthanides isonicotinate were synthesized. Thermal and spectroscopic study was carried out. The behavior of the compounds was correlated with the ionic radius of the trivalent lanthanides' series.

Abstract

The present work aims at the synthesis, characterization and thermoanalytical study of isonicotinate of lanthanum (III), cerium (III), praseodymium (III), neodymium (III), samarium (III), europium (III), gadolinium (III), dysprosium (III), holmium (III), erbium (III), thulium (III), ytterbium (III), lutetium (III) and yttrium (III). The synthesis was carried out by precipitation, having as precursors the isonicotinic acid, and the oxides of the respective metals. The characterization of the obtained compounds was carried out using classical analytical methods, and the techniques of thermogravimetry and simultaneous differential scanning calorimetry (TG-DSC), absorption spectroscopy in the infrared (IR) region with Fourier transform (FTIR), coupled thermogravimetry infrared absorption spectroscopy (TG / FTIR), differential scanning calorimetry (DSC), and X-ray diffraction by the powder method (XRD). The TG-DSC provided the stoichiometry of the compounds as $\text{Lu}(\text{IN})_3$ and $\text{Ln}(\text{IN})_3 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$, as well as unreported information of thermal behavior. The TG-FTIR showed that during decomposition there is the release of NH_3 , CO e CO_2 gases, and that the metal ion do not influence this behavior. From DSC and DSC-photovisual the dehydration enthalpies were measured, and the reversibility solid phase transitions for Eu, Gd, Tb and Dy compounds was confirmed, since in the cooling cycle of the experiment, an exothermic peak is observed for all compounds. From these data it was also possible to observe a correlation between the ionic radius of the lanthanides and yttrium metals and dehydration enthalpies, which increases from La to Sm. The Eu, Gd, Tb and Dy compounds showed a particular behavior, probably due to its crystalline structures being different from the others, which may also be the reason of the phase transitions observed in DSC. From Ho to Yb metals there is the lowering of dehydration enthalpies possibly due to steric effects of the ligands, with the contraction of the ionic radius of the metal with increase of the atomic number in the lanthanide series. Infrared absorption data suggest that isonicotinate is coordinated through the carboxylate group, acting as a bidentate ligand towards trivalent lanthanide ions and yttrium. There is evidence of two different coordination modes only for the lutetium compound (bridge bidentate and chelating) due to the splitting of the respective absorption bands of carboxylate functional group, although there are reports in the literature that the gadolinium, terbium, dysprosium, and erbium isonicotinate having the same stoichiometry as the compounds reported here, have both chelating and bridging ligands¹⁻⁵. In this way this work contributes to the understanding of the influence of lanthanides' contraction on the behavior of the coordination compounds in which they participate as metal centers.

References: ¹Abdul'minev, I. K.; Aslanov, L. A.; Porai-Koshits, M. A.; Chupakhina, R. A. *J. Struct. Chem.* 1973, 14 (2), 348–350. ²Chen, F.-Y.; Wu, W.-T.; Liu, F.; Yao, L.; He, S.-Y. *Acta Crystallogr. Sect. E Struct. Reports Online* 2007, 63 (8), m2151–m2152. ³Ma, L.; Evans, O. R.; Foxman, B. M.; Lin, W. *Inorg. Chem.* 1999, 38 (25), 5837–5840. ⁴Naumova, M. I.; Manicheva, E. A.; Geraski, O. A.; Fedin, V. P. *Russ. Chem. Bull.* 2009, 58 (9), 1858–1865. ⁵Wang, G.; Xu, B.; Liu, H.-L.; Zheng, Q.-H. *Acta Crystallogr. Sect. E Struct. Reports Online* 2006, 62 (11), m2952–m2954.

Acknowledgments

The authors thank FAPESP (Proc. 2017/14936-9 and 2018/12463-9), CNPq (Proc.421469/2016-1) and CAPES foundations (Brazil) for financial support.

42ª Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química: Eixos Mobilizadores em Química

Área: MAT

(Inserir a sigla da seção científica para qual o resumo será submetido. Ex: ORG, BEA, CAT)

Nº de Inscrição: 00930

(Inserir o número de inscrição do autor que fez a submissão)

Síntese de um Cristal Líquido Discótico Nemático Luminescente contendo 2,1,3-benzotiadiazol e 1,3,4-oxadiazol

Anielle Eiseler (IC), Saul Ovalle (PQ), Marli Ferreira (PQ), Hugo Gallardo (PQ).

anielleeiseler@hotmail.com; hugo.gallardo@ufsc.br

Department of Chemistry, Federal University of Santa Catarina, Florianópolis, Brazil.

Keywords: Benzothiadiazole, 1,3,4-oxadiazole and Liquid Crystal.

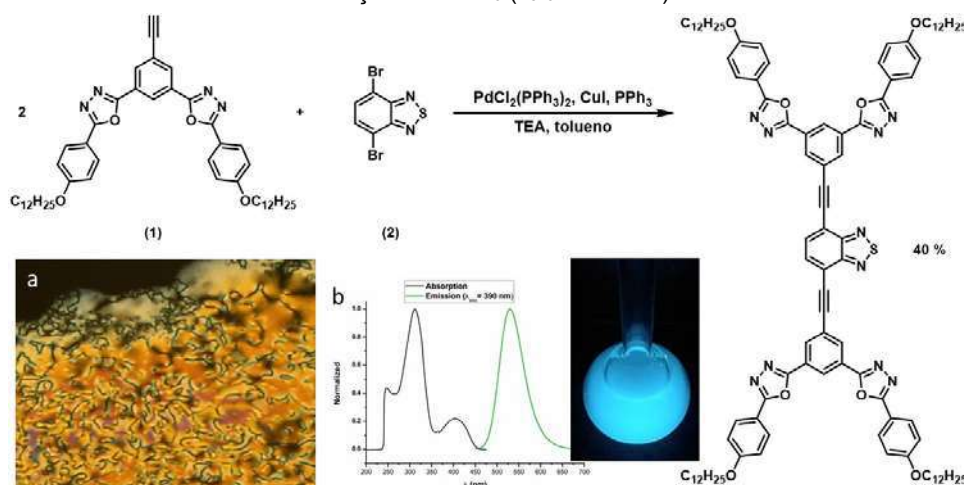
Highlights

Design and synthesis of a Luminescent Discotic Nematic Liquid Crystal containing 2,1,3-benzothiadiazole and 1,3,4-oxadiazole. The Liquid Crystal shows strong luminescence with a green light emission. The quantum yield is 0.63 (relative to the standard Coumarin 153). The target compound exhibit enantiotropic discotic nematic mesophase.

Resumo/Abstract

Os cristais líquidos luminescentes são importantes materiais orgânicos com a propriedade de fluidez, auto-organização e luminescência; estes materiais podem ser aplicados em OLEDs,¹ sensores, semicondutores,² etc. O 2,1,3-benzotiadiazol³ e o 1,3,4-oxadiazol⁴ são alguns dos heterociclos utilizados como fluoróforo e unidades aceitadoras de elétrons para obtenção de materiais luminescentes e semicondutores. No presente trabalho foi sintetizado e caracterizado um novo cristal líquido contendo os heterociclos 1,3,4-oxadiazol e 2,1,3-benzotiadiazol conectados por fenilacetilenos como é apresentado na Figura 1. O composto-alvo foi sintetizado através do acoplamento de Sonogashira entre o fenilacetileno, contendo o 1,3,4-oxadiazol (1), e o 4,7-dibromobenzo[c][1,2,5]tiadiazol (2) com bom rendimento. As propriedades mesomórficas foram estudadas por microscopia óptica de luz polarizada, sendo encontrada uma mesofase enantiotrópica do tipo nemática discótica. As caracterizações fotofísicas foram realizadas por espectroscopia de UV-Vis e Fluorescência. O composto apresenta um deslocamento de Stokes de 218 nm com uma forte emissão de luz verde e um rendimento quântico de 0,63 relativo à cumarina 153 ($\Phi_{std} = 0,544$).

Figura 1. Síntese do Cristal Líquido Luminescente. a) Fotomicrografia da fase nemática em 155 °C durante o resfriamento a partir do líquido isotrópico. b) Espectro de absorção e emissão normalizados do composto juntamente com uma foto do material fluorecendo em solução de CHCl₃ ($\lambda_{exc} = 365$ nm).



¹ DE, J. et al. *ACS Applied Materials & Interfaces*, 2019. 10.1021/acsami.8b18749.

² SERRANO, J. L. et al. *J. of Materials Chemistry C*, 2019. 10.1039/C8TC06142D.

³ BENEVIDES, T. O. et al. *Dyes and Pigments*, 2019. v. 163, p. 300-307.

⁴ SHARMA, V. S. et al. *New Journal of Chemistry*, 2019. v. 43, n. 4, p. 1910-1925.

Agradecimentos/Acknowledgments

UFSC, INCT/CNPq/FAPESC e PROCAD pelo suporte financeiro.

42ª Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química: Eixos Mobilizadores em Química

METABOLOME PROSPECTION OF THE BIOLUMINESCENT FUNGUS *NEONOTHOPANUS GARDNERI*

Teresinha de Jesus A. S. Andrade¹ (PQ), Neyciano S. Machado² (PG), Maria D. A. Oliveira² (PG), Dulce H. S. Silva^{*3} (PQ), Lucas P. Dias⁴ (PQ), Conceição G. M. Castro⁴ (IC); Jioji N. Tabadravu⁵ (PQ), Joaquim S.C. Junior⁶ (PQ), Antonia M.G.L. Citó² (PQ)

¹aguiarte10@gmail.com; dulce.silva@unesp.br*

¹Nucleus of Applied Research to Sciences (NIAC), Federal Institute of Maranhão, Timon, Maranhão, Brazil; ²Federal University of Piauí, Department of Chemistry, Campus Ministro Petrônio Portela, Teresina, Piauí, Brazil; ³NuBBE, Institute of Chemistry, São Paulo State University (UNESP), Araraquara, SP, Brazil; ⁴Laboratory of Plant Proteins Defense, Department of Biochemistry and Molecular Biology, UFC-Federal University of Ceará (UFC); ⁵School of Forensic and Applied Sciences, Faculty of Science and Technology, University of Central Lancashire Preston, UK, ⁶Federal Institute of Piauí, Department of Chemistry, Campus Central, Praça da Liberdade, Teresina, Piauí, Brazil.

Palavras Chave: *Neonothopanus gardneri*, Bioluminescence, bioactivity, ROS production inhibition, antifungal, anticholinesterase

Highlights

Bioluminescent mushroom *Neonothopanus gardneri*

Chemodiversity of the fruiting body of *N. gardneri* and its biological activities.

Resumo/Abstract

Neonothopanus gardneri, a fungal species belonging to the Marasmiaceae family, has been described as the largest bioluminescent Brazilian fungus (OLIVEIRA et al., 2013). It is distributed throughout the Coconut Forests in Maranhão, Tocantins, Goiás and Piauí States, and grows near the base of palm trees (CAPELARI et al., 2011). In this work we have isolated and identified secondary metabolites of *N. gardneri* extracts and evaluated their biological potential. The fungi were collected, sanitized and extracted with methanol. The methanol extract (100 mg) was submitted to Sephadex LH-20 column chromatography eluted with MeOH and yielded nine fractions. The chromatographic profile by HPLC-DAD and purification of selected fractions 8 and 9 led to the isolation of compounds **1** (2.5 mg, NgF8) and **2** (5.9 mg, NgF9). Their structural elucidation was based on ESI-MS, IR, ¹H, ¹³C and 2D NMR. ESI-MS(+) of compound **1** presented a *m/z* 347.255 [M+Na+2H]⁺ peak, whereas the IR spectrum showed bands for hydroxyl (1272; 1072 cm⁻¹), carbonyl (1726 cm⁻¹) and N-H stretches (2121 and 1601 cm⁻¹). ¹³C NMR and DEPT spectra showed signals for 16 carbons consistent with two methyl groups, six methylenes, five methines and two carbonyls. ESI-MS(+) and ¹³C NMR data analyses led to the C₁₆H₂₆N₄O₃ molecular formula, and the structure of a hydrazine for compound **1**. ESI-MS (+) data for compound **2** showed a *m/z* 363.249 [M+Na+3H]⁺ peak, consistent with the molecular formula C₁₈H₂₇NO₅ which was confirmed by ¹³C NMR data. The IR spectrum showed bands for hydroxyls (1272 and 1073 cm⁻¹), carbonyl (1733 cm⁻¹), and amino acids stretches (2357 cm⁻¹). ¹³C NMR and DEPT spectra showed signals for 18 carbon atoms including two methyl groups, six methylenes, six methines and two carbonyls. The combined analysis of ¹H and ¹³C NMR spectra and 2D NMR experiments evidenced the structure of a peptide for compound **2**. The methanol extract showed strong antiradical activity towards DPPH and ABTS radicals when compared to positive and negative controls and mild inhibition of acetylcholinesterase enzyme. The induction of reactive oxygen species (ROS) generation and cell membrane integrity were also investigated using a *Saccharomyces cerevisiae* assay. Triggering of ROS production and also permeabilization of the membranes have been evidenced through fluorescence microscopic images of the treated yeast cells, along with alterations in the morphology of the cells, visualized by scanning electron microscopy. Furthermore, the antifungal potential of the crude extract was investigated against *Candida spp.*, and presented inhibitory activity on *C. tropicalis*. Such results evidence *N. gardneri* might represent an interesting source for bioprospection due to its chemodiversity and biological potential.

OLIVEIRA, A. G.; CARVALHO, R. P.; WALDENMAIER, H. E.; STEVANI, C. V., Bioluminescência de fungos: distribuição, função e mecanismo de emissão de luz. *Química Nova*, 36, 314-319, 2013.

CAPELARI, M.; DESJARDIN, D.E.; PERRY, B.A.; ASAI, T.; STEVANI, C.V. *Neonothopanus gardneri*: a new combination for a bioluminescent agaric from Brazil. *Mycologia*, 103, 1433–1440, 2011.

Área: INO

(Inserir a sigla da seção científica para qual o resumo será submetido. Ex: ORG, BEA, CAT)

Nº de Inscrição: 00932

(Inserir o número de inscrição do autor que fez a submissão)

Synthesis, structural characterization and photophysical properties of a new promising gold(I) antitumor and antibacterial coordination compound.

Lis R. V. Favarin (PG),¹ Leticia Barbosa (PG),¹ Heveline Silva (PQ),² Victor M. Deflon(PQ),³ Lucas Pizzuti(PQ)⁴, L. M. C. Pinto(PQ)¹ Gleison A. Casagrande(PQ)¹ gleisoncasag@gmail.com; lisregiane@hotmail.com;

¹Instituto de Química UFMS-MS; ²Departamento de Química UFMG-MG; ³Instituto de Química USP-São Carlos-SP, Departamento de Química- UFGD-MS;

Palavras Chave: (Gold metalodrugs, Pyrazolines, Luminescent materials)

Highlights

Synthesis, structural characterization and photophysical properties of a new promising Au^I antitumoral and antibacterial coordination compound. Luminescent compound presenting high cytotoxic effect against (BF16-F10) and (4T1) murine tumor cells and antibacterial action against resistant gram-positive strains of *S. aureus*. Potential biomarker gold compound with luminescence lifetime of 13,4 μs.

Resumo/Abstract

A new Au^I ([PPh₃)Au(L)]PF₆) coordination compound based on the heterocyclic pyrazoline ligand (L = 1-thiocarbamoyl-5-(4-methoxyphenyl)-3-phenyl-4,5-dihydro-1H-pyrazole) was synthesized and fully characterized by single crystal X-ray diffraction, elemental analysis, ¹H and ¹³C NMR measurements, UV-Vis and fluorescence lifetime which were supported by TD-DFT studies. The Au^I atom presented a linear geometry involving the P–Au–S coordination axis with 170.64(4)°. The pyrazoline ligand was complexed throughout the sulphur atom from the thiocarbamoyl moiety of the ligand and presented an Au–S bond of 2.295(121)Å. The UV-Vis measurements revealed two absorptions bands at ca. 250 nm and 325 nm related to the π → π* and LMCT electronic transitions. The first one arising from the IL (intraligand electronic transitions) of the aromatic rings and the latter is related to the charge transfer electronic transitions from the nonbonding electronic pairs of the sulfur atom to the electrophilic Au^I atom. This new compound presented a broad greenish-blue emission band (350 up to 500nm) when excited at λ_{exc} = 300nm in the dichloromethane solution and solid state with luminescence lifetime of 13,4 μs. The gold complex also presented high antitumor activity IC₅₀ of 1,3 ± 01 (μM) against (BF16-F10) cell line and MIC of 1,95 μg/mL against penicillin-resistant *S. Aureus*.

Agradecimentos/Acknowledgments

We thank to the CNPq, UFMS and FUNDECT-MS for financial support, L.R.V. Favarin and L. Barbosa thank to Capes for the scholarships.

Área: ELE N° de Inscrição: 935

H₂ electrochemical generation: On the opportunities and knowledge gaps of SO₂ catalytic oxidation

André H.B. Dourado (PG),¹ Renan L. Munhos (PG),¹ Norberto A. da Silva-Júnior (IC),¹ Vinícius del Colle (PQ),² Gabriel G. A. Carvalho (PQ),¹ Pedro V. Oliveira (PQ),¹ Hamilton Varela (PQ),³ Susana I. Córdoba de Torresi (PQ).^{1*}

dourado@iq.usp.br; storresi@iq.usp.br

¹Instituto de Química, USP; ²Departamento de Química, UFAL; ³Instituto de Química de São Carlos, USP

Key words: H₂ generation, SO₂ oxidation, IRRAS, Oscillations, Mechanism.

Highlights

Different mechanisms were observed for SO₂OR on Pt and Au.
Au presented non-linear behavior for SO₂OR.
IRRAS was used for the mechanistic proposition.

Resumo/Abstract

SO₂ is a poisonous pollutant that is often found in the atmosphere due to the use of fossil fuels; so that, the reduction of its emissions is in discussion in almost every energy agreement. However, the world atmosphere is already full of this gas that can injure the human health at very low concentrations, such as 5 ppm. With this in mind, a mitigation pathway for working out this problem and possibly transform SO₂ in a useful chemical, such as H₂SO₄ is desirable. By the electrochemical SO₂ oxidation reaction (SO₂OR) in aqueous media, the H₂ evolution, a highly desirable solar fuel, is possible to be observed as the counterpart reaction.

In this work, SO₂ oxidation was investigated by IRRA spectroelectrochemical measurements and the differences between Pt and Au electrodes could be observed. The mechanism proposed for Pt electrodes involves species that are not commonly cited in the literature as intermediates, like dithionate, S₂O₆²⁻. The formation of PtOH and PtO were confirmed as oxidized species for this surface. The situation observed for Au electrodes was completely different. The electrolyte chaotropicity influences on the nature of the adsorption bond Au-SO₂. In more chaotropic media, it takes place by the S atom, leading to the formation of S₂O₅²⁻, pyrosulfite as well as Au-SO₃ complex in solution. The higher the Au-S surface bond, the higher amount of S₂O₅²⁻ and Au-SO₃ are observed. Different mechanisms for different electrolytes are proposed for Au electrodes.

Acknowledgements: FAPESP (2015/26308-7, 2013/25592-8, 2017/09346-8), CNPq.

Área: AMB

Nº de Inscrição: 00936

INFLÊNCIA DO ÍON CLORETO NA FOTÓLISE SOLAR DO DICLOFENACO DE POTÁSSIO POR MEIO DE TESTES DE TOXICIDADE

Farias P. Oliveira (IC),¹ Gomes D. Sousa (IC),² CÁSSIA R.S. Paci (IC),³ Sávio A.M. Simões (PG),¹

priscilaf03@hotmail.com; diegogomees28@gmail.com; ritinhadipace@hotmail.com;
anderson_savio@hotmail.com

¹Graduanda em Química IFPB; ²Graduando em Química IFPB; ³Graduanda em Química IFPB; ¹Doutor em Química UFPB

Palavras Chave: FÁRMACOS, FOTÓLISE, DICLOFENACO DE POTÁSSIO, ÍONS CLORETO.

Highlights

INFLUENCE OF THE CHLORIDE ION IN THE SOLAR PHOTOLYSIS OF POTASSIUM DICLOFENAC BY MEANS OF TOXICITY TESTS

The study analyzed the influence of the inorganic chloride ion on the Solar Photolysis of Potassium Diclofenac in aqueous solution and on the Phytotoxicity of its degradation by products.

Resumo/Abstract

O consumo de produtos farmacêuticos por parte da população tem gerado uma maior contaminação do meio ambiente, em especial, do meio aquático, já que é possível encontrar resíduos de compostos farmacológicos na água (PINTO, 2011). Por serem encontrados em concentrações na faixa de $\mu\text{g.L}^{-1}$ e ng.L^{-1} , os fármacos são caracterizados como Microcontaminantes Orgânicos (NEALE *et al.*, 2011). Dentre estes contaminantes, o Diclofenaco de Potássio- farmaco classe rémedio, têm sido amplamente encontrado em matrizes aquáticas (KRAMER *et al.*, 2015). A radiação ultravioleta vem sendo usada no tratamento da água em processos de desinfecção e degradação dos contaminantes orgânicos por fotólise direta (MELO *et al.*, 2009). A literatura afirma que a presença dos íons cloretos no processo de fotólise, promove uma inibição na degradação desses fármacos. Com isso, o objetivo deste estudo foi avaliar a Influência do íon Cloreto na Fotólise Solar do Diclofenaco de Potássio por meio de testes de toxicidade aguda, utilizando sementes de Alfaca - *Lactuca Sativa* (CHARLES *et al.*, 2011). Os ensaios foram realizados em placas de petri, com 20 sementes do organismo teste, sobre papel de filtro embebido com 4 mL de uma solução preparada com diclofenaco ($0,0100 \text{ mg.L}^{-1}$) + cloreto de potássio ($0,0136 \text{ mg.L}^{-1}$) que ficaram cerca de 8 horas expostas ao sol. A partir dos dados obtidos calculou-se o índice de germinação (IG) de 30%, comprovando que o íon cloreto possuiu ação inibidora durante a degradação do diclofenaco, uma vez que retardou o crescimento e germinação das sementes de alface.

Agradecimentos/Acknowledgments

IFPB, PROFESSOR ANDERSON SÁVIO.

Área: ANA

Nº de Inscrição: 00938

ESTUDO DA OCORRÊNCIA DE METAIS TÓXICOS NA BACIA HIDROGRÁFICA DO RIO CUÍÁ, JOÃO PESSOA- PB

Diego Gomes de Sousa*(IC),¹ Débora Janine dos Santos Marques (IC),¹ Vilhena Letícia Silva Santos (IC),¹ Reynaldo Borges Galvão Serra (IC),¹ Antonio Cícero de Sousa (PG),¹ Gesivaldo Jesus Alves de Figueiredo (PQ)¹.

diegogomees28@gmail.com; debrinhajanine@gmail.com; vilhenaleticia@gmail.com;
reynaldoborges@gmail.com; antoniocicero1@yahoo.com.br; gesivaldojesus@gmail.com

¹Licenciatura em Química-IFPB, Campus João Pessoa-PB

Palavras Chave: *Qualidade de água, Metais tóxicos, Poluição aquática.*

Highlights

STUDY OF THE OCCURRENCE OF TOXIC METALS IN THE HYDROGRAPHIC BOWL OF RIO CUÍÁ, JOÃO PESSOA- PB. Water Quality, Toxic Metals, Water Pollution. The studies of heavy metals reveal that the river does not meet the class 2 the Legislation 357/2005 of the CONAMA. Under these conditions the river is in an environmental state of alert.

Resumo/Abstract

Os metais são lançados nos ecossistemas aquáticos de maneira natural ou artificial. Os aportes naturais são de fontes atmosféricas e precipitações pluviométricas, pela liberação e transporte a partir de rocha matriz ou do compartimento solo. Artificialmente, o aporte desses metais se dá por fontes antropogênicas de diversos setores da indústria, de serviços, comércio, atividades agrícolas, rejeitos de área de mineração, efluentes industriais e domésticos, dentre outros. O rio Cuiá receptor dos efluentes da ETE-Mangabeira está localizado no setor sul da Cidade de João Pessoa-PB. Foi realizada em dezembro de 2017 uma campanha amostral em duplicatas em quatro pontos do rio, sendo um a montante (M11), um outro a jusante (J11) da ETE-Mangabeira e dois nas zonas de mistura (Z11 e Z21). O objetivo do trabalho foi analisar as concentrações dos metais, Cu, Cd, Pb e Fe e comparar com a Resolução 357/2005 do CONAMA. Os resultados das concentrações dos metais analisados estão apresentados na Tabela 1.

Tabela 1. Concentração em mg L⁻¹ de Cu, Cd, Pb e Fe na água do rio Cuiá

| Pontos/Resolução | Concentração (mg L ⁻¹) | | | |
|------------------|------------------------------------|---------|---------|----------|
| | Cu (II) | Cd (II) | Pb (II) | Fe (III) |
| Z11 | 0,40 | 0,18 | 0,27 | 0,00 |
| Z21 | 0,01 | 0,19 | 0,26 | 0,00 |
| M11 | 0,02 | 0,18 | 0,31 | 0,82 |
| J11 | 0,02 | 0,19 | 0,31 | 0,66 |
| CONAMA 357/2005 | 0,013 | 0,01 | 0,033 | 5,0 |

Estes resultados revelam que no baixo curso do rio não atende a classe 2 da Legislação 357/2005 do CONAMA para os metais Cu, Cd e Pb, indicando que o mesmo se encontra em estado de alerta ambiental o que leva a necessidade de uma avaliação quanto a sua classificação e disponibilidade de uso de suas águas.

Agradecimentos/Acknowledgments

Ao IFPB pelo suporte técnico para execução do trabalho e ao CNPq pela concessão da bolsa de iniciação científica do estudante.

2D Nanocomposite: High quality graphene oxide (HQGO) and cobalt oxide (Co₃O₄-2D), possible applications in energy storage

Danilo A. Nagaoka (PG),^{1,2} Sergio H. Domingues (PQ),^{1,2*}

danilo.nagaoka@gmail.com; shdomingues@mackenzie.com

¹MackGraphe – Graphene and Nano-materials Research Center, São Paulo, Brazil, Mackenzie Presbyterian University, São Paulo, Brazil; ²Engineering School, Mackenzie Presbyterian University, São Paulo, Brazil.

Key words: High quality graphene oxide, two-dimensional cobalt oxide, nanocomposite.

Highlights

A solvothermal synthesis of a high-quality graphene oxide and two-dimensional cobalt oxide nanocomposite applied in energy storage field.

Abstract

Graphene oxide (GO) and reduced graphene oxide (rGO) brought different applications in energy related areas, due their unique structure (two-dimensional-2D) and brand-new properties (e.g. capacitive material, high cyclability, processability). Transition metal oxides (TMOs) also present several applications in the energy storage field, due to its pseudocapacitive behavior, but usually shows lack in stability/cyclability. To enhance the electrochemical properties of these materials, it would be interesting to develop a nanocomposite between TMOs and a high-quality GO (HQGO). In this work we show the possibility to obtain a nanocomposite between high quality graphene oxide and a two-dimensional cobalt oxide. Using a modified Hummers method¹ we synthesized the GO with a well-preserved structure ($I_D/I_G \pm 0.43$), in turn, the 2D cobalt oxide was synthesized by a solvothermal approach². Both materials were characterized through several techniques (SEM, Raman, XRD, FTIR) showing unique structures. The HQGO/Co₃O₄-2D nanocomposite was synthesized by a simple approach in the solvothermal method used before, inserting some amount of HQGO dispersion in the solvothermal system. The nanocomposite was characterized and the Figure 1 shows (a) the SEM image followed by the EDS attesting the presence of the carbon, cobalt and oxygen and (b) the Raman spectrum presenting, simultaneously, the bands related to the both materials.

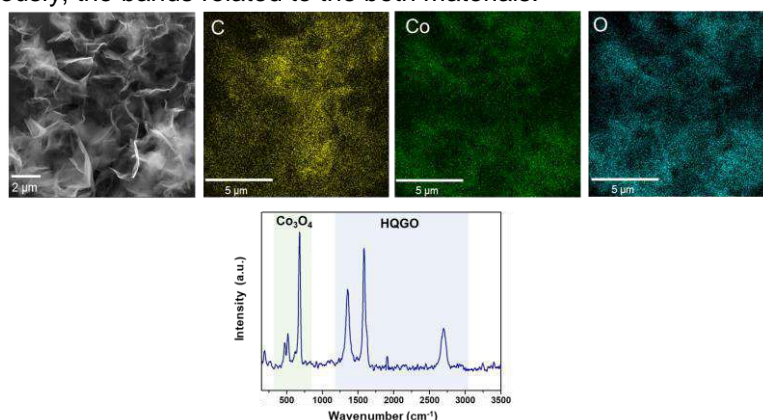


Figure 1 – (a) SEM and EDS images and (b) Raman spectra of HQGO/Co₃O₄-2D nanocomposite.

The electrochemical performance was verified, and the nanocomposite presented an increment in the capacitance when compared to the neat materials, indicating the possibility of using it in energy storage systems.

Acknowledgments: Presbyterian Mackenzie University (UPM), CAPES, INCT of Carbon Nanomaterials, GQM-UFPR, LNNano, CNPq (403544/2016-5) and FAPESP (2017/21988-5). **References:** [1] Hummers, W. S.; Offeman, R. E., Preparation of Graphitic Oxide. *Journal of the American Chemical Society* 1958, 80 (6), 1339-1339. [2] Xiao, X.; Song, H.; Lin, S.; Zhou, Y.; Zhan, X.; Hu, Z.; Zhang, Q.; Sun, J.; Yang, B.; Li, T.; Jiao, L.; Zhou, J.; Tang, J.; Gogotsi, Y., Scalable salt-templated synthesis of two-dimensional transition metal oxides. *Nature communications* 2016, 7, 11296.

Área: EDU

Nº de Inscrição: 49174

Utilizando a paródia como ferramenta facilitadora no ensino de Química

Rita C.S Di Pace (IC),¹ Diego G. Sousa (IC),² Elaine S. Vasconcelos (PG)

rita.pace@academico.ifpb.edu.br; diegogomees@gmail.com; elainesvquimica@hotmail.com

Licenciatura em Química, IFPB; ¹Licenciatura em Química, IFPB; ²Doutoranda, IFPB.

Palavras Chave: *Paródia, Música, Ensino, Química, Educação.*

Highlights

Using parody as efficient tool in the teaching of chemistry.

The present study aims to demonstrate a differentiated didactic tool, the use of parodies with students' daily songs, in order to facilitate the process of teaching and learning.

Resumo/Abstract

O uso de recursos didáticos diversificados é uma tentativa de superar o desinteresse pela disciplina de Química, pois grande parte dos alunos considera tal disciplina como de difícil compreensão, pelo fato de conter cálculos, fórmulas, regras, e conseqüentemente, acabam criando obstáculos e uma ideia de que essa Ciência é algo abstrato, cansativo e complexo, o que acarreta a falta de integração no cotidiano desses discentes. Uma alternativa promissora é o uso da linguagem musical na educação científica. Tal processo educativo conduzido pelo uso desse recurso pode proporcionar aulas mais dinâmicas e motivadoras, capazes de transmitir conhecimentos científicos, como também desenvolver habilidades para a produção textual e comunicação, além de auxiliar o aluno a pensar criticamente. É importante ressaltar que, a música tem uma presença significativa na vida do aluno, podendo auxiliar no aprendizado científico. Portanto, o presente estudo tem como objetivo demonstrar uma ferramenta didática diferenciada, o uso de paródias com músicas do cotidiano dos alunos, no intuito de facilitar o processo de ensino e aprendizagem sobre o conteúdo: atomicidade. Este estudo foi desenvolvido e aplicado em uma turma do 1º ano do Ensino Médio, de uma escola estadual (Sesquicentenário), localizada na cidade de João Pessoa, Paraíba. Este trabalho foi baseado no método qualitativo e os resultados foram bastante construtivos, com uma participação intensa dos alunos, muita descontração e alegria durante a aplicação da atividade, a qual apresentou uma ótima eficácia na assimilação do conteúdo químico associado à linguagem musical.

Agradecimentos/Acknowledgments

IFPB | SESQUICENTENÁRIO

Área: ORG

Nº de Inscrição: 00942

Synthesis and characterization of tetraaryl-1,4-dihydropyrrolo[3,2-b]pyrroles derivatives for potential application in solar cells.

Lais Cristina Augusto (IC)^{1*}, Giovanni Carvalho dos Santos (PG)¹, Lucas Michelão Martins (PQ)¹, Bruna Andressa Bregadiolli (PQ)¹, Paula B. Oshiro (PG)¹ and Luiz Carlos da Silva-Filho (PQ)¹.

laismonique2014@gmail.com; luiz.carlos@unesp.br

¹ Chemistry Department, Faculty of Sciences, UNESP-Bauru, Av. Eng. Luiz Edmundo Carrijo Coube, 14-01, CEP 17033-360, Vargem Limpa, Bauru, S.P, Brazil

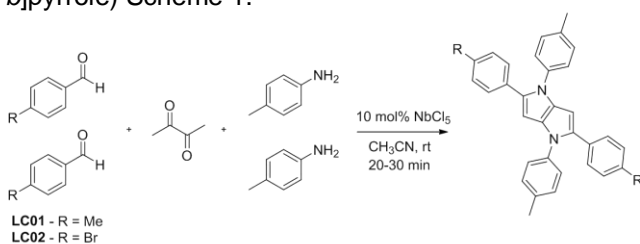
Keywords: Niobium pentachloride, Multicomponent reactions, Fluorescence, Heterocycles.

Highlights

Solar cells have emerged as a promising form of clean, renewable and efficient energy to reduce the use of fossil fuels, non-renewable and pollutants. The development of devices that convert sunlight into electricity using new organic materials, efficient and low cost, has aroused interest in the scientific community. In this context, perovskite solar cells have presented high and increasing values of efficiency. The most common material used as hole transport in those devices, the spiro-O-MeTAD, has been a bottleneck to develop cheap and stable devices, since it has high commercial value and is unstable to atmospheric oxygen. In this work we present the synthesis of tetraaryl-1,4-dihydropyrrolo[3,2-b]pyrroles derivatives with potential to be applied as hole transport material.²

Abstract

The synthesis of tetraaryl-1,4-dihydropyrrolo[3,2-b]pyrroles derivatives have been made by a multicomponent reaction (MCR) catalyzed by niobium pentachloride, using aniline and benzaldehyde derivatives as starting materials to achieve the products LC01 (1,2,4,5-tetra-*p*-tolyl-1,4-dihydropyrrolo[3,2-b]pyrrole), and LC02 (2,5-bis(4-bromophenyl)-1,4-di-*p*-tolyl-1,4-dihydropyrrolo[3,2-b]pyrrole) Scheme 1.



Scheme 1: Synthesis of LC01 and LC02 in the presence of NbCl₅.

The molecules were synthesized in good yield 83% LC01 and 78% LC02 and were characterized according with their structure (RMN and FTIR) and photophysical properties (UV-Vis absorbance and fluorescence spectroscopy), shown in Figure 1.

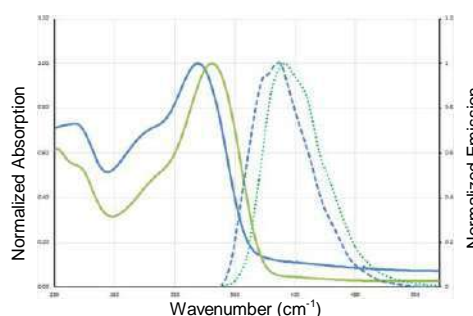


Figure 1: Normalized absorption (line) and emission (dashed) of compounds LC01 (blue) and LC02 (green).

The bathochromic effect in the emission of LC01 and LC02 (418 to 420 nm) may be due to the bromine inductive effect in the aldehyde *p*-position stabilizing the excited state.¹

The results suggest that the obtained products have potential to be applied in organic electronics, such as hole transport materials in solar cells. However, this work will be extended in order to vary the ligands and electrochemical measurements will be made in order to tune the products to have the desired properties for applications.

References:

- [1] Martins, L. M. *et al.* Improved synthesis of tetraaryl-1,4-dihydropyrrolo[3,2-b]pyrroles a promising dye for organic electronic devices: An experimental and theoretical approach. *Dye. Pigment.* **148**, 81–90 (2018).
[2] Kumagai, T., Tanaka, S. & Mukai, T. Synthesis of 1,4-dihydropyrrolo[3,2-b]pyrrole. *Tetrahedron Lett.* **25**, 5669–5672 (1984).

Acknowledgments

FAPESP, CAPES, CNPQ, PROPE-UNESP e CBMM

Área: EDUNº de Inscrição: 00943

Oficina Pedagógica: uma metodologia para a Alfabetização Científica no Ensino Fundamental em uma escola particular em Belém-PA

Julison T. Melo (IC),¹ Gabriela M. S. Trindade (IC),^{1*} Carla. R. O. Carneiro (IC),¹ Jamilly S. de A. Moreira (PG),¹ Ionara A. Terra (PQ).¹

julisonmelo52@gmail.com; gabrielatrindadems@gmail.com

¹Departamento de Ciências Naturais, UEPA.

Palavras Chave: *Oficinas Pedagógicas; Alfabetização Científica; Ensino de Ciências.*

Highlights

Pedagogical workshop: a methodology for the scientific literacy in elementary school in a private school in Belém – PA. Problems of familiarity with scientific concepts should be worked in basic education, in order to promote scientific literacy through innovative methods.

Resumo/Abstract

Ao introduzir os conceitos de Ciências no ensino fundamental observa-se que os discentes apresentam problemas de familiaridade com este assunto, dificultando iniciar a interação com o tema e/ou manipular conceitos científicos básicos, segundo as perspectivas dos autores Borges (2004), Insausti e Merino (2000), Sére (2002) e Silva e Zanon (2000). Esta dificuldade na construção do conhecimento é muitas vezes negligenciada, na qual a alfabetização científica não é promovida, pois os alunos são instruídos a repetir conceitos sem compreender e interagir com o tema proposto em sala de aula. Desta maneira, é preciso priorizar o trabalho pedagógico voltado à inovação no ato de ensinar e esta deve ser pauta prioritária para os educadores já nas séries iniciais do ensino fundamental. Nesta perspectiva, foi realizada, como instrumento de pesquisa, uma oficina pedagógica com 24 alunos de diferentes séries do ensino fundamental menor da Escola Sagrado Coração de Jesus em Belém do Pará. Na oficina pedagógica foram abordados conceitos de ciências com ênfase em química, cujos temas foram apresentados através de recursos didáticos, voltados para tal faixa etária, como: teatro de fantoches, demonstração de vídeos infantis e experimentação, sendo a mesma realizada em três momentos. No primeiro momento, executou-se uma socialização com os alunos para análise prévia das aspirações dos alunos sobre o conhecimento de ciências, foi observado que 70% dos alunos viam a ciência como algo distante de seu cotidiano, apenas 20% conseguiram associar ciências com fatores em seu cotidiano e os 10% restantes não expuseram sua opinião. No segundo momento, foi realizada uma oficina com atividades que estimulassem a observação crítica e reflexiva do aluno, através da contextualização do conhecimento, a partir de experimentos em que os alunos participavam de práticas simples relacionando-as ao seu cotidiano. E no terceiro momento, os discentes participaram diretamente de práticas experimentais, tais como: preparação de perfumes e massa de modelar caseira cujo objetivo foi aguçar a curiosidade e familiarizá-los aos conceitos iniciais de química, presente em seus materiais didáticos letivos e seu cotidiano. O resultado obtido, a partir da observação, deve-se ao fato que houve 100% de envolvimento, participação e interesse dos alunos nas atividades propostas durante a oficina, os mesmos passaram a entender que ciência está presente no seu dia a dia, pois segundo os Parâmetros Curriculares Nacionais, o aprendizado de química pelos alunos implica que eles compreendam as transformações químicas que ocorrem no mundo físico de forma abrangente e integrada e assim possam julgar com fundamentos as informações advindas da tradição cultural, da mídia e da própria escola e tomar decisões autonomamente, enquanto indivíduos e cidadãos (BRASIL, 1999, p. 31). Portanto, tal estudo, corrobora com a literatura, demonstrando que práticas pedagógicas, diferentes de métodos tradicionais de ensino, podem ser efetivas para a alfabetização científica.



Figura 1: Aplicação da Oficina Pedagógica na Escola Sagrado Coração de Jesus em Belém – PA.

Agradecimentos/Acknowledgments

À Escola Sagrado Coração de Jesus, à Universidade do Estado do Pará, à Professora Doutora Ionara Antunes Terra, por nos proporcionarem apoio para a realização do projeto.

Optimization of a DLLME/magnetic ionic liquid-based technique for the determination of multiclass organic compounds in urine by HPLC-DAD

Gabrieli Bernardi (PQ),¹ Gabriela Corazza (PG),¹ Camila Will (PG),¹ Gabriela Mafra (PG),¹ Eduarda O. O. Nascimento (PG),¹ Josias Merib (PQ)², Eduardo Carasek (PQ)¹

gabrieli.bernardi@gmail.com

¹Departamento de Química, Universidade Federal de Santa Catarina (UFSC), ²Departamento de Farmacociências, Universidade Federal de Ciências da Saúde de Porto Alegre

Palavras Chave: *Magnetic ionic liquid, Organic compounds, DLLME, Biological samples*

Highlights

Magnetic ionic liquids (MILs) combine unique properties of ionic liquids with magnetism
A HPLC-DAD method for a multiclass analysis of organic compounds in urine was optimized
Experimental design was used for optimization considering several parameters
Small volumes of urine sample and organic solvent are required

Abstract

Pharmaceuticals and hormones are widely used for health applications and ingested by humans. However, are not easily metabolized by the living organisms and therefore found in urine. Humans are also exposed to many pollutions sources like agricultural practices, being responsible for contamination with numerous compounds such as pesticides. These noxious compounds, present in the organism, have been correlated to several diseases like cancer. Due to this, there is a growing concern in monitoring these compounds in biological matrices such as urine. Based on that, the aim of this work was to optimize a fast and easy method able to determine simultaneously pharmaceuticals, hormones and pesticides from urine using magnetic ionic liquid as extraction phase for dispersive liquid-liquid microextraction (DLLME/MIL-based) and HPLC-DAD. The main parameters affecting the extraction of different organic compounds from urine using DLLME/MIL-based were studied. The analyses were performed in a HPLC-DAD system. Separation was achieved in a C18 column (5.0 μm , 4.6 mm, 250 mm) in the RP mode. Gradient method was carried out with 40% of mobile phase A (acetonitrile + 0,1% formic acid) and 60% of mobile phase B (water + 0.1% formic acid) as initial condition. The percentage of mobile phase A was linearly increased to 70% and the mobile phase B was decreased to 30% from 5 min to 30 min. Due to matrix complexity, initially, a urine dilution was evaluated using a dilution factor of 10, 20, 30 and 40. Then, a simplex-centroid design was applied in order to optimize the type of disperser solvent using methanol, acetonitrile and acetone. A number of variables can influence the extraction procedure. In this study, a central composite design with 17 experiments was performed to assess the influence of extraction time (30 to 120 s), volume of disperser solvent (5 to 20 μL) and the amount of MIL (5 to 20 mg). Geometric means of the chromatographic peak areas for all analytes were used to evaluate the experimental design. Finally, the influence of pH (2, 6 and 10) in the extraction efficiency was obtained in a univariate way. The magnetic ionic liquid (MIL), trihexyltetradecylphosphonium tetrachloromanganate (II) ($[\text{P}_{6,6,6,14}]_2[\text{MnCl}_4^{2-}]$) was used as extraction solvent and a magnetic rod was used to withdraw the MIL. Extractions were performed using 20 μL of ACN for the desorption of the MIL from the magnetic rod and were conducted in the concentration level of 500 $\mu\text{g L}^{-1}$. The best result for the sample dilution tests was obtained with the 30-fold dilution. A ternary surface was obtained from the simplex-centroid design for the disperser solvent evaluation and methanol was chosen. Results obtained with the central composite design demonstrated that the best condition was 20 μL of disperser solvent with an extraction time of 40 s using 20 mg of MIL. Evaluation of pH showed that when pH 2 was used higher areas was obtained for the studied compounds. Addition of salt was not evaluated due to numerous studies showing its addition is detrimental to extraction efficiency. Thus, the optimization of the method showed that evaluated parameters influence the extraction efficiency of the compounds. In addition, with the aid of experimental design it was possible to achieve the best conditions.

Acknowledgments

Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico - CNPq
Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior - CAPES

Synthesis of water-soluble peptide complexes of silver (I) and copper (II) for future phytopathogenic assays

Carlos A. F. Moraes (PG)^{1*}, Wilmer Villarreal (PQ)¹ and Maria Fátima das G. F. da Silva (PQ)¹

andre453@hotmail.com

¹Departament of Chemistry, Federal University of São Carlos, São Paulo, Brazil

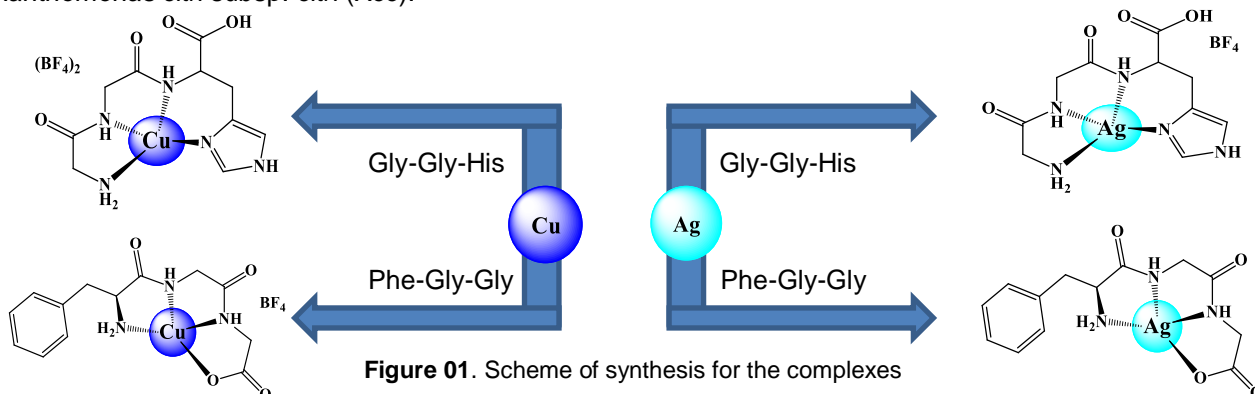
Keywords: Agrochemicals; Citrus pests, Complexes, green chemistry.

Highlights

Four complexes were prepared using green chemistry (only water) in the search of agrochemicals agents. Metals of the same group were used and their effect on phytopathogens will be developed.

Abstract

Brazilian agriculture is the basis of the economy, the money raised is invested in health, education, security, etc. Citrus is considered a fruit group important in Brazil, not only for the nutritional quality of the fruits, but also because of the social and economic function that it exerts as an export product¹. The synthesis and characterization of four complexes of tripeptides were developed using Phenylalanine-Glycine-Glycine and Glycine-Glycine-Histidine with copper tetrafluoroborate, and silver tetrafluoroborate. The complexes [Cu(PGG)]BF₄, [Cu(GGH)](BF₄)₂, [Ag(PGG)] and [Ag(GGH)]BF₄ were obtained with good yield.³ The silver is effective against more than 650 pathogenic organisms, with a broad spectrum of action² and copper has significant antimicrobial activity against pathogens³. The complexes were characterized using ¹H and ¹³C NMR 1D and 2D, infrared, ultraviolet and mass spectroscopy, comparing the ligand with the complex formed in order to propose the coordination site. The stability tests performed by NMR have shown that the compounds are highly stable. The candidates for agrochemicals will be tested against the main causes in citrus diseases such as *Candidatus Liberibacter americanus*, *Alternaria alternata*, *Xylella fastidiosa*, *Phyllosticta citricapa*, *Xanthomonas citri* subsp. *citri* (Xcc).



References

- [1]. OLIVEIRA, F. J. *et al.* Annual Seminar of Scientific Initiation, UFRA, 10, **2012**.
- [2]. YOON, *et al.* Science of the Total Environment, v. 373, p. 572–575. **2007**.
- [3]. SOULI M, *et al.* Journal of Antimicrobial Chemotherapy, v. 68, p. 852–857. **2013**

Acknowledgments



Área: _____ **Nº de Inscrição:** _____
(Inserir a sigla da seção científica para qual o resumo será submetido. Ex: ORG, BEA, CAT) (Inserir o número de inscrição do autor que fez a submissão)

Inserir o título aqui, letra Arial 14. O título deve ser claro e conciso, não ultrapassar duas linhas, parágrafo único (não teclar “enter” no título)

Miguel A. S. G. Barbará (PG)¹, Lucas C. V. Rodrigues (PQ)¹
masgb@iq.usp.br

¹Departamento de Química Fundamental, Instituto de Química, Universidade de São Paulo, SP, Brasil

Palavras Chave: Luminescência Persistente, *Band gap*, Silicatos de Cádmio, Terras Raras.

Highlights

Band gap influence in persistent luminescence. Comparison of o cadmium orthosilicate and metasilicate. Persistent luminescence mechanism proposed for Pr³⁺ ion.

Resumo/Abstract

Persistent luminescence (PeL) is a light emission phenomenon that last for long time after ceased irradiation, being a thermostimulated process. The excitation energy is stored in structural defects in the host and released when thermal energy is given. The mechanism depends on the position of dopants energy levels in bandgap, defects formation and bandgap energy¹.

There are few quantitative studies around how the isolated factors affect this phenomenon neither how to optimize or design new materials. We can explain the bandgap influence on luminescence by comparing the PeL properties of cadmium orthosilicate (Cd₂SiO₄) to the already described in literature cadmium metasilicate (CdSiO₃)²⁻⁵ with the same Cd site, differing only in their bandgap energies.

The non-doped and RE-doped Cd₂SiO₄ were prepared with solid-state synthesis at 1050 °C⁶. The characterization and phase purity were studied with X-ray diffraction techniques using Synchrotron radiation, confirming the pure Cd₂SiO₄:Pr³⁺ formation. Photoluminescence was studied with UV-Vis and VUV-UV emission and excitation spectroscopies. The bandgap was determined (4.1 eV) with excitation spectra of Cd₂SiO₄ and Cd₂SiO₄:Gd³⁺ (77 K). The excitation spectra of Cd₂SiO₄:Pr³⁺ and Cd₂SiO₄:Tb³⁺ allowed the comparison between the phases optical properties. The data showed that the mechanism cannot be via f-d transitions as in CdSiO₃. Thus we propose a new mechanism via exciton formation under band gap excitation.

[1] Dorenbos, P. J. Lumin. 108, (2004) p. 301–305.

[2] Rodrigues, L.C.V. et al., J. Mat. Chem. C 2 (2014) p.1612-1618.

[3] Rodrigues, L.C.V. et al., Phys. Scr. 89 (2014)

[4] Rodrigues, L.C.V et al., J. Phys. Chem. C 116 (2012) p.11232-11240.

[5] Liu, Y., Kuang, J., Lei, B., Shi, C. J. Mater. Chem. 15 (2005) 4025.

[6] G. D. Glasser, L.S. Glasser. Inorganic Chem. 3 (1964) 1228-1230.

Synthesis of nickel hydroxide and the interactions with carbon nanotubes

Jean Carlos Bassani (IC), Daniela Zambelli Mezalira (PQ).*

bassani.jean@gmail.com; daniela.z.m@ufsc.br

Departamento de Química, Universidade Federal de Santa Catarina (UFSC).

Keywords: Nickel Hydroxide, Carbon Nanotubes, Functionalization, Polyol Synthesis.

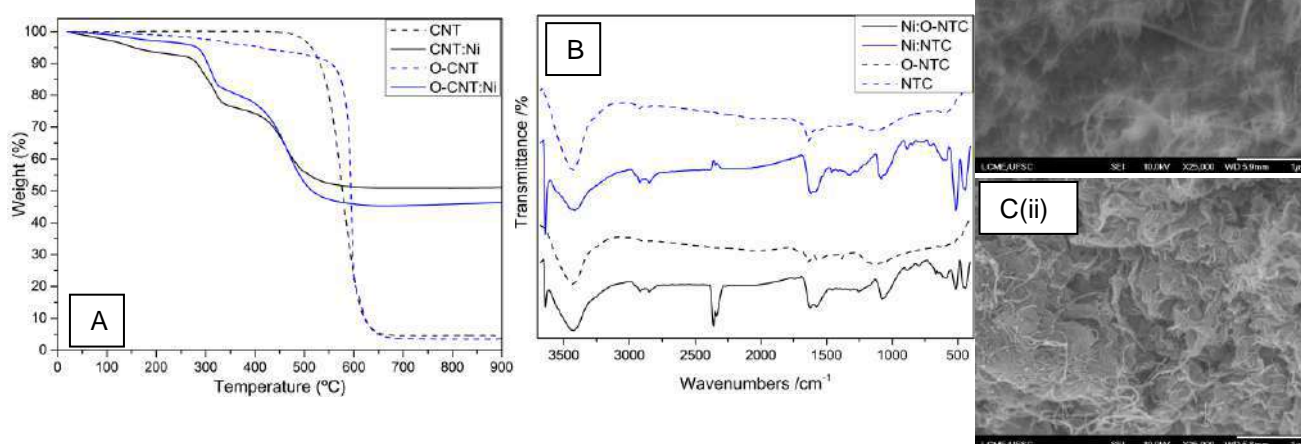
Highlights

Nickel hydroxide were successfully synthesized by the polyol method. Interaction with commercial and functionalized multiwall carbon nanotubes. Characterization by TGA, FTIR and SEM.

Abstract

It is already well known from the literature that carbon nanotubes (CNTs) exhibit excellent mechanical, electrical, and magnetic properties. Many studies have shown that the surface modification of carbon nanotubes increase, in a considerable way, the number of applications of this material in medicine, chemical industries and environmental areas¹. Materials containing nickel hydroxide ($\text{Ni}(\text{OH})_2$) also have several applications including electrochromic devices, catalytic promoters, electrochemical sensors and supercapacitors. In the present work, we report the synthesis of nickel hydroxide in the presence of commercial multiwall carbon nanotubes, functionalized or not. The functionalization was carried out by refluxing in $5 \text{ mol L}^{-1} \text{ HNO}_3$ at 100°C for 6 h. Nickel hydroxide was prepared via polyol method, at $190\text{--}195^\circ\text{C}$, in a ratio of 1:1 (CNT:Ni). Thermo gravimetric analysis (TGA), fourier transform infrared spectroscopy (FTIR) and scanning electron microscopy (SEM) characterizations were performed. The TGA curve showed two steps of weight loss at lower temperatures associated with the thermal decomposition of $\text{Ni}(\text{OH})_2$. The FTIR spectra show a narrow and strong band at 3632 cm^{-1} relating to the $\nu(\text{OH})$ stretching vibration, which is the characteristic of nickel hydroxide and strong bands around 500 cm^{-1} corresponds to the vibration of Ni–O bond.³ The SEM images show the morphology of materials synthesized.

Figure 1: (A) TGA, (B) FTIR spectra and (C) SEM image of $\text{Ni}(\text{OH})_2$ with (i) carbon nanotubes and (ii) functionalized carbon nanotubes.



¹FILHO, A. G. S. and FAGAN, S. B. Química Nova, 30 (2007) 1695-1703.

²TANG, Y. et al. Electrochimica Acta 161 (2015) 279–289.

³M. El-K. et al. Materials Science in Semiconductor Processing 16 (2013) 1747–1752.

Acknowledgments

UFSC, CAPES and CNPq for financial support and scholarship; LCME-UFSC and Central de Análises-QMC/UFSC for the free access to the necessary equipment.

INFLUÊNCIA DA SALINIDADE NA COMPLEXAÇÃO DE ARSENITO POR SUBSTÂNCIAS HÚMICAS DE TURFA

Aryanna Sany P. N. Costa (PG)^{*1}, Wander Gustavo Botero (PQ),¹ Josué C. C. Santos (PQ),¹ Daniela S. Anunciação (PQ),¹

daniela.anunciacao@iqb.ufal.br; aryannaspn@gmail.com

¹Laboratório de Instrumentação e Desenvolvimento em Química Analítica (LINQA), Instituto de Química e Biotecnologia – Universidade Federal de Alagoas (UFAL)

Palavras-chave: Substância húmica, Capacidade de Complexação, Força Iônica, Arsênio.

Highlights

Influence of salinity on the complexation of arsenite by humic peat substances

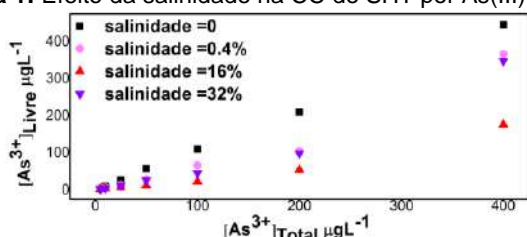
The complexing capacity of the SHTs by As(III) was increased with the addition of NaCl.

The variation of NaCl concentration influences the complexing capacity of the arsenite ions (As(III)) by SHT.

Resumo

Dentre as diferentes espécies de arsênio encontradas no ambiente natural, as inorgânicas (As(III), arsenito e As(V), arsenato) são cerca de 100 vezes mais tóxicas do que as orgânicas e dentre as duas espécies inorgânicas, As(III) é cerca de 60 vezes mais tóxicas do que As(V)¹. Essa toxicidade elevada aos organismos é decorrente da semelhança entre a química do arsenato e a do fosfato; e, no caso do arsenito, da sua capacidade em se ligar a grupos tióis presentes em algumas moléculas como a glutatona e a cisteína². Devido aos riscos que este elemento pode ocasionar, diferentes técnicas como complexação, adsorção, coagulação e floculação química, troca iônica, precipitação química dentre outras, vêm sendo utilizadas a fim de remover espécies de arsênio de ambientes naturais contaminados por este elemento. O presente trabalho teve como objetivo avaliar a capacidade de complexação (CC) das substâncias húmicas de turfa (SHT) por As(III) em diferentes teores de salinidade. Para tanto, a força iônica de soluções aquosas de SHT foi ajustada com diferentes concentrações de NaCl de modo a simular águas doce (0,4%), salobra (16%) e salina (32%), de acordo com a resolução CONAMA nº 430/2011. Após a interação entre a solução de As(III) e a SHT, o sistema foi submetido a uma ultrafiltração com fluxo tangencial, para separar o As(III) livre do As(III) complexado. O As(III) livre foi então determinado por espectrometria de fluorescência atômica com módulo de geração de hidretos (HG-AFS). A Figura 1, evidencia o efeito da força iônica na CC de As(III) por SHT o qual pode estar relacionado com o fato de antes da adição de NaCl, os íons constituintes da solução de SHT eram apenas H⁺, OH⁻ e As(III), em que os íons H⁺ e OH⁻ formavam uma atmosfera iônica ao redor do As(III). Ao adicionar 0,4% de NaCl, os íons Na⁺ e Cl⁻ presentes na solução podem ter proporcionado uma ruptura da atmosfera iônica ao redor do metal, para que se forme, também, uma atmosfera ao redor dos íons Na⁺ e Cl⁻, conseqüentemente, este metal pode ter se associado mais facilmente ao sítio de interação da SHT. Ao adicionar 16% de NaCl, pode-se observar uma maior CC ao comparar com 0,4%, evidenciando que o aumento dos íons Na⁺ e Cl⁻ proporcionou uma maior disponibilização dos sítios de interação da SHT, em virtude da solvatação dos íons do sal pela água. Por fim, ao adicionar 32% de NaCl, esperava-se que a CC fosse ainda maior, no entanto, o comportamento obtido foi semelhante a concentração de 0,4%. Sugerindo-nos que em altas concentrações de NaCl, já começasse ocorrer uma competição pelos sítios de interação da SHT, visto que, a diferença de CC só é pronunciada em altas concentrações havendo assim uma interação eletrostática entre íons Na⁺ e os sítios de interação da SHT. Como o sódio é um elemento de baixa probabilidade de formar complexos, devido à falta de orbitais d disponíveis, é possível que essa diferença de CC esteja relacionada à competição entre As(III) e Na⁺ pelos sítios de interação da SHT.

Figura 1: Efeito da salinidade na CC de SHT por As(III)



Agradecimentos



1. KESICI, G. G., *Journal of Otology*, v. 11, 2016.
2. PAUL, B.; SARKAR, A., *Chemosphere*, v. 158, 2016.

Área: MAT

Nº de Inscrição: 00951

Triclosan degradation by heterogeneous photocatalysis using Nb₂O₅ immobilized in bentonite clay

Elenice Hass Caetano (PG),¹ Juliana Regina Kloss (PQ),² Elaine Regina L. Tiburtius (PQ),¹ Vitor Sena Koseira (PG),¹ Sérgio Toshio Fujiwara (PQ).¹

julianakloss@utfpr.edu.br; elenicecaetano@hotmail.com

¹Chemistry Department, UEPG; ²Department of Chemistry and Biology, UTFPR

Palavras Chave: (Triclosan, Emerging pollutant, Bentonite clay, Photocatalysis, Niobium)

Highlights

Triclosan (TCS) is characterized as an emerging pollutant that, even at low concentrations, causes damage to the environment and can be carcinogenic, and its degradation is the objective of the work.

Resumo/Abstract

Nowadays, emerging contaminants have been received great attention, the TCS is characterized as an emerging pollutant, that can be found in medications, cleaning products and drugs.¹ In the last decades, the interest in the study of mineral clays has increased, due to the growing search for low-cost and abundant ecological materials. One of the technological applications of such materials consists on the treatment of contaminants containing heavy metals and organic compound; it is possible due to high adsorption capacity observed for mineral clays. Besides, the clays can be also employed on advanced oxidative processes (AOP) as host matrix for photocatalysts.² The Nb₂O₅ has band gap energy of 3.4 eV which makes it a promising for use in photocatalysis and show the advantage of be easily recovered and reused.³ Among the treatment methods stands out the heterogeneous photocatalysis once presents low cost and easy operability. Therefore, the objective of present manuscript consist on development of host matrix based on bentonite clay for Nb₂O₅, in order to test the use of such material in emerging pollutant triclosan degradation processes through heterogeneous photocatalysis. The materials were characterized by X-ray diffraction (XRD) and scanning electron microscopy by field emission (MEV-FEG). Then, the modified clay was immobilized in pellet form and tested in a degradation process of TCS into the reactor for teen minutes. In order to evaluate the effect of pH and mass of the catalyst was performed by a factorial design 2² with two levels (+ and -) (Table 1) and the final concentration of TCS was obtained by high efficiency liquid chromatograph (HPLC.)

Table 1- Factorial design 2²

| Factorial design 2 ² | | | |
|---------------------------------|----------------------|--------|---------|
| Factors | 1 pH | - 3.54 | + 10.84 |
| | 2 catalytic mass (g) | - 0.25 | + 0.50 |

Thereby, the results for analysis XRD and MEV-FEG proves that bentonite clay was converted into a host matrix for the Nb₂O₅. The partials results obtained for the tests of degradation of the TCS showed that the significant factor in the degradation was low pH level and factor mass showed negative effect. The interaction between both factors was not significant. The percentage of degradation of TCS in these conditions was 98%. Studies will be conducted to evaluate the toxicity of degradation residues.

¹ Koseira, V. S. Cruz, T.M. Tiburtius, E. R. Chaves, E.S. Triclosan degradation by heterogeneous photocatalysis using ZnO immobilized in biopolymer as catalyst. Journal of Photochemistry and Photobiology A: Chemistry. 344 (2017).

² Herney-Ramirez, J.; Vicente, M. A.; Madeira, L. M. Heterogeneous photo-Fenton oxidation with pillared clay-based catalysts for wastewater treatment. A review Applied Catalysis B: Environmental. 98 (2010).

³ Castro, D.C. Cavalcante, R. P. Jorge, J. Martines, M.U. Oliveira, L. C.S. Casagrande, G.A. Machulek, J. Synthesis and Characterization of Mesoporous Nb₂O₅ and Its Application for Photocatalytic Degradation of the Herbicide Methylviologen. Journal Brazil Society. 27 (2016).

Agradecimentos/Acknowledgments

CAPES, CNPq, UEPG, UTFPR, GDMIT, Clabmu.

A new bioinspired complex of Nickel(II): Synthesis, characterization and DNA studies.

Matheus dos S. S. Paqui (IC),^{1*} Gustavo Wander Streit (IC),¹ Michele do N. Tomaz (PG),¹ Fernando R. Xavier (PQ)¹

matheus.paqui@hotmail.com; fernando.xavier@udesc.br

¹Laboratório Síntese & Catálise – SINCA, Departamento de Química, Centro de Ciências Tecnológicas, Universidade do Estado de Santa Catarina – UDESC, Rua Paulo Malschitzky, s/n. Joinville SC, Brasil.

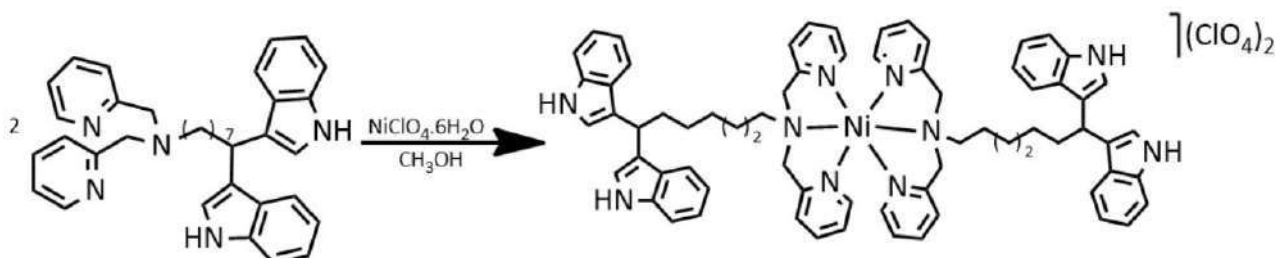
Keywords: Nucleic Acids, metal complexes, intercalant agents.

Highlights

Complexes can be designed in its synthesis to facilitate their recognition in biological systems. A novel nickel complex was prepared e characterized by spectroscopic and conductometric methods. Stability tests were performed, and the complex is stable in solution.

Abstract

Research into viable antitumor treatment pathways demonstrated the potential of the coordination compounds that can selectively interact with specific sites of the nucleic acid structure.[1] A ligand can be designed to interact with nucleic acid by intercalation between nitrogenous bases while the metal center itself can bind to electronegative sites of the DNA.[2] In this work, a novel nickel(II) complex was synthesized utilizing a bis(indolyl)methane containing ligand based on the already known antitumor activity of indole compounds.[3] The ligand L^{C7} was synthesized similarly to the method already reported [4] and characterized by IR and NMR techniques. The complex [Ni(L^{C7})₂](ClO₄)₂ (**1**) was synthesized in methanol by the 2:1 ratio mixture of L^{C7} and NiClO₄·6H₂O under stirring at room temperature resulting in a light-yellow powder (Figure below).



The complex was characterized by molar conductivity, IR and UV-Vis spectrophotometry. The resulting IR spectra of the ligand and its complex are very similar. The stretching bands of the complex (ν) N-H (3400 cm⁻¹), C-H_{arom} (3054 cm⁻¹), C-H_{alif} (2927-2851 cm⁻¹), C-C_{arom} (1609-1481 cm⁻¹), C-N (1566 cm⁻¹) and the bending band (δ) C-H_{arom} (746 cm⁻¹) are observed in both compounds spectrums with small variation between them. Molar conductivity tests (Λ_M) were realized in acetonitrile and resulted in 261 $\mu\text{S}\cdot\text{cm}^{-1}$. According to Geary [5], the molar conductivity of 2:1 electrolytic solution is typically between 220 and 300 $\mu\text{S}\cdot\text{cm}^{-1}$. The electronic spectrum was measured in CH₃CN and exhibited a wide absorption band at 224 nm ($\epsilon = 18120 \text{ M}^{-1}\text{cm}^{-1}$), indicating an intraligand charge transfer (ILCT). The typical *d-d* transitions of the nickel center will be measured with more concentrate solutions. The stability of **1** was performed spectrophotometrically during 2 hours and no significant absorbance variation was detected. At the present moment, DNA interaction tests are being performed upon salmon DNA (ssDNA) and binding constants (K_b) will be calculated.

Acknowledgements

UDESC, FAPESC, CAPES and CNPq.

[1] Keene, F. R.; Smith, J. A.; Collins, J. G. *Coord. Chem. Rev.* 2009, 253, 2021–2035. [2] García-Ramos, J. C.; Galindo-Murillo, R.; Cortés-Guzmán, F.; Ruiz-Azuara, L. *J. Mex. Chem. Soc.* 2013, 57(3), 245-259. [3] Zou, M.; Zhang, X.; Xu, C. *Cell Oncol (Dordr)* 2016;39:47–57. [4] Tomaz, M. N. et. al. *RASBQ, Águas de Lindóia*, 2015. [5] Geary, W. J. *Coord. Chem. Rev.* 1971, 7, 81-122.

An unprecedented N-rich heteroleptic Zinc(2+) complex containing polypyridyl ligands

Ana I. Tillmann* (IC),¹ Lucas H. Lange (PG),¹ Fernando R. Xavier (PQ),¹

anatillmann12@gmail.com

¹Laboratório Síntese & Catálise – SINCA, Departamento de Química – UDESC – Joinville-SC, Brasil.

Palavras Chave: Metal Complexes, Bioinorganic Chemistry, Metallodrugs, DNA, Zinc(2+).

Highlights

Metal complexes containing bioinspired ligands are growing in a variety of medicinal applications. A novel zinc complex was synthesized and characterized by conductometric and spectroscopic techniques. Stability test in biological conditions as well as DNA binding studies are under way in the present moment.

Resumo/Abstract

Metal complexes have a coveted spot in the hall of chemotherapies and other medicinal applications. Some of the well-known platinum and palladium coordination compounds with anticancer properties have also shown antitrypanosomic activity.² Zinc is a trace element, present in the human body in low concentrations, such as 2g in an average adult¹. Its bioavailability turns it to a potential metal center fitted for bioinspired ligands with a variety of roles in DNA interaction. Those ligands, when geometrically planar, may increase DNA interaction, making them capable of intercalative binding and the sites can interact with enzymes such as topoisomerase, focusing on treatment for neglected diseases such as trypanosomiasis³. The zinc coordination compound presented here is a heteroleptic molecule containing two pyridine rich ligands: The first one is the L^{C5}, a bisindolylmethane derivative chained to the bis-(piridilmetil)amine, a tridentate ligand with well-known stability and behave towards metallic ions.⁴ The other is dipyrido[3,2-d:2',3'-h]quinoxaline (dpq), utilized to increase DNA interaction by π -stacking interactions.⁵ The complex was prepared by adding a solution of dpq (0,116g; 0,5 mmol) in dichloromethane (15 mL) in a solution of Zn(ClO₄)₂·6H₂O (0,186g; 0,5 mmol) in acetonitrile (15mL) at room temperature and the solution became dark yellow. To this mixture, then, the ligand L^{C5} (0,257g; 0,5 mmol) was added dropwise (in acetonitrile as well). The brown solution was evaporated at low pressure yielding a light-brown solid that was dried under high vacuum, yielding 0,495g (98%). The complex is soluble in polar organic solvents, such as acetonitrile and dimethylformamide, and is stable in solution, as evidenced by the conductivity and spectroscopic experiments. Molar conductivity tests (Δ_M) were realized in acetonitrile and resulted in 265 μ S. According to Geary [5], the molar conductivity of 2:1 electrolytic solution is typically between 220 and 300 μ S.cm⁻¹. Electronic spectroscopy analysis was run for 1 and three absorption bands were observed (λ_{max} {nm}/ ϵ {M⁻¹ cm⁻¹): 224 {17770}, 252 {12300} and 283{5220} all attributed to intraligand charge transfer processes (ILCT). Stability tests in biological conditions as well as DNA binding studies are under way in the present moment.

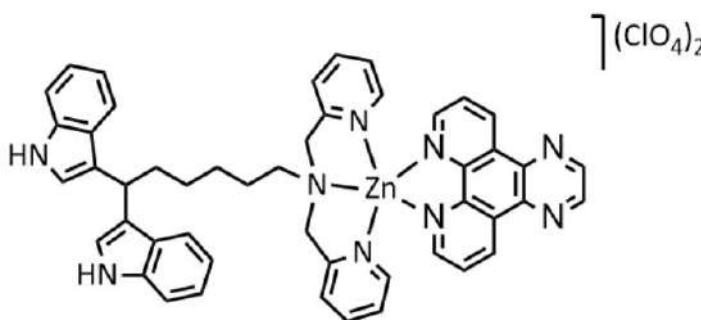


Figure 1 – Predicted structure for the complex [Zn(L^{C5})(dpq)](ClO₄)₂

[1] A. Kryshchshyn et al. / European Journal of Medicinal Chemistry 85 (2014) 51e64. [2] PENELLA, M. A., GIEDROC, D. P. Encyclopedia of Inorganic Chemistry: Zinc: DNA-binding Proteins. 2^a Ed. WILEY, 2005. [3] CANCER RESEARCH 53, 5987-5993. 1993. [4] Tomaz, M. N. et. al. 38^a RASBQ, Águas de Lindóia, 2015. [5] Dalton Trans., 2010, 39, 2027–2035. [6] Geary, W. J. Coord. Chem. Rev. 1971, 7, 81-122.

Agradecimentos/Acknowledgments

UDESC, FAPESC, CAPES and CNPQ.

Síntese e avaliação de atividade anticâncer de novos análogos 4-oxoquinolínicos de acilonucleosídeos fosfonatos (ANPs)

Letícia V. Faro (PQ),¹ Rita Hemanuelle S. Silva (IC),¹ Angélica L. N. Mello (PG),² Ricardo Imbroisi Filho (PG),² Marcos C. de Souza (PQ),¹ Fernanda C. S. Boechat (PQ),¹ Mauro Sola-Penna (PQ),² Patrícia Zancan (PQ),² Maria Cecília B. V. de Souza (PQ).^{1*}

ggocica@vm.uff.br

¹Instituto de Química, Departamento de Química Orgânica, UFF; ²Departamento de Biotecnologia Farmacêutica, Faculdade de Farmácia, UFRJ.

Palavras Chave: Acilonucleosídeo, Quinolona, Fosfonato, Câncer.

Highlights

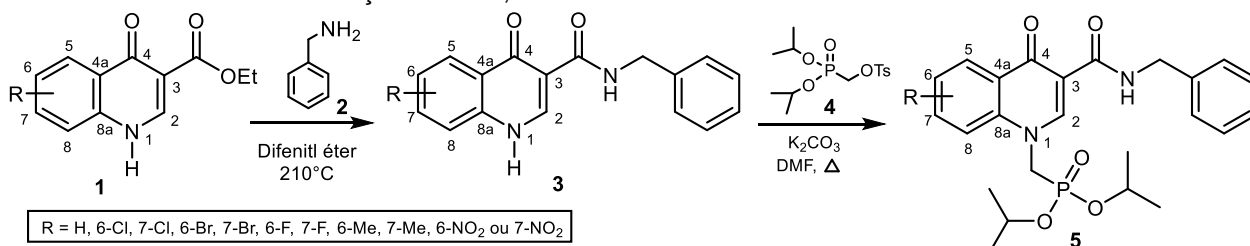
Synthesis and anti-cancer evaluation of new 4-oxoquinoline acyclonucleoside phosphonates analogues (ANPs).

Cancer is a major cause of death worldwide. The search for new anticancer agents that are more selective and that can guarantee chemotherapy with less aggressive side effects is a constant target for research.

Resumo/Abstract

O câncer é um grave problema de saúde pública, atingindo milhares de pessoas no mundo, com altas taxas de morbidade e mortalidade. A maior parte dos tratamentos existentes envolve quimioterapia, remoção cirúrgica de tumores e radioterapia. O tratamento quimioterápico é bastante efetivo em muitos casos, mas há o problema da seletividade dos fármacos frente às células cancerígenas, ocasionando muitos efeitos colaterais e há ainda o desenvolvimento de resistência pelas células do câncer aos diferentes fármacos em uso. Assim, a busca por novos agentes anticâncer, mais potentes, seletivos e que possam provocar menos efeitos colaterais é alvo constante de pesquisas.

Face ao amplo escopo de atividades biológicas dos compostos 4-oxoquinolínicos, e aos resultados relacionados a síntese e estudos de atividade anticâncer de novos derivados deste sistema obtidos em trabalhos de nosso grupo de pesquisas, está sendo descrita neste trabalho a síntese e a investigação do perfil de atividade anticâncer de análogos de acilonucleosídeos fosfonatos 4-oxoquinolino-3-carboxamidas (5). Neste sentido, foram preparadas as 1-[(diisopropoxifosforil)metil]-4-oxoquinolino-3-carboxamidas (5), a partir da reação de *N*-alquilação das oxoquinolinocarboxamidas (3) com diisopropil(tosilmetoxi)fosfonato (4). As substâncias 3 foram resultantes da reação de substituição nucleofílica à carbonila do grupamento éster das oxoquinolinas 1, tendo-se benzilamina (2) como nucleófilo. Estes ANPs 5 foram avaliados quanto sua atividade anticâncer e resultados iniciais indicam que os derivados contendo substituintes 7-Br e 7-Me foram capazes de reduzir a viabilidade das células MCF-7 (câncer de mama) em mais de 50%, resultados estes similares ao do padrão utilizado (Doxorubicina). Já, frente a linhagem celular B16F10 (melanoma) – linhagem esta agressiva e metastática sendo um excelente modelo para o estudo de metástases e formação de tumores sólidos *in vivo* em modelo murino – o fosfonato bromado (C-7) mostrou-se mais efetivo em reduzir a viabilidade celular (redução de 80%). Desta forma, este fosfonato, nestes estudos iniciais, parece se constituir em um promissor composto antitumoral. Os estudos visando a determinação do seu IC₅₀ e também a avaliação dos seus efeitos sobre a viabilidade celular em linhagens não-tumorais, buscando-se caracterizar sua ação seletiva, estão em andamento.



Esquema 1. Esquema reacional para obtenção dos derivados ANPs 4-quinolono-3-carboxamidas 5.

Agradecimentos/Acknowledgments

Faperj, CAPES (Código de Financiamento 001) e CNPq.

42ª Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química: Eixos Mobilizadores em Química

Área: ORGNº de Inscrição: 00955

Biodegradation of chloramphenicol by endophytic fungi isolated from *Bertholletia excelsa* (Brazil nuts)

Fabrcio H. e Holanda (PG)¹, Eduardo Ricardo S. Cardoso (IC)¹, Willian G. Birolli (PG)² Edmilson dos S. Morais (PG)¹, Iracirema S. Sena (PG)¹, Adriana M. Ferreira (PG)¹, LÍlian Grace da S. Solon (PQ)¹, Irlon M. Ferreira (PQ)¹.

eduricardoersc@gmail.com irlon.ferreira@gmail.com

¹Grupo de Biotcatálise e Síntese Orgânica Aplicada, Departamento de Ciências Exatas, Universidade Federal do Amapá, Rod. JK, KM 02, 68902-280, Macapá, Amapá, Brasil. ²Laboratório de Bioquímica Micromolecular de Microorganismos, Universidade Federal de São Carlos, Via Washington Luiz, km 235, Caixa Postal 676, CEP 13.565-905, São Carlos-SP, Brazil.

Palavras Chave: *Castanha-do-Brazil*; *Brazilian nut*; *Antibiotic Biodegradation*; *Plant-microorganism*; *4-nitrobenzaldehyde*.

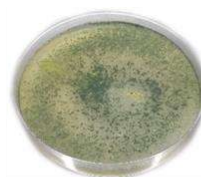
Highlights

Biodegradation of chloramphenicol by endophytic fungi isolated from *Bertholletia excelsa* (Brazil nuts); Detection of the metabolite 4-nitrobenzaldehyde; Environmental toxicology by *Chlorella vulgaris*.

Resumo/Abstract

Antibiotics are a micropollutants group of great risk to ecosystems and contributes to the development of resistance in bacterial strains. Chloramphenicol, the compound approached in this study, resists to conventional residual water treatment procedures. Moreover, the biodegradation process employing specific and efficient microorganisms, including fungi, is an ecologically viable and low-cost option. Therefore, the goal of this study was to assess chloramphenicol's biodegradability by five endophytic fungi strains isolated from *Bertholletia excelsa* collected in the Brazilian Amazonia. For this, the fungi strains were screened in solid/liquid medium and experimental design was performed to optimize culture conditions. Liquid chromatographic analysis (HPLC-UV) was carried out for quantification of the, and gas chromatography coupled to mass spectrometry (GC-MS) was employed for metabolites detection and identification. In addition, an environmental toxicology assessment was carried out using the algae *Chlorella vulgaris*. Results from fungi cultures in solid medium demonstrated that chloramphenicol affected the strains growth. Plus, the initial biodegradation screening in 3, 6, and 9 days showed that all strains managed to increase this antibiotic's degradation; *Trichoderma sp.* (BIORG 7), which was the strain that presented better results, was subjected to experimental design (*Box-behnken*) consisting of 15 experiments, having as variables: pH (5, 7, and 9), period (24, 48, and 72 hours), and chloramphenicol's concentration (50, 100, and 150 mg.L⁻¹), reaching a biodegradation percentual of about 30%. The metabolite 4-nitrobenzaldehyde was identified and presented toxicity to these microorganisms, a metabolite that may be related with the diseases caused in different organisms. Endophytic fungi managed to improve chloramphenicol biodegradation and can be further studied in waste treatment facilities.

Trichoderma sp. BIORG 7
9 days



Cont



Malt

Agradecimentos/Acknowledgments

The authors would like to acknowledge Fundação de Amparo à pesquisa do Estado do Amapá (FAPEAP, grant no. 34568.515.22257.28052017) for their financial support.

New quinoline derivatives with potential activity anti-*P. falciparum*

Livia M. Feitosa (PG)¹, Maria de Lourdes G. Ferreira (PQ)¹, Larissa G. Oliveira (IC)¹, Luiz C. S. Pinheiro (PQ)¹, Nubia Boechat (PQ)^{1*}

livia.feitosa@far.fiocruz.br; nubia.boechat@far.fiocruz.br

¹Departamento de Síntese de Fármacos, Farmanguinhos - FIOCRUZ, Fundação Oswaldo Cruz. RJ, Brazil.

Palavras Chave: Malaria, Triazolopyrimidine, Quinoline

Highlights

Six quinoline derivatives were synthesized in 40-50% yield after purification. These compounds appear to be promising for further studies as an antimalarial.

Abstract

During our search for new compounds that can be used to treat malaria, we have demonstrated the importance of triazolopyrimidine prototype I ($IC_{50} = 0.023 \mu M$) that has activity anti-*P. falciparum*¹.

In another work, we demonstrated the importance of derivatives quinoline linked to benzenesulfonamide moiety by methylene groups. The compounds of this series containing 3 or 4 methylene carbons as linker. The compound II was the more active with $IC_{50} = 0.09 \mu M$, lower than that of chloroquine (CQ) $IC_{50} = 0.46 \mu M$ and when evaluated against *P. berghei*, compound II inhibited parasitemia by 49% on day 5 after inoculation². In order to obtain new compounds with anti-*P. falciparum* activity were designed a new series of triazolopyrimidine derivatives 6-11 from the combination of triazolo[1,5-a]pyrimidine ring present on the prototype I, bonded to the quinoline ring present in chloroquine (CQ) by 3 or 4 methylene carbons.

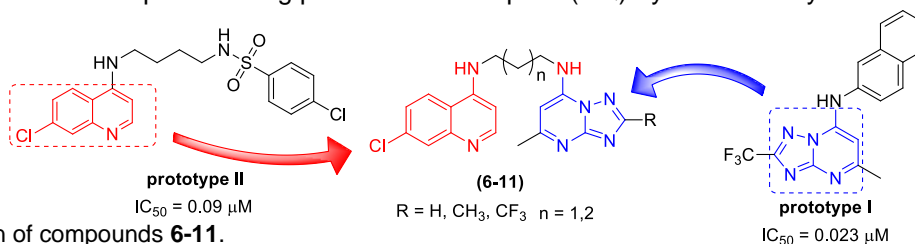
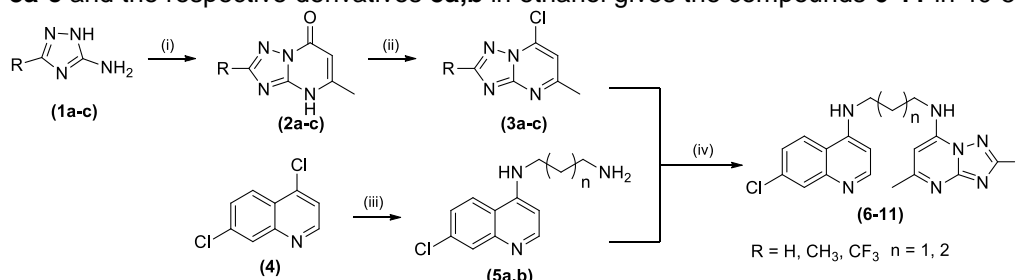


Figure 1: Design of compounds 6-11.

Reaction of aminotriazoles 1a-c with ethyl acetoacetate produced the derivatives triazolo[1,5-a]pyrimidin-7(4H)-ones 2a-c in 71-95% yield which were treated with $POCl_3$ to obtain the derivatives 3a-c in 51-70% yield¹. The reaction between 4 and the appropriate amines under reflux to obtain the compounds 5a,b in 86% yield. The reaction of 3a-c and the respective derivatives 5a,b in ethanol gives the compounds 6-11 in 40-50% yield.



Reagents and conditions: (i) ethyl acetoacetate, AcOH, toluene, reflux, 24 h; (ii) $POCl_3$, reflux, 3h; (iii) appropriate diamine, reflux, 4h; (iv) ethanol, reflux, 6h.

Figure 2: Synthesis of compounds 6-11.

References

- (1) Boechat, N. et al. *Molecules*, **2012**, 17, 8285-8302.
- (2) Pinheiro, L. C. S. et al. *Bioorg. Med. Chem.*, **2015**, 23, 5979-5984.

Acknowledgments

CNPq, CAPES, FAPERJ and PDTIS/FIOCRUZ

Synthesis and characterization of chalcones derived from α , β -unsaturated

Aline de S. Carvalho (IC),^{1,2*} Luciane B. Silva (IC),^{1,2,3} Eduardo R. S. Cardoso (IC),^{1,2} Luca do V. Penha (IC),^{1,2} Irlon M. Ferreira (PQ),^{1,2}

*alinedesantana7@gmail.com;

¹Colegiado de Licenciatura em Química, Departamento de Ciências Exatas, Universidade Federal do Amapá; ²Grupo de Biocatálise e Síntese Orgânica Aplicada, Departamento de Ciências Exatas, Universidade Federal do Amapá, Rod. JK, KM 02, 68902-280, Macapá, Amapá, Brasil; ³Laboratório de Modelagem e Química Computacional, Departamento de Ciências Biológicas e da Saúde, Universidade Federal do Amapá.

Palavras Chave: Chalcones, Ketones, Synthesis, Flavonoids, Claisen-Schmidt, Unsaturated.

Highlights

Synthesis of Chalcone derivatives by Claisen-Schmidt condensation. These structures were elucidated by infrared spectroscopy analysis techniques.

Abstract

Chalcones are biosynthetic precursors of flavonoids and can be defined as α - β -unsaturated ketones, have a 1, 3-diphenyl-2-propen-1-one nucleus. Many biological activities of this group of compounds vary according to the two aromatic rings and their substituents. In this work we aim to synthesize and characterize compounds derived from chalcones. These chalcone-derived compounds were obtained by the aldol condensation reaction of Claisen-Schmidt. In this method, condensation is performed from a benzaldehyde with an appropriate ketone in a polar solvent such as ethanol, with the use of a catalyst base (NaOH). The reaction was monitored by thin layer chromatography (TLC), and all products were characterized by the comparison of their melting points with those available in the literature and by spectral analysis. Through the analysis of the spectra it is possible to observe, through Figure 1(b) in the reaction (1a), the presence of vibrations of the absorption bands characteristic of the aromatic ring group around 3080 cm^{-1} and the symmetrical mode around 1485-1445 cm^{-1} . The m-disubstituted group at the bond of the aromatic ring with the deformation H_3 out of the plane; as well as the stretching of this same group with an average intensity in 1598, 94. An intense band around 1600 cm^{-1} corresponding to the stretching vibrations of the bonds of carbonyl groups ($\text{C}=\text{O}$) was also observed in the reactions (2b and 3c). Of the compounds synthesized, all showed influence of the substituent groups on synthesis and the characterization of the Chalcones. Synthesis data and characterization by infrared spectroscopy of the chalcones synthesized revealed that the presence of the substituent groups significantly altered the yields and chemical shifts of α , β -unsaturated chalcones. Groups such as methyl and ethyl, are weak electron donors, when compared to the methoxy group, increase the yield of the reactions. While groups that are strong electron donors like the methoxy group, located in the para position, decrease the yield. It is also seen a strong influence of these groups, regarding the chemical displacements seen in the spectra. The performance of the work leaves as further future studies with 2, 4-dimethyl-3-nitro chalcone containing heterocyclics in ring B.

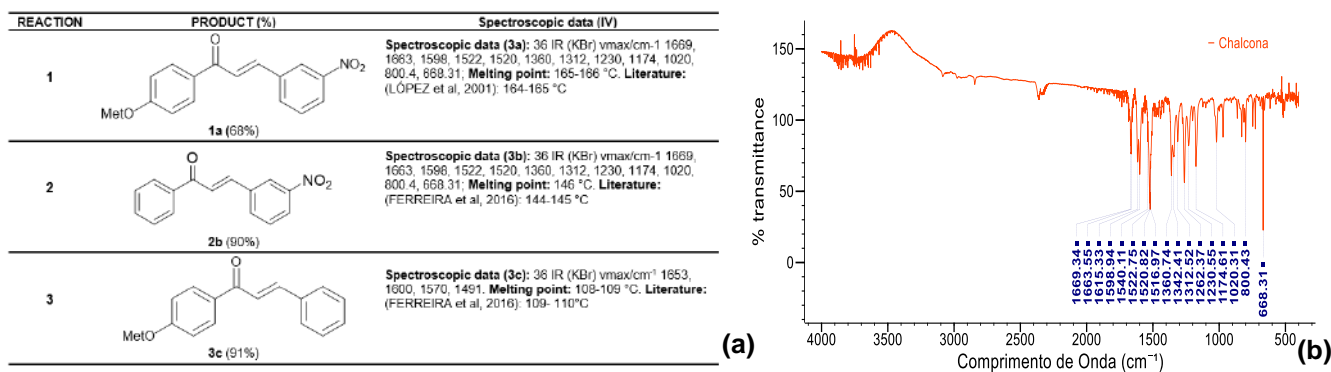


Figure 1 – Physical characterization data and synthesis (1a, 2b and 3c) and Infrared Spectrum of da 2,4 dimetil-3 nitrochalcone (1a)

Acknowledgments

The authors thank Federal University of Amapá (UNIFAP) for the financial support of the research.

Área: INO

Nº de Inscrição: 00958

Phosphine Pilocarpine Copper(I) and Silver(I) complexes and their applications as agrochemicals in the citrus disease control

Wilmer Villarreal (PQ),^{1*} Danielle Fernandes da Silva (PQ),¹ Maria Fátima das G. F. da Silva (PQ).¹

dwjvp@ufscar.br

¹Departamento de Química, Universidade Federal de São Carlos UFSCar

Keywords: Agrochemicals, copper complex, silver complex, alkaloid complex.

Highlights

We combined the biological properties displayed by the alkaloid pilocarpine ligand together with structural and biological qualities showed by the metals centers copper and silver as a new approach to obtain agrochemical agents.

Resumo/Abstract

In the context of Brazilian agrobusiness the citrus sector stands out, since Brazil is the main producer in the world with 31% production, by which the diseases that reach this type of crops have a strong impact on the economy of the country. Citrus and other crops are target of several diseases that causes large damages to the agribusiness and rural producers. For this reason, the control of these diseases is of vital importance for the national economy. Alkaloids are plant secondary metabolites which have been shown to have pharmacological properties, mainly anti-parasite, antibacterial and fungicide activities. We present the synthesis and characterization of two complexes of copper(I) and silver(I) with general formula $[M(PPh_3)_2(\text{pilocarpine})_2]X$, (where PPh_3 = triphenylphosphine, and $M = Cu$, $X = NO_3$ for the complex **1**, and $M = Ag$, $X = BF_4$ for compound **2**). The complexes were characterized by elemental analysis, multinuclear (1H , $^{13}C\{^1H\}$ and $^{31}P\{^1H\}$) NMR spectroscopy, absorption spectroscopy in the infrared and ultraviolet-visible regions, and mass spectrometry. The comparison between the characterization data of the free ligand and the compounds was used as parameters to deduce the mode of binding of quinine to the metal. The complexes will be tested against the bacterium *Xanthomonas citri* ssp. *citri* of citrus canker, one of the main diseases of citriculture. The preliminary results showed that the complexes displayed a better activity when compared with the free ligand.

Área: ORG

(Inserir a sigla da seção científica para qual o resumo será submetido. Ex: ORG, BEA, CAT)

Nº de Inscrição: 0959

(Inserir o número de inscrição do autor que fez a submissão)

Heck Reaction in Water catalyzed by ionic palladium (II) complex derivated of Salophen

Adão Aparecido Sabino (PQ), Juliana Yurie Kadooca (PG), João Victor Coelho Pimenta (IC), Antônio Flávio de Carvalho Alcantara (PQ)

Grupo de Estudos de Química Orgânica Biológica (GEQOB), Department of Chemistry (DQ), Federal University of Minas Gerais (UFMG).

Keywords: Heck Reaction, Water, Green Chemistry, Salophen, Palladium Complex

Highlights

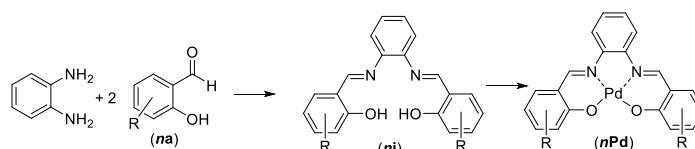
Synthesis of palladium (II) ionic complexes derived from salophen for application as a catalyst of the Heck coupling reaction using water as solvent.

Resumo/Abstract

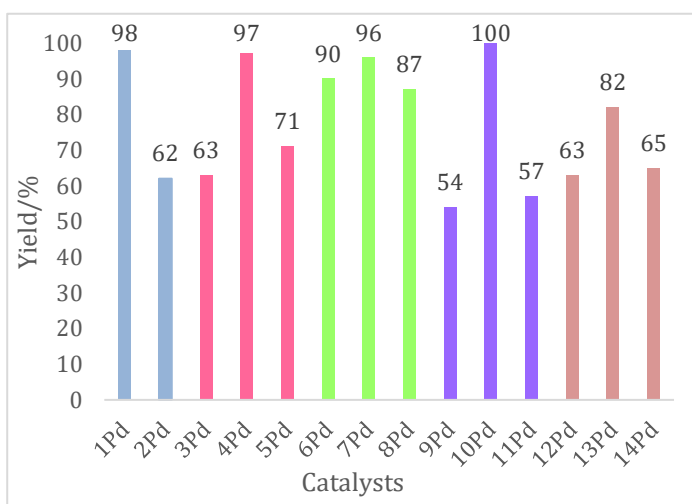
Metal-catalyzed C-C couplings are among the most important synthetic tools for the construction of organic molecules. The importance of this strategy was recognized with the 2010 Nobel Prize in Chemistry for three researchers, Richard F. Heck, Akira Suzuki and Eichi Negishi, who contributed much in this area. Among these couplings is the reaction of Heck,ⁱ developed in 1972, which promotes the reaction between vinyl halides or triflates with alkenes mediated by palladium. Usually, the Heck reaction is carried out using organic solvents such as DMA, DMF, Acetonitrile and Methanol. From the point of view of green chemistry, water is known to be the ideal substitute for organic solvents, so the development of methodologies and catalysts that allow the use of water as solvent is very important.ⁱⁱ

In this work fourteen ionic *bis*-imines (1i-14i) derived from salophen were synthesized and complexed with palladium(II) that were applied in the catalysis of Heck reaction between styrene and halobenzene, using water as solvent. This approach makes use of very low ratio (10⁻³ mol%) of water-soluble palladium complexes (1Pd-14Pd) affording the stilbene with very good yields.

These results became new possibility for this important coupling employing a cheap and environmentally safe solvent together with new water soluble ionic palladium complexes.



- | | | |
|--|---|---|
| (1) R = 5-SO ₃ ⁻ Na ⁺ | (6) R = 5-(CH ₂) ₂ -PPh ₃ ⁺ Cl ⁻ | (11) R = 4-(CH ₂) ₂ -N ⁺ (CH ₃) ₂ BF ₄ ⁻ |
| (2) R = 4-CO ₂ ⁻ Na ⁺ | (7) R = 5-(CH ₂) ₂ -PPh ₃ ⁺ PF ₆ ⁻ | (12) R = 4-(CH ₂) ₂ -N ⁺ (CH ₃) ₂ Br ⁻ |
| (3) R = 5-(CH ₂) ₂ -N ⁺ (CH ₃) ₂ Cl ⁻ | (8) R = 5-(CH ₂) ₂ -PPh ₃ ⁺ BF ₄ ⁻ | (13) R = 4-(CH ₂) ₂ -N ⁺ (CH ₃) ₂ PF ₆ ⁻ |
| (4) R = 5-(CH ₂) ₂ -N ⁺ (CH ₃) ₂ PF ₆ ⁻ | (9) R = 4-(CH ₂) ₂ -N ⁺ (CH ₃) ₂ Br ⁻ | (14) R = 4-(CH ₂) ₂ -N ⁺ (CH ₃) ₂ BF ₄ ⁻ |
| (5) R = 5-(CH ₂) ₂ -N ⁺ (CH ₃) ₂ BF ₄ ⁻ | (10) R = 4-(CH ₂) ₂ -N ⁺ (CH ₃) ₂ PF ₆ ⁻ | |



ⁱ Heck, R. F., and J. P. Nolley Jr. *The Journal of Organic Chemistry* 37.14 (1972): 2320-2322.

ⁱⁱ Christoffel, Fadri, and Thomas R. Ward. *Catalysis Letters* 148.2 (2018): 489-511.

BIS-CHALCONES SYNTHESIS AND EVALUATION OF ANTIFUNGAL ACTIVITY IN *Trichophyton rubrum*

Cassia Sousa Ferreira (IC)^{1*}, **Péricles B. Alves (PQ)**¹, **Gabriella B. Souza (PG)**¹, **Celuta S. Alviano (PQ)**², **Daniela S. Alviano (PQ)**², **Morgana S. Araújo (PG)**³, **Emmanoel V. Costa (PQ)**³.

cassiaaily@gmail.com

¹Departamento de Química, UFS; ²Centro de Ciências da Saúde- UFRJ; ³Departamento de Química-UFAM

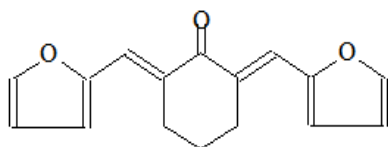
Keywords: Bis-chalcones, *Trichophyton rubrum*, Antifungal activity.

Highlights

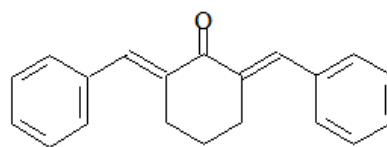
Use of chemical agents bioactive is efficient in the control of dermatophytic diseases. This study synthesized and characterized two bis-chalcones for antifungal activity evaluation.

Abstract

The species *Trichophyton rubrum* is a fungus anthropophilic transmitter of dermatophytic diseases, causing superficial or intense mycosis in keratinous tissues. Its growth is associated with humidity, genetic predispositions and history of chronic diseases. The bis-chalcones were subjected to evaluation of antifungal activity in *T. rubrum* in order to contribute to the diversity of organic molecules bioactive and aiding in the resistance effect of topical antibiotics in this microorganism. The methodology used to obtain bis-chalcone was the aldol condensation of Claisen-Schmidt, which consists of the coupling between cyclohexanone with benzaldehyde and furfuraldehyde. The reaction is performed with magnetic stirring for 3 hours in basic medium using ethanol as the solvent at room temperature. After this time, the reaction mixture is stored in a refrigerator for 24 hours and in the next day is vacuum filtered. The reaction yield varied from 77% - 85%. The compounds obtained *2E,6E*-2,6-bis(furan-2-ylmethylene)cyclohexanone (B-1) and *(2E,6E)*-2,6-dibenzylidenecyclohexanone (B-2) were characterized using FTIR, HRMS, ¹H-NMR and ¹³C-NMR (DEPT 135°). The bis-chalcone (B-2) exhibited antifungal activity with a MIC of 15,6 µg/mL and compound B-1 was inactive.



B1



B2

Acknowledgments



Síntese e caracterização de um novo complexo de oxidovanádio(IV) com ligante oxalato

Gabriel B. Baptistella (PG),¹ Francielli S. Santana (TC),¹ David L. Hughes (PQ),² Jaísa F. Soares (PQ),¹ Eduardo Lemos de Sá (PQ),¹ Giovana G. Nunes (PQ)^{1*}

ga.baptistella@gmail.com; ga.baptistella@gmail.com

¹Departamento de Química, UFPR, Curitiba, PR, Brasil; ²School of Chemistry, University of East Anglia, Norwich, NR47TJ, UK

Palavras Chave: Vanádio(IV), alcóxidos, oxidovanádio(IV).

Highlights

Synthesis and characterization of a new oxidovanadium(IV) complex with oxalate ligand. A new binuclear complex of vanadium(IV) was synthesized using V₂O₅ as start material. The product was characterized Spectroscopic and diffractometric technics.

Resumo/Abstract

Complexos de vanádio(IV) contendo ligantes com oxigênio como átomos doadores, demonstraram ações anticâncer, antibiótica e antidiabética.¹ Visando avaliar o efeito de complexos de oxidovanádio combinado com carboxilatos e diolatos, surgiu o interesse no desenvolvimento de novas rotas sintéticas. A reação entre V₂O₅, ácido oxálico e 2-metil-2,4-pentandiol (1:3:1), na presença de trietilamina, produziu cristais verde escuros (I) adequados a análise por DRX de monocristal, com rendimentos de 32%. Os cristais de I pertencem ao grupo espacial monoclinico, P 21/n e a estrutura de (C₆H₁₆N⁺)₂[C₆H₂O₁₆V₂] (I) é compreendida por dois cátions trietilamônio e um complexo binuclear de vanádio(IV) unido por um ligante oxalato em ponte (Figura 1). Dois ligantes, oxo (O²⁻) e um oxalato completam a esfera de coordenação de cada centro de vanádio em geometria de pirâmide de base quadrada distorcida ($\tau = 0,084$). Os teores de vanádio (15,06%) e de análise elementar (% m/m: C, 33,96; H, 4,33; N, 5,66) foram compatíveis com os valores teóricos, confirmando a pureza do produto.

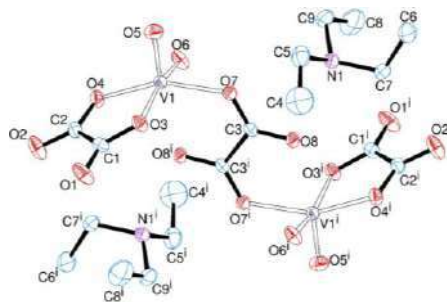


Figura 1. Diagrama ORTEP do [C₆H₂O₁₆V₂]·2(C₆H₁₆N⁺) (I).

Os espectros Raman apresentaram bandas na região de 279 cm⁻¹, referentes a $\nu(\text{N-H})$ do cátion trietilamônio, e em 992, 778 e 414 cm⁻¹ atribuídas aos modos vibracionais $\nu(\text{V=O})$, $\delta(\text{V-O})$ e $\nu(\text{V-O})$ respectivamente. Os espectros de IV mostraram bandas em 989 cm⁻¹ ($\nu(\text{V=O})$), 812 a 490 cm⁻¹ (ν_s e $\nu_{\text{ass}}(\text{V-O})$), uma banda em 3063 do cátion trietilamônio ($\nu(\text{N-H})$) e uma banda alargada próxima a 3435 atribuída a água do composto ($\nu(\text{O-H})$). O espectro de RPE de I em solução aquosa (0,5 a 5,0 mmol.L⁻¹) a 77 K apresentaram uma linha alargada em $g = 1,98$ (centrada em 339 mT, $\Delta_{p-p} = 21,4$ mT), características de espécies polinucleares de vanádio(IV) contendo interação magnética entre os centros metálicos. Neste trabalho foi sintetizado um novo composto de vanádio(IV), onde a metodologia usada mostrou-se bastante eficaz e reprodutível.

Agradecimentos/Acknowledgments

UFPR / CAPES / CNPq / FUNDAÇÃO ARAUCÁRIA / PROEX

[1] PESSOA, J. Coordination Chemistry Reviews, v. 301–302, p. 24-48, 2015.

Conformational and spectroscopic analysis of two novel porphyrins through DFT calculations for solubility predictions

Rodrigo O. Malheiros (IC)*, Mateus F. Venâncio (PQ), Willian R. Rocha (PQ), Gilson DeFreitas-Silva (PQ)**.

*roolimal.ufmg@gmail.com; **gilson.freitas@gmail.com

Chemistry Department, ICEX, UFMG.

Theoretical Chemistry, Porphyrins, DFT, Conformational Analysis

Highlights

DFT calculations were carried out on two novel porphyrins H₂T2,3,4TMPP and H₂T2,4,5TMPP and their rotational isomers to better understand their spectroscopic properties and interactions in solution.

Abstract

Metalloporphyrins have been studied over the last decades as efficient catalysts for oxidation of organic compounds. Recent studies on two novel porphyrins (Figure 1) 5,10,15,20-tetrakis(2,3,4-trimethoxyphenyl)porphyrin (H₂T2,3,4TMPP) and 5,10,15,20-tetrakis(2,4,5-trimethoxyphenyl)porphyrin (H₂T2,4,5TMPP), showed that while the former has low solubility in most solvents tested, the latter is soluble in chloroform and dichloromethane¹. Understanding the solubility of these porphyrins can be useful to predict the catalytic efficiency of their complexes. In this work, Density Functional Theory was applied to investigate the conformational population of these porphyrins ($\alpha\alpha\alpha\alpha$, $\alpha\alpha\alpha\beta$, $\alpha\alpha\beta\beta$ and $\alpha\beta\alpha\beta$) as well as their electronic and vibrational spectra. Each conformer of these porphyrins was optimized at B3LYP/def2-SVP level^{2,3} and their UV-vis absorption spectrum was obtained through TDDFT calculations combining TPSSh/def2-SVP^{4,5} and CPCM model to simulate dichloromethane solvation.

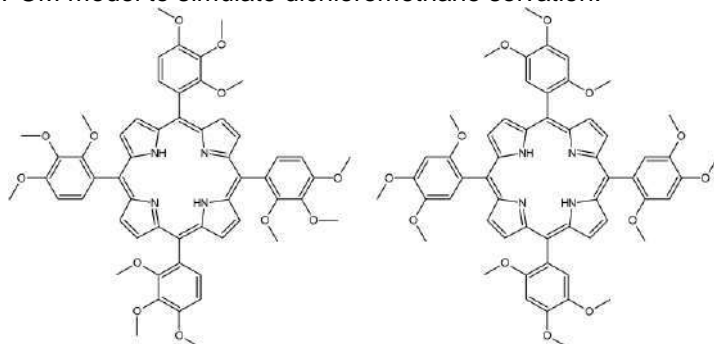


Figure 1. Structures of H₂T2,3,4TMPP (left) and H₂T2,4,5TMPP (right).

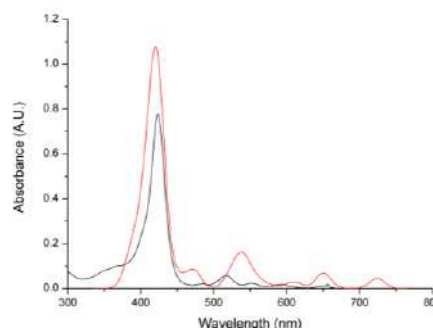


Figure 2. Experimental¹ (in black) and simulated (in red) H₂T2,4,5TMPP UV-vis absorption spectra in CH₂Cl₂ (3.34×10^{-5} mol L⁻¹).

Preliminary results shows that the calculated electronic spectra are in good agreement with experimental data, as shown in Figure 2. Vibrational frequencies and the study of the conformational effects on the electronic spectrum will be presented and discussed. The interactions of the porphyrin isomers with the solvent medium will be analysed by means of Monte Carlo statistical mechanical simulations, to have a better understanding of the main factors that govern the solubility of these compounds.

[1] GUIMARAES, Adriano Silva. Porfirinas de manganês hidrofóbicas e hidrossolúveis como catalisadores da oxidação de substratos orgânicos por vias mais sustentáveis. **Doctoral Qualifying Exam**. Federal University of Minas Gerais, 2017.

[2] BECKE A. D. **J. Chem. Phys.** 98 (7), 5648-5652 (1993)

[3] LEE, C. et al. **Phys. Rev. B** 37 (2), 785-789 (1988)

[4] TAO, J. et al. **Phys. Rev. Lett.** 91 (14), 146401-146404 (2003).

[5] STAROVEROV, V. et al. **J. Chem. Phys.** 119 (23), 12129-12137 (2003).

Acknowledgments

CAPES, CNPq, Fapemig, INCT-Catálise.

Área: MAT

Nº de Inscrição: 00963

Electrochemical study of all-chemically synthesized graphene/iron oxide composites

Jonathan dos Santos (IC)*, Laís C. Lopes (PG), Aldo J. G. Zarbin (PQ)

jonathan.santos@ufpr.br; aldozarbin@ufpr.br

Department of Chemistry, Federal University of Paraná (UFPR), Curitiba, PR, Brazil..

Key words: *Chemical synthesis of graphene, Thin film, electrochemistry, Liquid/liquid interface, iron oxide, Supercapacitor.*

Highlights

The total chemical synthesis of graphene from benzene at liquid-liquid interface described in this work yields samples with remaining species of iron oxides giving promising properties for use in electrochemical devices such as supercapacitors.

Resumo/Abstract

Graphene is a one-atom thick structure composed of sp^2 hybridized carbons arranged in a two-dimensional hexagonal lattice, presenting unique properties, such as exceptional charge transport and optical properties, which give great applicability in different areas. Recently we reported a new route to chemically synthesize graphene, starting from benzene and iron chloride, at room temperature, in a liquid-liquid interface [1]. The obtained samples are in fact nanocomposites between graphene and different iron oxides, obtained as thin, transparent and homogeneous films easily deposited over different substrates. In this work we report the applications of the samples as supercapacitors. Different samples were prepared and fully characterized varying i) post-synthesis treatment (without treatment (GR1), or treated with aqueous solution of NH_4OH (GR2) or HCl (GR3)), and ii) the number of layer of thin film deposited on the substrate for electrochemical tests (cyclic Voltammetry (CV) and charge and discharge - CD) to evaluate the applicability of graphene/iron oxide composites in electrochemical devices. In the CV tests it was possible to observe the peaks referring to the redox processes of the iron oxide species in the material, as well as an increase of the area of the voltammogram with the increase in the number of depositions, indicating a possible increase in its capacitance. In the CD tests it was possible to observe a characteristic pseudocapacitive profile in all the samples, where the specific capacitances of each sample were calculated (Table 1)

Table 1. Specific Capacitance of graphene/iron oxides composites

| DEPOSITIONS | SPECIFIC CAPACITANCE (F g ⁻¹) | | |
|-------------|---|--------|-------|
| | GR1 | GR2 | GR3 |
| 1 | 74,65 | 115,73 | 26,17 |
| 2 | 50 | 74,21 | 5,92 |
| 3 | 62,67 | 66,71 | 5,17 |

From the values obtained, the sample with the best capacitance (GR2 1DP with 115,73 F g⁻¹) passed to stability tests at different potential ranges and current densities, where it was possible to observe a certain instability of the capacitance of the material, besides the displacement of cathodic and anodic peaks observed in CV performed after the stability test, which suggests a possible structural alteration of the oxides present in the composite.

¹L.C. Lopes, L.C. da Silva, B.G. Vaz, A.R.M. Oliveira, M.M. Oliveira, M.L.M. Rocco, E.S. Orth, A.J.G. Zarbin, Chem. Sci. 2018, 9, 7297.

Agradecimentos/Acknowledgments

CNPQ, CAPES and INCT-Nanocarbono

Kinetic evaluation of the effect of stabilizers on the catalytic activity of Ru-NPS in hydrogenation and nitroaromatic reduction reactions.

Laíze Zaramello (PQ),¹ Roberto González (PG)², Karine Philippot (PQ)² and Josiel B. Domingos (PQ)¹

lzaramello@gmail.com

¹Laboratório de Catálise Biomimética (LacBio), UFSC, Brazil; ²Laboratoire de Chimie de Coordination (LCC), CNRS, France

Keywords: Nanocatalysis; stabilizers; kinetic study; hydrogenation, reduction of nitroaromatic

Highlights

Ligand effect of Ruthenium nanoparticles over hydrogenation and reduction of nitroaromatic compound
Kinetic study to access reaction and equilibrium constants
Mild condition and good catalytic activity

Abstract

Nanoparticles reactivity as catalyst is not only due to the size or morphology, it is intrinsically related to the role that stabilizers play on the nanoparticle surface.¹⁻³ Herein we report the kinetic evaluation of the Ru nanocatalyst stabilized by different carboxylic acids: ethanoic acid (EtAc), trifluoroacetic acid (TFA), pentanoic acid (PentAc), octanoic acid (OctAc) and a polymer, polyvinylpyrrolidone (PVP), over hydrogenation and reduction of nitroaromatic compounds. The size and morphology of all nanocatalyst remained the same to avoid the contribution of size effects in catalysis.

Hydrogenation of unsaturated compounds It could be noticed difference in the reactivity of the hydrogenation of styrene (**sty**) and phenylacetylene (**phe**).

Distinct TOF parameters could be determined, depending on the profile of kinetic curves (Fig 1). The initial TOF (TOF_i) was obtained from the slope of TON vs time curve in the beginning of the reaction (up to 10% of conversion).¹ The TOF₂, for the kinetic curves that showed more than one inclination, and TOF₉₀, at 90% of product conversion. Analyzing all systems Ru-PentAc presented the best catalytic activity for both reactions, with TOF of 927 h⁻¹ for **sty** hydrogenation.

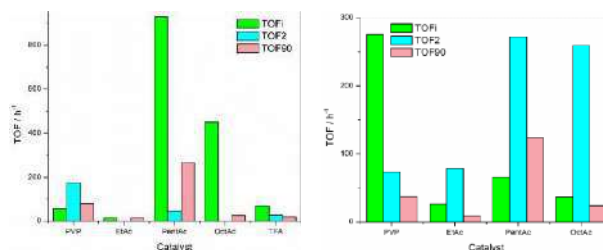


Fig. 1 TOF values obtained for all Ru catalyst over styrene (left) and phenylacetylene (right) hydrogenation.

p-Nitrophenol reduction reaction The benchmark reduction reaction of *p*-nitrophenol (Nip) to *p*-aminophenol (Amp) in water using NaBH₄ as a source of hydrides is a very convenient reaction to perform a series of kinetic experiments. This allows to determine rate and equilibrium constants, since it can be easily followed by UV-vis spectrophotometry.

Table 1 Langmuir rate and v_{0max} for the five different Ruthenium catalysts.

| Ru Catalyst | v_{0max} (10^{-7} mol L ⁻¹ s ⁻¹) | k_L (10^{-5} mol m ⁻² s ⁻¹) |
|-------------|---|--|
| PentAc | 7.11 | 13.70 ± 0.16 |
| EtAc | 5.50 | 9.50 ± 1.32 |
| PVP | 3.03 | 4.28 ± 0.001 |
| OctAc | 2.10 | 3.65 ± 0.91 |
| TFA | 0.43 | 0.93 ± 0.08 |

the middle point of carbon chain size presents the best compromise between stability and activity.

It is possible to observe on Table 1, that the PentAc system was the best catalyst, with highest reaction rate constant (k_L), agreeing with previous data obtained for the hydrogenation of **sty** and **phe**. The activity order of all catalysts based on k_L is **PentAc > EtAc > PVP > OctAc > TFA**. The equilibrium constants were also obtained, and a relation was observed: higher is the adsorption of Nip on the NPs surface, lower is the reaction rate. These results can also be correlated to the product desorption ability which blocks the surface for the entrance of new NIP molecules. PentAc had the best catalytic activity, showing the

1. Zaramello, L. *et al.* *Dalton Trans.* **46**, 5082–5090 (2017).

2. Lara, P., Philippot, K. & Chaudret, B. *ChemCatChem* **5**, 28–45 (2013).

3. Niu, Z. & Li, Y. *Chem. Mater.* **26**, 72–83 (2014).

Acknowledgments

We would like to thank the Brazilian financial programs: CNPq, CAPES AND FAPESC.

Área: MAT

(Inserir a sigla da seção científica para qual o resumo será submetido. Ex: ORG, BEA, CAT)

Nº de Inscrição: 00966

(Inserir o número de inscrição do autor que fez a submissão)

Synthesis of oxide coatings with bactericidal activity by plasma electrolytic oxidation (PEO) of Aluminum

Andressa Rodrigues^{1*}(PG), Janaina S. Santos¹(PQ), Anna Paulla Simon², Carlise H. Ferreira², Vidianny A.Q. Santos², Mariana S. Sikora² (PQ), Nilson C. Cruz³ (PQ), Francisco Trivinho-Strixino¹ (PQ).

fstrixino@ufscar.br; dre.rodrigues27@gmail.com

¹Departamento de Física, Química e Matemática, Universidade Federal de São Carlos – Campus Sorocaba;

²Universidade Tecnológica Federal do Paraná – Campus Pato Branco; ³Universidade Estadual Paulista “Júlio de Mesquita Filho” – Campus Experimental de Sorocaba

Keywords: Anodization, Plasma electrolytic oxidation, Aluminum, Silver, Bactericidal activity.

Highlights

Aluminum anodization under PEO regime was carried out in electrolyte containing Ag⁺ and Ag nanoparticles. Anodic films showed different porous morphology over the surface and bactericidal activity.

Resumo/Abstract

Plasma Electrolytic Oxidation (PEO) is an anodization performed under high electric field used to produce oxide coatings on metals improving their mechanical resistance and corrosion protection. Complex physical and chemical processes can be observed during oxide growth during the PEO process, such as oxide dielectric breakdown that releases energy as heat and light promoting the oxide crystallization. In this study, 6061 Al alloy were galvanostatically anodized in PEO condition and in the presence Ag⁺ ions. A 2² factorial design were carried out with variables “anodization time” and “presence of silver” chosen to change in two levels. The compositional and morphological analysis of oxide surface were performed by EDS and SEM techniques and the structural analysis were performed by X-Rays diffraction. The SEM micrographs revealed an irregular porous structure with presence of cracks on the oxide surface, characteristic of PEO process (Figure 1). In addition, Ag nanoparticles was observed dispersed over all surface concentrated around the pores. The EDS microanalysis demonstrated that under a shorter anodization time there was a greater incorporation of silver on the coating. The analysis of X-ray revealed the presence of the crystallographic phase of γ -Al₂O₃.

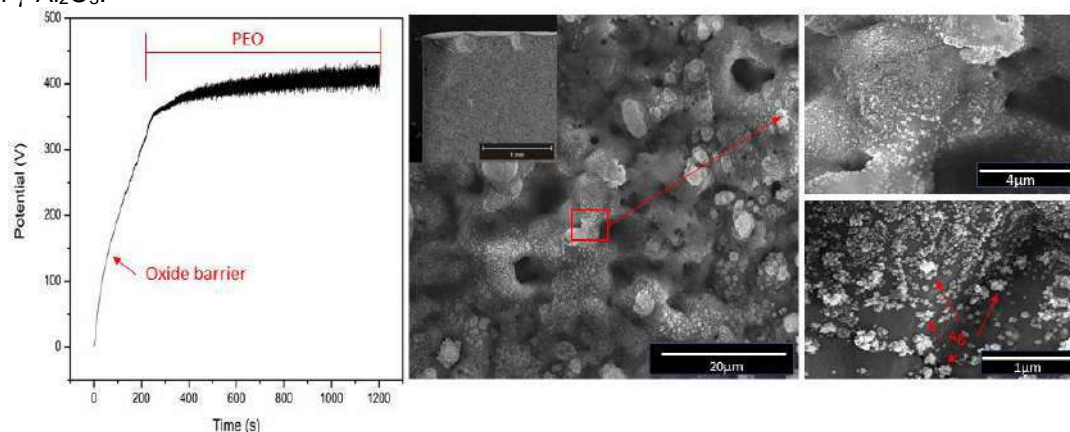


Figure 1: Chronopotentiogram of Al anodization in silicate electrolyte and SEM images depicting the porous morphology and Ag nanoparticles dispersed over the surface of the anodic oxide coating.

Agradecimentos/Acknowledgments

This work was supported by Brazilian Research Funding Agencies: FAPESP (#2010/10813-0), CNPq (#443125/2014-7 and #408250/2016-0) and CAPES (financial code 001). We also want to thank CNPEM-LNNANO that provided the SEM facility for EDS and high-resolution characterization.

Rifle projectiles identification by X-ray fluorescence and exploratory analysis of inorganic constituents

Victor G.P. Saide (PG),^{1*} André V.S. Canuto (PQ),² Cristina M. Barra (PQ),¹ Gustavo G. Shimamoto (PQ),³ Matthieu Tubino (PQ),³ Jose G. Rocha Jr. (PQ).¹

vitosaide@gmail.com

¹Instituto de Química, UFRRJ; ²Perícia Criminal, PCERJ; ³Instituto de Química, UNICAMP.

Keywords: forensic ballistic, HCA, PCA, WDXRF.

Highlights

X-ray fluorescence associated with multivariate analysis (PCA/HCA) were used to identify the origin of rifle projectiles through the chemical composition of the core of these projectiles.

Abstract

The origin of projectiles found in crime scenes is commonly identified by ballistic comparison microscopy. However, due to the high kinetic energy involved in the firing, rifle projectiles can be deformed, making this comparison unfeasible.¹ An alternative being used for this purpose is to know the chemical composition of the projectile, and hence its origin. In this work, the X-ray fluorescence technique using sequential wavelength dispersion (WDXRF) was employed to determine the chemical composition of the nucleus of each projectile. The exploratory analysis was the tool used to identify the origin of these projectiles. For this purpose, 10 core samples of 7.62 caliber rifle bullets from the Brazilian Cartridge Company (CBC), Israel Military Industries (IMI) and Federal Cartridge (FC) were removed from the cartridge according to the procedure described by Dufosse and Touron². These samples were then divided into three metal fragments, which were subsequently compacted in 1 cm diameter disks and cleaned with 1% v/v HNO₃ in an ultrasonic bath. Qualitative and quantitative analyses of the samples were performed using a Shimadzu® spectrometer (model XRF-1800). Principal Component Analysis (PCA) showed that the samples belong to 3 different groups, according to their respective brands (Figure 1b). The origin of the projectiles was influenced by the contents of Sb (mainly), Fe, P and Ca. In addition, other 5 elements, Pb, Al, Si, Cu, and K, were also detected. The trend observed in the PCA was confirmed by the Hierarchical Cluster Analysis (HCA) (Figure 1a). By analyzing the dendrogram, it is possible to observe by similarity the formation of 3 groups. The long branches that join the groups indicate that they are far from each other. The Federal Cartridge group is the most distant among all, mainly due to its Sb content.

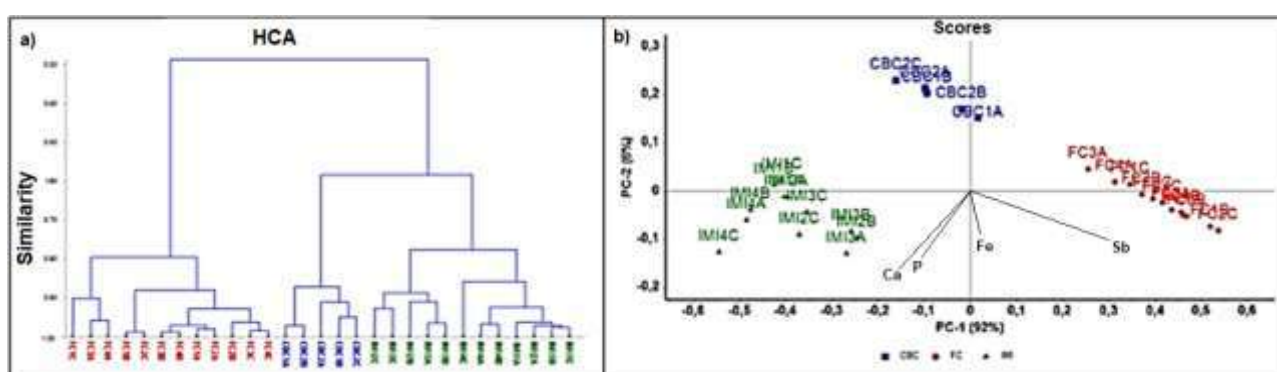


Figure 1: b) Dendrogram of hierarchical groupings; a) PC1xPC2 Scores plot of the projectile samples. Sample identification: FC, in red; CBC, in blue; and IMI, in green.

References:

¹A.F. Sedda, G. Rossi. *Forensic Sci. Int.* 206 (2011) e5–e7.

²T. Dufosse, P. Touron, *Forensic Sci. Int.* 91 (1998) 197–206.

Acknowledgments

Thanks to CNPq for the financing of the project.

Modulatory effect of the essential oil of *Psidium myrtooides* O. Berg (Araçá-roxo) on the inflammation in the *Drosophila melanogaster* eyes

Renieidy F.C. Dias (PG)*¹, Tamiris S. Rodrigues (PG)², Cássia R. Da Silva (PQ)², Francisco J. T. Aquino (PQ)¹, Alberto de Oliveira (PQ)¹, Flávio H. Barbosa (IC)², Francisco M. F. Dias (IC)³, Derli R. C. Dantzger (IC)⁴. Email: flavia.clemente@ufrgs.br

¹Núcleo de Pesquisa em Produtos Naturais, Universidade Federal de Uberlândia, CEP 38400-902, Uberlândia-MG;

²Laboratório de Genética (LABGEN) do Instituto de Biotecnologia da Universidade Federal de Uberlândia; ³Universidade Estadual Vale do Acaraú - Campus Cidao, Endereço: Av. Dr. Guarani, nº 317, Bloco da Química, Bairro: Derby Club, Sobral- CE- Brasil CEP: 62010-305; ⁴Universidade do Oeste Paulista (UNOESTE), R. José Bongiovani, 700 - Cidade Universitária, Pres. Prudente - SP, Brasil CEP:19050-920.

Palavras Chave: *Psidium myrtooides* O. Berg; Essential Oil; *Drosophila melanogaster*; Anti-inflammatory activity

Highlights

The aim of this study was to evaluate anti-inflammatory activity of essential oil of the leaves of *Psidium myrtooides* O. Berg. This study is unpublished with *Drosophila melanogaster*.

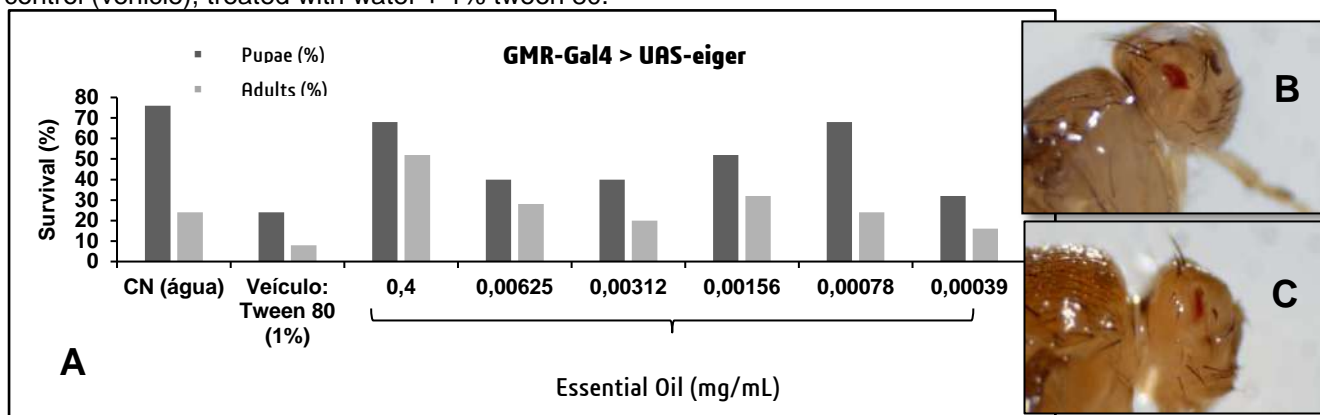
Abstract

Psidium myrtooides O. Berg is known as Araçá-Roxo in Brazil. The plant belongs to the family Myrtaceae which comprises about 140 genus and three thousand species around in the world (FRANZON et al., 2009). The main sesquiterpenes found in essential oil of *Psidium myrtooides* O. Berg are β -carophyllene and carophyllene oxide which has proven anti-inflammatory action (CHAVAN; WAKTE; SHINDE, 2010; OLIVEIRA, E.C.P.; LAMEIRA, O.A.; ZOGHBI, 2006). The anti-inflammatory activity of the essential oil extracted from the leaves of *Psidium myrtooides* O. Berg (Araçá-roxo) was tested in the GMR-Gal4 > UAS-eiger strain model. For this, it was diluted with the aid of Tween 80 (1%), based on other studies performed with *Drosophila melanogaster* (ROCHA et al., 2017). Treatment with the oil was more effective at the highest concentration tested (0.4 mg /mL), in this concentration the flies completed their life cycle at a higher rate than the negative control (vehicle) and other treatments. The results are shown in Figure 1.

Figure 1: (A) Result of the survival test of progeny of the **GMR-GAL4 line > UAS-eiger** of *Drosophila melanogaster* treated with the essential oil of the *Psidium myrtooides* O. Berg and negative control (CN).

(B) Image of *Drosophila melanogaster* heads showing the eye area in the concentration tested (0.4 mg /mL).

(C) Image of *Drosophila melanogaster* heads showing the eye area in the concentration tested with negative control (vehicle), treated with water + 1% tween 80.



*CN = negative control (water).

Acknowledgments



Área: QPN

Nº de Inscrição: 00969

Preliminary studies on the structure of polysaccharides from the wild mushroom *Favolus brasiliensis* from the Amazon Rainforest

Dayane Rodrigues de Brito (PG),¹ Dirce L. Komura (PQ),² Maria Carolina B. Di-Medeiros (PQ),³ Luciano M. Lião (PQ),³ Elaine R. Carbonero (PQ).^{1*}

day.brito1@hotmail.com; elainecarbonero@gmail.com

¹Unidade Acadêmica Especial de Química; UFG-Regional Catalão; ²Instituto Nacional de Pesquisas da Amazônia (INPA); ³Instituto de Química, UFG-Regional Goiânia.

Palavras Chave: Floresta Amazônica, Macrofungos, *Favolus brasiliensis*, Polissacarídeos, Caracterização estrutural.

Highlights

Macrofungi are important sources of bioactive substances.
Polysaccharides were isolated from the *F. brasiliensis* by aqueous and alkaline extractions
Two distinct heteropolymers were obtained.

Resumo/Abstract

A região Amazônica é uma área de grande diversidade de macrofungos ainda pouco estudada, tanto em relação aos aspectos taxonômicos, quanto aos seus constituintes químicos e às propriedades terapêuticas. Devido a importância dos polissacarídeos como moduladores da resposta biológica, o presente trabalho visa a obtenção destas biomoléculas a partir de cogumelos selvagens deste bioma. Com esta finalidade, os basidiomas de *Favolus brasiliensis* (~ 91 g), foram submetidos a extrações aquosas e alcalina. Os extratos obtidos (Aquosos: AF e AQ; Alcalino: K1) foram analisados quanto a composição química por CG-EM, sendo observado uma constituição distinta. O extrato AF mostrou ser composto por altos teores de galactose (Gal; 78,5%), além de manose (Man; 9,7%) e fucose (Fuc; 6,5%), enquanto AQ e K1 mostraram ser constituídos principalmente por glicose (Glc; 80,8% e 69,0%, respectivamente), além de Man (10,6%) e Gal (8,6%) para a fração AQ e Fuc (17,6%) e xilose (Xyl; 18,0%) para a K1. Devido à constituição química, as frações AF e K1 foram fracionadas por congelamento/degelado e precipitação com CuSO₄, originando duas frações principais (PF₂SAF e PF₂SK1). Análises de composição monossacarídica destas frações sugeriram tratar-se heteropolissacarídeos distintos, sendo a PF₂SAF composta por Fuc 7,0%, Man 6,3% e Gal 86,6% e a fração PF₂SK1 por Fuc 21,0%, Xyl 15,0%, Man 26,8% e Glc 35,2%. De acordo com estes dados, a fração PF₂SAF corresponde a uma heterogalactana e a PF₂SK1 a um polímero não usual. Para a elucidação estrutural destes polímeros estão sendo realizadas análises de metilação, HPSEC e RMN.

Agradecimentos/Acknowledgments

À FAPEG, CNPQ e CAPES pela apoio financeiro e/ou bolsa concedida.

Área: AMB

Nº de Inscrição: 00970

Extração sequencial e especiação química de Arsênio em amostras de sedimentos de lagoas alcalinas da Nhecolândia – Pantanal (MS).

Adriana Felix de Souza (IC)*, Amaury Hechavarría Hernández (PG), Anne H  l  ne Fostier (PQ).

adrianafelix.s@hotmail.com

Departamento de Qu  mica Anal  tica, Instituto de Qu  mica, UNICAMP, Campinas-SP, Brasil.

Palavras Chave: Ars  nio, Extra  o Sequencial, Especia  o Qu  mica, Sedimento, Pantanal.

Highlights

Sequential extraction and chemical speciation of Arsenic in sediment samples from alkaline lakes in the Pantanal of Nhecol  ndia (MS). As is mainly associated to oxides and silicates (47 to 89%) or water soluble (6 to 34%). Chemical speciation of Arsenic carried out in the soluble fraction.

Resumo

A Nhecol  ndia    uma sub-regi  o do Pantanal caracterizada por um sistema de ~15000 lagoas, entre as quais ~500 apresentam  guas salinas e alcalinas ($8,5 < \text{pH} < 10,5$) com altas concentra  es (at   4 mg/L) de Ars  nio (As) de origem natural, por  m concentra  es relativamente baixas de As nos sedimentos (at   25 mg/kg).

Em amostras de sedimentos de 7 lagoas alcalinas, verificou-se que o As encontrava-se principalmente (47% a 89%) associado a  xidos e silicatos (F7) e que uma parte importante (6% a 34%) encontrava-se facilmente extra  vel com  gua (F1).

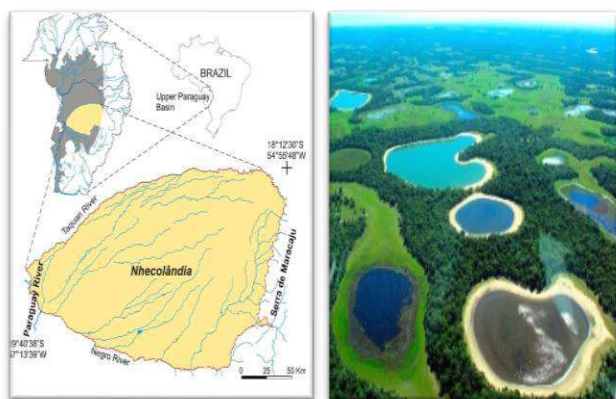


Figura 1. Lagoas salinas alcalinas da Nhecol  ndia.

A extra  o sequencial utiliza solu  es que apresentam for  as extratores gradativas, permitindo assim avaliar a biodisponibilidade do elemento no sedimento. Por outro lado, a especia  o qu  mica do As na fra  o sol  vel em  gua (mais biodispon  vel) permite avaliar a sua toxicidade uma vez que esp  cie inorg  nicas de As s  o mais t  xicas que as org  nicas, e que As(III) tem maior toxicidade que As(V).

Um m  todo de extra  o sequencial em 10 etapas foi utilizado e a determina  o das concentra  es de As foi realizada por espectrometria de fluoresc  ncia at  mica com gera  o de hidreto (HG-AFS).

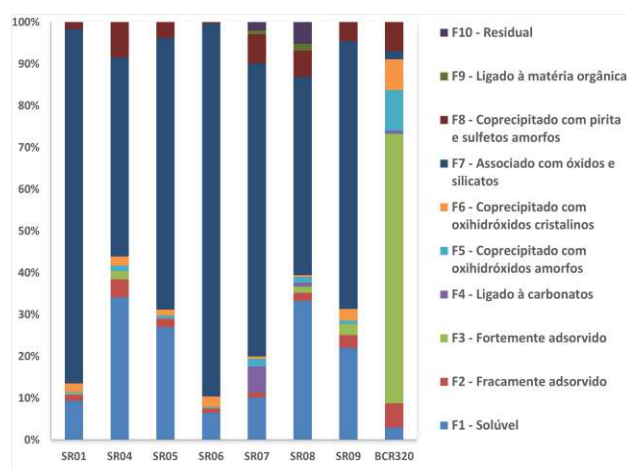


Figura 2. Porcentagem de Ars  nio presente em cada fra  o dos sedimentos das lagoas (SR01 a SR09) e MRC sedimento BCR320.

Um m  todo para especia  o do As por HPLC-HG-AFS foi implantado e validado. A separa  o cromatogr  fica utiliza uma coluna de troca ani  nica, com fase m  vel composta por um tamp  o $\text{Na}_2\text{HPO}_4/\text{NaH}_2\text{PO}_4$ 20 mmol L^{-1} , pH 6,2, no modo isocr  tico de elui  o. O m  todo vem sendo aplicado para a especia  o qu  mica do As na fase sol  vel.

As informa  es obtidas poder  o auxiliar no estudo do ciclo biogeoqu  mico do As em meio aqu  tico e tamb  m no estudo da biodisponibilidade e toxicidade deste elemento na regi  o.

Agradecimentos

  FAPESP (2016/14227-5 e 2018/07962-6) pelo apoio financeiro.

Área: ANA

(Inserir a sigla da seção científica para qual o resumo será submetido. Ex: ORG, BEA, CAT)

Nº de Inscrição: 00971

(Inserir o número de inscrição do autor que fez a submissão)

Synthesis of the oxide mixture $\text{Li}_2\text{O-ZrO}_2\text{-BaO-SiO}_2$ for use as a polar stationary phase in hydrophilic interaction liquid chromatography.

Maysa G. Silva (IC),¹ Jailton A. Vasconcelos Jr (PG) e^{1*} Janaina H. Bortoluzzi (PQ)^{1*}

*janaina.bortoluzzi@iqb.ufal.br; jailtonalvesjr@outlook.com

¹ Grupo de Catálise e Reatividade Química (GcaR), Instituto de Química e Biotecnologia (IQB), Universidade Federal de Alagoas (UFAL)

Keywords: Stationary phase, benzyl alcohol, hydrophilic interaction, chromatography.

Highlights

- Development of a new polar stationary phase, based on the mixture of oxides $\text{Li}_2\text{O-ZrO}_2\text{-BaO-SiO}_2$.
- Synthesis of stationary phase by the metal-chitosan complexation method.

Resumo/Abstract

In High Performance Liquid Chromatography (HPLC) one of the main chromatographic modes is normal phase chromatography (NPLC), where a polar stationary phase (SP) is used. Another mode of LC that has been well developed and used in recent years is hydrophilic interaction chromatography (HILIC) that makes use of polar SPs, as well as NPLC, however the use of an organo-aqueous mobile phase allows different types of interaction between analyte and SP, making this mode more versatile than NPLC. The present study aims to develop a polar SP with the mixture of oxides $\text{Li}_2\text{O-ZrO}_2\text{-BaO-SiO}_2$, which was synthesized by the metal-chitosan complexation method and calcined at different temperatures. The materials were sieved and particle sizes were obtained from 10 to 45 μm . Initially, a SP was calcined at 350°C because it had a larger surface area (280 m^2/g) when analyzed by BET. This material was further characterized by TGA, DRX and FTIR. With this SP, some chromatographic tests were performed for the separation of compounds from the oxidation of the benzyl alcohol, although no separation of all the analytes was obtained. The first material tested as SP in LC presented organic matter when analyzed by TGA (10.5%), so another material was chosen, calcined at 700°C, which presented a lower surface area (130 m^2/g), however it does not contain organic matter in its composition. In this column the chromatographic tests were carried out with the same analytes. In the chromatographic analyzes, it was observed that the benzoic acid showed a longer retention time (Figure 1), because of this, analyzes of compounds derived from benzoic acid in the column with the SP calcined at 700°C were made, being possible, after optimization of the chromatographic method, observe the partial separation of these analytes (Figure 2). In this way, it is necessary to optimize the chromatographic method for a better resolution of the peaks, as well as to reduce the particle size of the SP in order to increase the number of theoretical plates.

Figure 1: Chromatograms of the benzoic acid, benzyl alcohol and benzaldehyde standards in the isocratic method using the 95:5 ratio of acetonitrile:water.

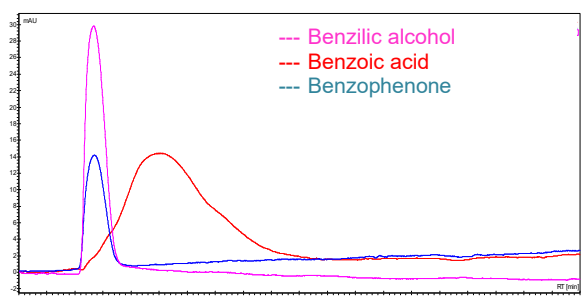
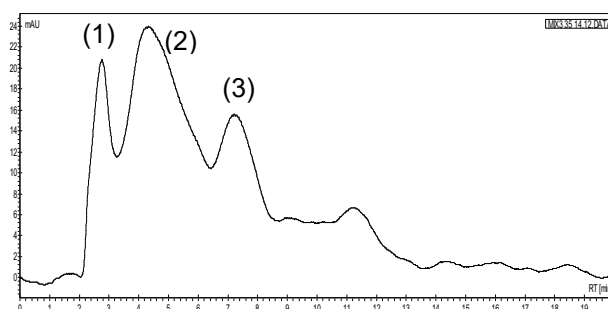


Figure 2: Chromatogram of the analysis of the compounds (1) 3-mercaptobenzoic acid, (2) 3-cyanobenzoic acid and (3) 3-dimethylamino benzoic acid.



Acknowledgments

To the development agencies FINEP, CNPq, CAPES, FAPEAL and INCT-Catálise.

Phenalenone-Type Compounds and Their Activity over *Mycosphaerella fijiensis*: a Theoretical Approach by Density Functional Theory (DFT).

Lucas Gian Fachini (IC),^{1*} Eduardo Lemos de Sá (PQ).¹

lgfachini@ufpr.br

¹Departamento de Química, UFPR, Centro Politécnico, P. Box 19081, 81531-990-Curitiba/PR/Brasil

Phenalenone-Type Compounds, *Mycosphaerella fijiensis*, Yamgambi km 5, DFT.

Highlights

This research shows that the activity of phenalenone-type compounds as inhibitors to the germination of *M. fijiensis* tends to be enhanced by substituents that increase molecular dipole moments. In an opposite direction, substituents that induce larger electronic spatial extents lower significantly the activity of these compounds.

Abstract

Introduction: Black leaf streak (Black Sigatoka), caused by the fungal pathogen *M. fijiensis* is one of the most predominant, common and dangerous diseases that threaten the production of banana in the world¹, “Yangambi km 5”, in turn, is a *Musa* variety that has shown great resistance to Black Sigatoka and others fungal diseases, where this resistance is attributed to its capacity to produce phenalenone-type compounds, as shown by Otálvaro *et al.*² in a study that compares the activity of several phenalenone-type compounds applied to in-vitro cultures of *M. fijiensis*. In their research, however, there is no explanation about why do several compounds have different activities over the fungus. In this present work, five of the compounds tested by Otálvaro *et al.* were studied through a DFT method aiming to correlate molecular and metabolic properties.

Results and Discussion: The compounds studied in this research are shown in the Figure 1 and are labeled as phenalenone-type compounds 9, 10, 11, 12 and 13 respectively, following Otálvaro *et al.* in their study.

The compounds shown in Figure 1 were pre-optimized with PM7/MOPAC2016³ to save computational time for the following DFT geometry optimizations, which were performed through Gaussian09⁴ using B3LYP and M062X as functionals with the base function LANL2DZ⁵. The dipole moment and the electronic spatial extent (ESE) calculated for each compound are shown in Table 1. As stated in the table, phenalenone-type compounds that have a higher dipole moment tend to show higher activity towards *M. fijiensis*, the opposite happens with ESE, larger compounds show significantly less effect against the fungus. These effects may be due to the dipole moment being an indication of electronic interaction, while reactions that involve large molecules often show steric hindrances that considerably slows down the reaction rate and sometimes even prevents it.

Conclusion: The results shown in this work might be a hint to answer the questions around the effectiveness of phenalenone-type compounds as inhibitors to *M. fijiensis*. However, this research is still in progress and new studies about others compounds will be added to clarify exactly the general behavior stated in this present work.

References: ¹R. bras Agrociência, Pelotas, v.11, n.2, p.135-141, abr-jun, 2005. ²Journal of Natural Products, v.70, n.5, p.887-890, mar, 2007. ³MOPAC2009, James J. P. Stewart, Stewart Computational Chemistry, Colorado Springs, CO, USA, HTTP://OpenMOPAC.net (2008). ⁴Gaussian 09, Revision A.02, M. J. Frisch *et al.* Gaussian, Inc., Wallingford CT, 2016. ⁵P. J. Hay and W. R. Wadt, “Ab initio effective core potentials for molecular calculations – potentials for K to Au including the outermost core orbitals,” J. Chem. Phys., 82 (1985) 299-31

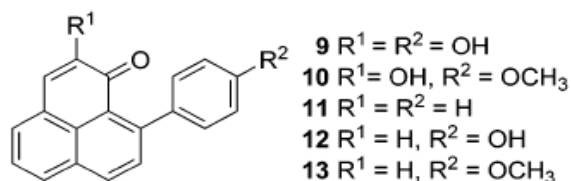


Figure 1: phenalenone-type compounds studied in this research. Source: Otálvaro *et al.* (2007)

Table 1: Calculated dipole moments and electronic spatial extent, the inhibition activities were taken from Otálvaro's research (germination length essays at 10 ppm).

| Compound | Inhibition activities (%) | Dipole moment (D) | ESE* (a.u.) |
|----------|---------------------------|-------------------|-------------|
| 9 | 43 | 5,47 | 7073,9 |
| 10 | 0 | 4,84 | 8370,9 |
| 11 | 25 | 4,36 | 5444,6 |
| 12 | 39 | 4,70 | 6570,9 |
| 13 | 12 | 4,00 | 7863,5 |

Acknowledgments

UFPR, Capes, CNPq, Fundação Araucária, and Departamento de Química/UFSM.

Identification of New Potential acetylcholinesterase Inhibitors by Computational Medicinal Chemistry Techniques

Luciane B. Silva* (IC),^{1,2} Elenilze F. B. Ferreira (PQ),² Aline de S. Carvalho (IC),¹ Lúcio R. de Lima (PG),² Cleydson B. R. dos Santos (PQ).²

luciaanebarros@hotmail.com

¹Colegiado de Licenciatura em Química, Departamento de Ciências Exatas e Tecnológicas, Universidade Federal do Amapá; ²Laboratório de Modelagem e Química Computacional, Universidade Federal do Amapá.

Palavras Chave: Alzheimer's disease; Acetylcholinesterase; ADME; Molecular docking.

Highlights

We investigated the efficacy of Galantamine derivatives using molecular docking and its mode of interaction with *hAChE* was confirmed. In addition, ADME and toxicological properties were predicted.

Abstract

Acetylcholinesterase (AChE) plays an important role in Alzheimer's disease (AD). Excessive activity of AChE causes various neuronal problems, particularly dementia and neuronal cell deaths. Generally, human acetylcholinesterase (*hAChE*) inhibitors drugs induce some severe neuronal side effects in humans. Therefore, this study sought to identify molecules from Galantamine derivatives, with fewer side effects than conventional drugs in the treatment of AD. To achieve this, we developed computational methods and medicinal chemistry to predict drug and target binding affinities using the AutoDock Vina (ADT) 1.5.6 software on the PyRx graphical interface. The target was withdrawn from the Protein Data Bank (PDB) because it presented a bioactive pose at the Human Acetylcholinesterase (*hAChE*) site in complex with (-) - Galantamine available with code PDB 4EY6 to predict the binding affinity between the protein- ligand. The target enzyme has 539 amino acid residues in its sequence alignment. Virtual screening was performed to obtain similar structures of Galantamine with potential *hAChE* activity, after which critical analyzes were carried out, such as: molecular docking, absorption, distribution, metabolism and excretion (ADME) analysis and toxicological properties. In the anchorage studies, the LMQC05 molecule has a Binding Affinity of -10 kcal / mol. In conclusion, our study demonstrates that the molecule LMQC05 is a candidate for *hAChE* inhibitor drug. Therefore, we propose that this molecule merits further investigation using *in vitro* and / or *in vivo* studies.

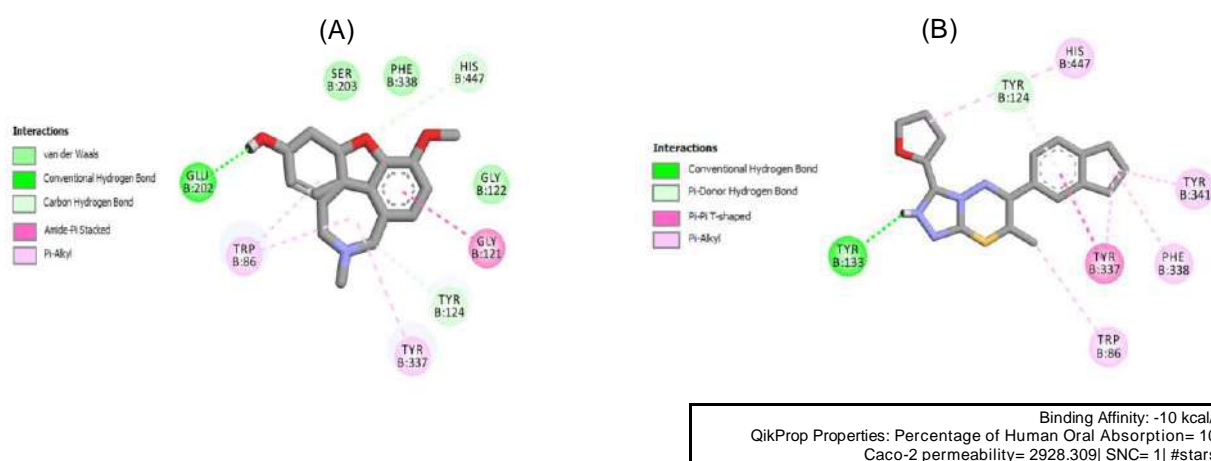


Figure 1. Representation of the interactions in 2D through studies of docking simulations for Galantamine (A) and results obtained with pharmacokinetic prediction studies for LMQC05, obtained with the program QikProp (B).

Acknowledgments

The authors would like to acknowledge National Council for Scientific and Technological Development (CNPq), PIBITI/UNIFAP for their financial support.

Obtaining silica from freshwater sponges (“cauxi”) of the Tapajós river (Amazon region)

Nayara A.F. Couto (IC)^{1*}, Gisele A.B. Mello (PQ)²

nayarah.couto@hotmail.com; gisele.mello@ufopa.edu.br

¹Curso de Engenharia Física, Instituto de Engenharia e Geociências (IEG), Universidade Federal do Oeste do Pará (UFOPA); ²Curso de Licenciatura em Química, Instituto de Ciências da Educação (ICED), Universidade Federal do Oeste do Pará (UFOPA)

Palavras Chave: *catalysts, silica, freshwater sponges (cauxi).*

Highlights

Silica was obtaining from freshwater sponges of the Tapajós river (“cauxi”), with HCl:H₂O (1:1) HNO₃ and H₂SO₄/H₂O₂ (2:1) treatments, which allow removing organic materials and obtaining of pure silica.

Resumo/Abstract

The Tapajós river sponges, knowing as “cauxi”, are spicules consisting essentially of silicon, oxygen and hydrogen, being an excellent source of SiO₂, “eco friendly”, low cost and easy availability, mainly in the region of Santarém (Amazon). However, in addition to the aforementioned elements there is also organic matter and some metals (in low concentrations), so that it is necessary to treat these sponges to obtain pure silica for further investigation in catalytic reactions. In this context, the objective of this work was obtain pure silica from cauxi using HCl:H₂O (1:1), HNO₃ and H₂SO₄/H₂O₂ (2:1). The sponges were initially mechanic cleaned, to removal leaves and branches, after that were calcined at 500 °C and 1000 °C and then subjected to the acid treatments with heating during 4 hours. After that the material was filtered and dried at room temperature, as shown in the Figure 1. The materials obtained after these treatments were as very fine and light-colored particles, an indicative of obtaining pure silica, especially when used HCl. In addition, scanning electron microscopy (SEM) (Figure 2) indicated that the structure of the spicules were maintained, a very interesting result that indicates that the SiO₂ was obtained without structural modification. These are some preliminary results, the physical characterization of the obtained particles with other techniques as BET isotherms, are still in progress.

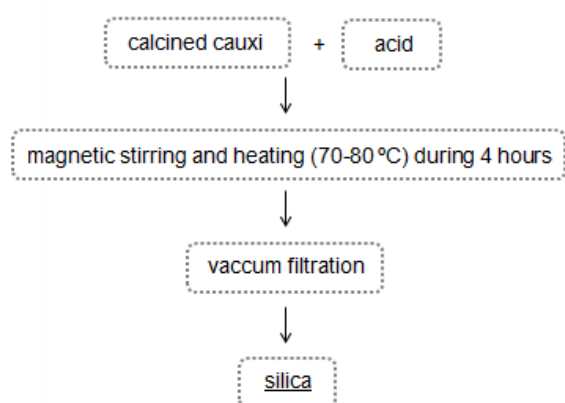


Figure 1. Experimental procedures used to obtain pure silica from cauxi.

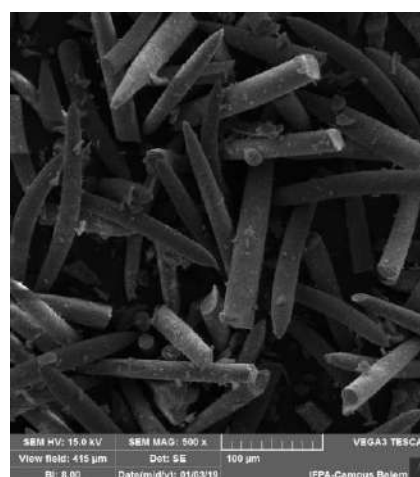


Figure 2. SEM of obtained silica from HCl:H₂O treatment.

Área: QPN

Nº de Inscrição: 00975

Isolation of two novel spidrodrimames through the molecular network study from *Stachybotrys levisporous*.

Alany I. Ribeiro* (PG)¹, Regina V.Oliveira (PG)¹, Thiago Venâncio (PG)¹, Moacir R. Forim (PG)¹, João B. Fernandes (PG)¹, Maria Fátima G. F. da Silva (PG)¹.

Email: *alanyiribeiro@gmail.com; dmfs@ufscar.br.

¹Departamento de Química UFSCar

Palavras Chave: (*Stachybotrys levisporous*, Epigenetic modification, GNPS).

Highlights

This study provides a rapid dereplication of known metabolites from species of *Stachybotrys ssp.* and identification of novel analogues using Global Natural product social molecular networking platform.

Abstract

Saprophyte fungi are being used as an alternative strategy to reduce the use of pesticides harmful to the environment. Structural and chemical diversity of metabolites from microbial origin are factors that call attention mainly to the activity, complexity and the numerous of stereogenic centers. Alterations in the culture medium, and/or the use of chemical and epigenetic modulators can activate silenced routes, giving rise to classes of different compounds from those produced by the main biosynthetic pathway. Analytical tools such as liquid chromatography coupled to high resolution mass spectrometry (LC-HRMS-MS) associated with natural product specific (PN) spectral data platforms, GNPS (Global Natural Product Social Molecular Networking) has proven very effective in the search for new natural products (N). This platform allows the rapid visualization of thousands of MS² spectral data from simple and/or complex matrices. Structurally, the molecular networking is composed of nodes, vectors and clusters. Each node symbolizes a MS/MS spectrum, connected to others via vectors. Thus, nodes are aligned through algorithm and vectors are grouped into clusters of analogues. In this context, saprophyte fungi *Stachybotrys levisporous* (STA) were selected in previous studies by the SISBIOTA-Bioprospection network of saprobic fungi in PPBIO to be studied from the metabolomic point of view. The main objective was to evaluate the chemical profile of STA in solid potato-dextrose-agar medium with addition of epigenetic modulators (hydroxamic acid suberoylanilide and 5-azacytidine) and to identify the metabolites produced by each modification using LC-HRMS/MS and the GNPS platform. The study of the molecular network dereplication allowed the identification of compounds of the class of triphenyl phenols (chemotaxonomic marker for the genus), trichothecenes, griseofulvin and analogues besides bioguided isolation of two novel compounds. It was concluded through this study that *S.levisporous* species produces compounds of different origin and bioactivity predicted in the literature, carrying promising targets in the search for novel PNs.

Acknowledgments

The authors thank the Brazilian agencies of the CNPq- National Council for Scientific and Technological Development, FAPESP- São Paulo Research Foundation and the CAPES-Higher Education Improvement Coordination for their support.

Chemical study of flower extracts from *Hortia oreadica* (Rutaceae)

Marina C. Zequin (PG),^{1*} Maria Fátima G. F. da Silva,¹ (PQ)

marinazequin@gmail.com

¹Departamento de Química, UFSCar;

Palavras Chave: *Hortia*, *Hortia oreadica*, Flowers, Extracts

Highlights

The extracts obtained from *Hortia oreadica* flowers were separated by column chromatography and analyzed by HPLC-UV, GC-MS and NMR, flavonoids, terpenes and triterpenes were identified and isolated.

Resumo/Abstract

Through the years, the genus *Hortia* has been studied searching a better classification within the family Rutaceae. *Hortia* was initially classified in the tribe Toddalioidae, but after limonoids of a high complexity were isolated and identified this placing was questioned, which demanded more studies so the chemistry involved in the taxonomy of this plant was better understood.^{1,2,3}

In this work, the polar and apolar extracts of the flowers were analyzed and purified using a bench column, GC-MS, HPLC-UV and NMR (1D and 2D), in order to isolate and identify secondary metabolites of different classes that contribute to better identification of the genus.

In the hexane extract, six terpenes were identified as major compounds: trans-muurolo-4(14),5-diene, cuparene, β -bisabolene, (Z)-nerolidol, 1(*H*)cycloprop-azulen-7-ol and guaiool (Fig. 1); two triterpenes precursors of the limonoid pathway were isolated and identified, tirucalla-7,24-dien-3 β -ol and 3 α -hydroxytirucalla-7,24-dien-21-oic acid (Fig. 2). In the methanolic extract, it was possible to isolate a flavonoid, quercetin-3- β -D-glucoside (Fig. 2). None of these isolated substances had subsequently been reported within the genus *Hortia*.

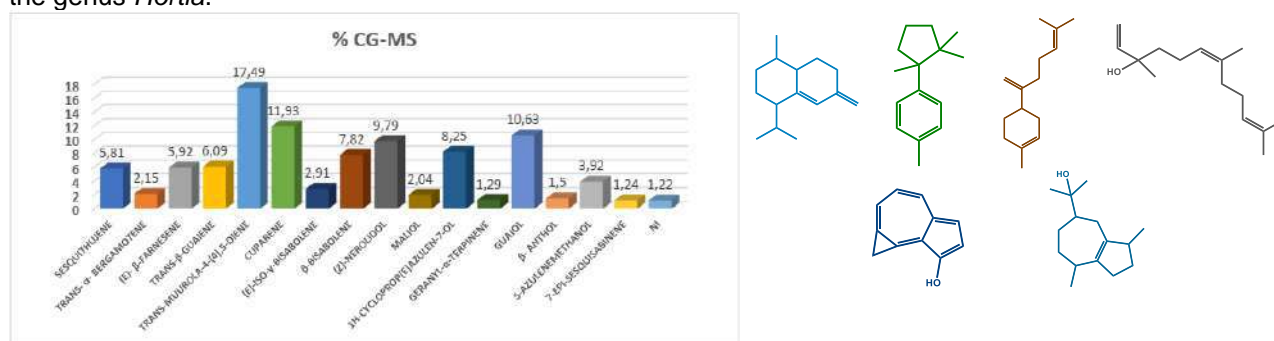


Fig. 1 – a) Compounds identified in *H. oreadica* flowers by GC-MS analysis b) Major compounds

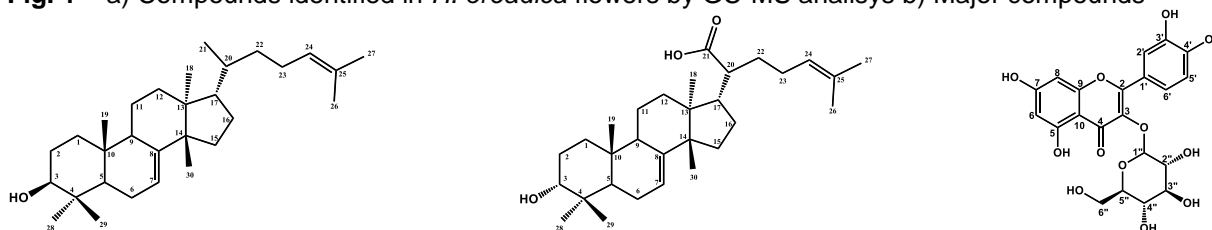


Fig. 2. Compounds isolated from *Hortia oreadica*

¹ American Journal of Botany, v. 95, n. 8, p. 985–1005, 2008.

² Molecules, v. 19, p. 12031-12047, 2014

Agradecimentos/Acknowledgments



Study of the endophytic fungus isolated from *Hortia Oreadica* (Rutaceae) and their Secodary Metabolites.

Dianne Domínguez Formoso (PG),^{1*}Alany Ribeiro (PG), ²M. Fátima GF Silva (PQ).¹

didianne459@gmail.com

Departamento of Chemistry, UFSCAR.

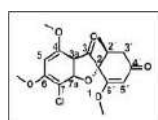
Palavras Chave: *Declorogriseofulvin*, *Xylariaceae*, *Rutaceae*.

Highlights

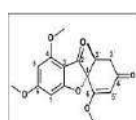
The family Rutaceae is characterized by a great diversity of metabolites. The endophytic fungus belonging to the family Xylariaceae, isolated from Rutaceae genus, was developed in malt agar culture medium, where it produced several secondary metabolites as dechlorogriseofulvin, griseofulvina, 3,4-dihydro-8-hydroxy-3-methylisocoumarin-5-carboxylic acid and spiro[benzofuran-2(3H),1'-[2]cyclohexene]-3,4'-dione. Identification of the fungus is under development via

Resumo/Abstract

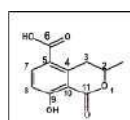
The family Rutaceae is characterized by a great diversity of metabolites and it is one of the largest families in Sapindales. *Hortia* a rutaceous genus contain several rearranged limonoids, which are uncommon in the family. Thus, we isolated several endophytic fungi from this genus to verify if they would have metabolites similar to those of *Hortia*. Identification of these is under development using Maldi-Tof techniques. One of them was identified as belonging to the family Xylariaceae, but the identification of the genus and species has not yet been possible. This fungus was developed malt agar culture medium and led to the production of the following metabolites dechlorogriseofulvin, griseofulvin, 3,4-dihydro-8-hydroxy-3-methylisocoumarin-5-carboxylic acid and spiro[benzofuran-2(3H),1'-[2]cyclohexene]-3,4'-dione. All compounds were identified by NMR, Massa Spectrometry and comparison with the literature. These compounds were assayed as hemolytic activity in blood, and griseofulvin showed less toxic than its derivative dechlorogriseofulvin. They were also assayed against *Staphylococcus aureus* but were not bactericidal.



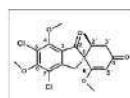
Griseofulvin



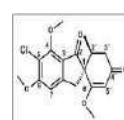
Declorogriseofulvin



Isocoumarin



5-chloro-7-dechlorogriseofulvin
unpublished



5-chlorogriseofulvin

Agradecimentos/Acknowledgments



Área: CAT

Nº de Inscrição: 00978

Sistemas catalíticos para a síntese de ditiocarbonatos e tritioarbonatos cíclicos a partir de epóxidos e dissulfeto de carbono

Stephany L. da S. Ribeiro (PG)^{1*}, Alexandre M. Meireles (PG)², Rafael P. das Chagas (PQ)^{1**}, Olga S. do Rego Barros (PQ)¹, Dayse C. da Silva Martins (PQ)²

* stephanylarissa_outlook.com; ** rafael.pchagas@gmail.com

¹Instituto de Química, UFG; ²Departamento de Química, UFMG

Palavras Chave: (Síntese, Tiocarbonato cíclico, Epóxido, Dissulfeto de carbono, Porfirinas de manganês, Índio).

Highlights

Catalytic systems for the synthesis of cyclic dithiocarbonates and trithiocarbonates from epoxides and CS₂. A new method for the synthesis of cyclic thiocarbonates from epoxides and CS₂ is being developed. Catalytic systems based on manganese porphyrins or indium halides have been shown to be efficient.

Resumo

Dissulfeto de carbono é considerado um bloco de construção C₁ sustentável e de baixo custo. Assim sendo, reações de cicloadição utilizando esse reagente para a produção de heterociclos têm sido cada vez mais exploradas. Ditiocarbonato cíclico (**1**) e tritioarbonato cíclico (**2**) têm despertado interesse por apresentarem atividade radioprotetora¹ e também poderem ser usados na síntese de polímeros². A reação entre epóxidos e dissulfeto de carbono é um método eficiente para a obtenção desses compostos. Essas reações podem resultar em uma complexa mistura, em que um dos principais desafios é o controle da quimiosseletividade.

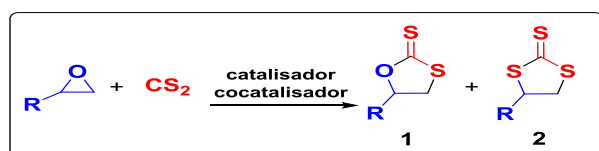
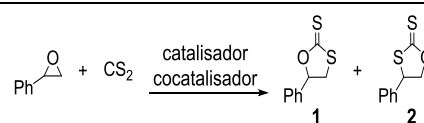


Figura 1. Reação de cicloadição geral de CS₂ e epóxidos.

A tabela 1 contém os resultados preliminares da otimização. A conversão do material de partida, bem como a caracterização dos produtos, foi determinada por meio de análises de RMN (¹H) e por comparação com dados já reportados. Diferentes catalisadores e cocatalisadores foram testados. (TBA)[InCl₃] mostrou ser seletivo para a síntese de **1** (Tab. 1, entradas 1-2). O uso combinado de TBAB/InCl₃ ou TBAB/[Mn^{III}TPFPPI] propiciou a formação dos dois produtos, **1** e **2** (Tab. 1, entradas 3-4). O cocatalisador Et₃N apresentou atividade apenas quando a reação foi realizada a 60 °C com 5 mol% (Tab. 1, entradas 5-7). Quando a reação é feita a 100 °C com TBAB/[Mn^{III}TPFPPI] nota-se a conversão completa do material de partida em apenas 3 h (Tab. 1, entrada 8). Em temperatura

ambiente (25 °C), apenas traços dos produtos foram formados. No entanto, em temperaturas mais elevadas houve a conversão completa do epóxido.



| Entrada | Cat (mol%) | Cocat (mol %) | T (°C) | t (h) | Conversão | Seletividade(1:2) |
|----------------|-----------------------------------|-----------------------|--------|-------|-----------|-------------------|
| 1 | (TBA)[InBr ₄] (1) | - | r.t. | 24 | 3% | 1:0 |
| 2 | (TBA)[InBr ₄] (2,5) | - | r.t. | 24 | 9% | 1:0 |
| 3 | InCl ₃ (0,2) | TBAB (1) | r.t. | 24 | 3% | 1:2 |
| 4 | [Mn ^{III} TPFPPI] (0,02) | TBAB (1) | r.t. | 24 | 2% | 1:1 |
| 5 | InCl ₃ (0,2) | Et ₃ N (1) | r.t. | 24 | 0% | 0:0 |
| 6 | InCl ₃ (0,2) | Et ₃ N (2) | r.t. | 24 | 0% | 0:0 |
| 7 | [Mn ^{III} TPFPPI] (0,02) | Et ₃ N (5) | 60 | 24 | 100% | 1:5 |
| 8 ^a | [Mn ^{III} TPFPPI] (0,02) | TBAB (0,5) | 100 | 3 | 100% | 1:2 |

Condições reacionais: 2-feniloxirana: 1 eq, CS₂: 2 eq; ^a Reação feita em um reator Parr 4561

Tabela 1. Otimização

Portanto, pelos resultados iniciais, verifica-se que a porfirina de manganês, [Mn^{III}TPFPPI], mostrou ser um catalisador ativo para a síntese de ditiocarbonatos e tritioarbonatos cíclicos. Esse trabalho encontra-se em fase de desenvolvimento. Outros sistemas catalíticos, utilizando compostos de índio, serão testados e os resultados serão reportados posteriormente.

Agradecimentos: FAPEG, CAPES, PPGQ/IQ/UFG, FAPEMIG

Referências:

- [1] DOI: 10.1039/c6ob01081d
 [2] a) DOI: 10.1021/ma971701s
 b) DOI: 10.1016/j.polymer.2015.11.011

Área: TEO*(Inserir a sigla da seção científica para qual o resumo será submetido. Ex: ORG, BEA, CAT)***Nº de Inscrição:** 00979*(Inserir o número de inscrição do autor que fez a submissão)*

Computational studies of alkaline and carboxylesterases hydrolysis reaction of methyl, ethyl and n-propyl benzoates

Harold Hilarion Fokoue (PQ),¹ Hygor M. R. de Souza (PG),¹ Luis G. V. Gelves (PQ),¹ Jessica S. Guedes (PG),¹ Rosana H. C. N. Freitas (PQ),¹ Eliezer J. Barreiro (PQ),¹ Lídia M. Lima (PQ)¹ Carlos Mauricio R. Sant'Anna (PQ),^{1,2}

hfokoue@gmail.com; santanna@ufrj.br

¹Laboratório de Avaliação e Síntese de Substâncias Bioativas (LASSBio®), Universidade Federal do Rio de Janeiro, CCS, Cidade Universitária, Rio de Janeiro-RJ, Brazil.

²Departamento de Química Fundamental, Instituto de Química, Universidade Federal Rural do Rio de Janeiro, Seropédica, Brasil.

Keywords: Computational studies, carboxylesterases, benzoate derivatives, transition state studies, Pro-drugs.

Highlights

The difference of half-life of three alkyl benzoates in alkaline and carboxylesterases hydrolysis was explained with computational studies of the reaction kinetic. The transition state energy was calculated.

Resumo/Abstract

Esters represent common structural subunits in prodrugs and candidates for prototypes of drugs easily metabolized by esterases¹, present in plasma. From the chemical point of view, ester hydrolysis is well described in basic conditions². On the other hand, enzymatic ester hydrolysis depends on the participation of the catalytic triad, which promotes the deprotonation of a serine residue and the addition of the corresponding alkoxide to the ester carboxyl³. Thus, it is possible to anticipate similar mechanistic characteristics between the base- and the esterase- promoted hydrolysis, such as those involving carboxylesterase enzymes (CES). In this work, we performed computational studies of alkaline and CES-promoted hydrolysis reaction of methyl, ethyl and n-propyl benzoate in order to investigate differences between them.

Under alkaline hydrolysis, methyl, ethyl and n-propyl benzoate showed half-lives of 14, 15 and 19 min, respectively, whereas in rat plasma, which contains CES, they presented half-lives in inverse order: 36, 17 and 10 min, respectively. The alkaline hydrolysis experimental results were in accordance with the literature⁴. Theoretical studies were carried out to search for explanations for the different kinetic profile of compounds hydrolysis observed in alkaline and enzymatic conditions. For enzymatic conditions, the reactant complex geometries were obtained from docking studies of the compounds into a CES (PDB code 1YAJ), with the GOLD program with ChemPLP followed by rescoring with ChemScore. The transition state structures of the slow step were obtained with PM6-DH2⁵ calculations, using the LOCATE-TS⁶ and TS⁶ keywords of MOPAC2016. The activation energies were calculated from the respective enthalpy data. For enzymatic hydrolysis, the activation energies were 174.04, 131.78 and 120.44 kJ/mol for methyl, ethyl and n-propyl benzoate, respectively, in accordance with the experimental result. In the absence of the enzyme, the results were 2.66, 5.21 and 12.28 kJ/mol for methyl, ethyl and n-propyl benzoate, respectively, in accordance with the alkaline hydrolysis. In the enzyme-catalyzed reaction, the longer the alkyl group, the more stable the TS is and faster the reaction. The binding site structural features that stabilize of the TS structures will be discussed.

References: ¹Rautio, J. *et. al. Nat. Rev. Drug Discov.* **2008**, 7, 275. ²Bender, M. L. *Chem. Rev.* **1960**, 60, 53. ³Aranda, J. *et. al. Biochemistry.* **2014**, 53, 5820. ⁴Wang, H. *Res. Chem. Intermed.* **2012**, 38, 2175. ⁵Korth *et al. J. Chem. Theory Comp.* **2010**, 6, 344–352, ⁶Stewart, J. *Mol. Model.* **2017**, 23:154.

Agradecimentos/Acknowledgments

FAPERJ, CAPES, INCT-INOVAR

Computational study of the performance of glycerol/base system in CO₂ capture

Larissa F. Vasconcelos (IC)*¹, Rodolfo G. Fiorot (PG)^{1,2}, José Walkimar de M. Carneiro (PQ)¹

lferreiravas@hotmail.com; fiorot.rodolfo@gmail.com; jose_walkimar@id.uff.br

¹Departamento de Química Inorgânica, Universidade Federal Fluminense, Outeiro de São João Batista s/n, 24020-141, Niterói, RJ, Brazil. ²Instituto Federal de Educação, Ciências e Tecnologia do Rio de Janeiro (IFRJ)-campus Realengo, Rio de Janeiro, 21715-000, Brazil.

Keywords: Carbon dioxide, Capture, Glycerol, DFT.


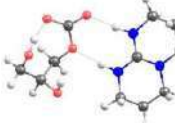


Highlights

The excess atmospheric CO₂ is a problem that causes serious climate changes. One solution for this is the carbon dioxide's capture. This study reports an alternative process using a glycerol/guanidine and another bases system.

Resumo/Abstract

According to experimental¹ and theoretical² works, guanidine (TBD) is a promising CO₂ scavenger. Biofuel production is also a way to reduce it, naturally capturing atmospheric CO₂,³ although high amounts of by-product glycerol are generated.⁴ This work computationally investigate new systems based on glycerol/bases association in CO₂ capture. The simulations were performed using the DFT approach, CAM-B3LYP/6-311++G(2d,2p) level, with implicit solvation model (IEFPCM) for water.

Table 1: Relative Gibbs Free Energies of relevant stationary points in CO₂ capture with TBD/glycerol system.

| Initial State | Carbonate formation | Bicarbonate formation | Carbamate formation |
|---|---|---|---|
|  |  |  |  |
| 0.00 kcal mol ⁻¹ | -11.19 kcal mol ⁻¹ | Not found | -8.24 kcal mol ⁻¹ |

Relative Gibbs Free Energies of the initial state (before deprotonating the glycerol and CO₂ capture), carbonate, bicarbonate and carbamate with TBD/glycerol system formation are shown **Table 1**. The same calculations were performed for the following bases, shown in **Table 2**.

Table 2: Relative Gibbs Free Energies for CO₂ capture by glycerol/base.

| Base | ΔG carbonate formation [kcal mol ⁻¹] | ΔG bicarbonate formation [kcal mol ⁻¹] | ΔG carbamate formation [kcal mol ⁻¹] |
|-------------------------------|--|--|--|
| Hydroxide | -10.36 | 27.18 | -3.07 |
| Guanidine | -7.83 | Not found | -7.50 |
| N,N-(dimethyl)ethylenediamine | -2.92 | Not Found | 7.97 |
| Trimethylamine | -1.69 | 12.15 | 6.88 |

ΔG results reveal that carbonate formation by TBD/glycerol system is the thermodynamically more favored. Carbonate formation with all other systems are also spontaneous, although only hydroxide and guanidine allows spontaneous carbamate formation.

¹ Pereira, F.S. et al. *Tetrahedron*. **2008**, *64*, 10097; ² Orestes, E. et al. *Phys. Chem. Chem. Phys.* **2014**, *16*, 17213; ³ Costa, O. A. et al. *Renew. Sustain. Energy Rev.* **2013**, *27*, 407; ⁴ Heider, M. K. et al. *Nature Chemistry*, **2015**, *7*, 1028.

Agradecimentos/Acknowledgments

CNPq, FAPERJ, PIBIC, PROPPi UFF.

Molecular Docking and Inhibition Studies of α -Amylase and Lipase Activities by Trans- β -Caryophyllene and Caryophyllene Oxide

Derli R.C. Dantzger (IC)^{1*}, Renieidy F.C. Dias (PG)^{2**}, Allisson B. Justino (PG)², Francisco M. F. Dias (IC)³, Found S. Espindola (PQ)².

ranieridantzger@gmail.com*; flavia.clemente@ufrgs.br**

¹Universidade do Oeste Paulista, UNOESTE; ²Universidade Federal de Uberlândia, UFU; ³Universidade Estadual Vale do Acaraú, UVA.

Keywords: Natural products; Trans-Caryophyllene; Caryophyllene Oxide; Amylase; Lipase; Molecular Docking.

Highlights

The present study was designed to estimate molecular docking and evaluate the potential of inhibition in vitro of the α -amylase and lipase enzymes. These two enzymes are involved with diabetes and obesity, respectively.

Resumo/Abstract

This study investigated between amylase and Lipase inhibitory activity by sesquiterpenes found in the many *Psidium* species plants (Trans- β -caryophyllene and Caryophyllene Oxide). The GOLD software was used to perform molecular docking calculations with the function of ChemPLP. *In silico* studies were performed between human salivary α -amylase (HAS) with Trans- β -caryophyllene and Caryophyllene Oxide and also Lipase enzyme with Trans- β -caryophyllene and Caryophyllene Oxide. Firstly, An anchorage study was carried with positive control (Orlistat) for Lipase and with positive control (Acarbose) for Alpha-amylase. Subsequently, was verified the active site of enzymes, and was evaluated such as trans- β -caryophyllene and caryophyllene oxide interacts with this the active site. All the molecules were designed in the Discovery Studio program and an optimization in the Mercury software with the package MOPAC, through semi-empirical method PM7. Enzymes were removed from the Protein Database (<http://www.rcsb.org/pdb/home/home.do>), a human salivary alpha amylase (PDB ID: 3BLP) and human pancreatic lipase (PDB ID: 1LPB). The results of the alpha amylase score with acarbose, trans- β -caryophyllene and caryophyllene oxide were respectively 69.88, 40.46 and 41.64, and for lipase with orlistat, trans- β -caryophyllene and caryophyllene oxide were 92.5, 49.9 and 43.2. Inhibition of enzyme activities in vitro was also observed, confirming IC₅₀ mg/mL for caryophyllene oxide of 0.2092 \pm 0.02, trans- β -caryophyllene >1, and positive control orlistat 0,17 \pm 0.05 for lipase, and a study should still be done with alpha-amylase enzyme. The results obtained in the laboratory were similar to those of caryophyllene oxide that were superior to the positive control for the enzymatic inhibition of lipase.

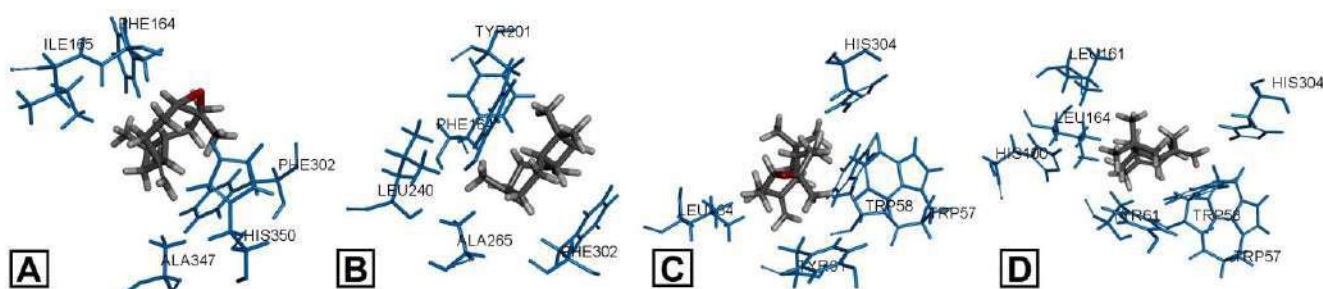


Figure 1. Amino acids from lipase interactions with caryophyllene oxide (A) and trans- β -caryophyllene (B); Amino acids of alpha-amylase with caryophyllene oxide (C) and trans- β -caryophyllene (D).

Agradecimentos/Acknowledgments



Unoeste



UNIVERSIDADE ESTADUAL VALE DO ACARAU



Área: ELE

Nº de Inscrição: 00983

Determination of D-xylose in sugarcane bagasse using an electrode based on reduced graphene oxide and molecularly imprinted poly(phenol)

Luiz Felipe P. P. Moreira (IC)^{1,2*}, Edervaldo Buffon (PG)^{1,2}, Nelson R. Stradiotto (PQ)^{1,2,3}

lufe_moreira@hotmail.com; nrstradi@gmail.com

¹Institute of Chemistry, São Paulo State University (UNESP), Araraquara, SP, Brazil; ²Bioenergy Research Institute, São Paulo State University (UNESP), Araraquara, SP, Brazil; ³School of Industrial Engineering Metallurgical Volta Redonda, Fluminense Federal University (UFF), Volta Redonda, RJ, Brazil.

Keywords: Electrochemical Sensor, Reduced Graphene Oxide, Molecularly Imprinted Polymer, Phenol, D-xylose, Sugarcane Bagasse.

Highlights

D-xylose is the raw material for several higher value-added compounds; The quantification of D-xylose is important to evaluate the efficiency of the conversion processes of this sugar; The first electrochemical sensor based on molecularly imprinted polymer was developed for determination of D-xylose.

Abstract

D-xylose is the main sugar constituent of hemicellulose of sugarcane bagasse. In view of this, D-xylose has been the object of several studies, since it can be used in the production of higher value-added compounds, such as hydrogen¹, xylitol² and furfural³. Due to the promising reuse of sugarcane bagasse to obtain higher value-added products from D-xylose, the existence of low-cost, sensitive and selective quantification methods for this sugar is of great importance. In this context, electrodes modified with reduced graphene oxide (RGO) and molecularly imprinted polymers (MIPs) are a viable option for this purpose, since the RGO and the MIP give the modified electrode a considerable increase of sensitivity and selectivity, respectively. Phenol (Ph) is a monomer commonly used for the preparation of MIPs due to its ability to adsorb on electrode surfaces. In addition, poly(Ph) films can interact with several analytes through the π - π stacking⁴. In view of this, the objective of this work was to develop an electrochemical sensor based on a glassy carbon electrode (GCE) modified with RGO and MIP for the determination of D-xylose in sugarcane bagasse. Using an aqueous suspension of 0.50 mg mL⁻¹ graphene oxide (GO) in 0.10 mol L⁻¹ Na₂SO₄, the modification of GCE with GO was carried out by applying a constant potential of 1.5 V for 500 seconds. For the preparation of the MIP, the GCE/RGO electrode was immersed in a solution containing 1.0×10⁻³ mol L⁻¹ Ph and 3.0×10⁻³ mol L⁻¹ D-xylose (PBS; pH 6.0), and 10 consecutive voltammetric cycles were applied in a potential range of -0.30 to 1.2 V at 50 mV s⁻¹. To remove the template of D-xylose, the GCE/RGO-MIP electrode was inserted into a solution of acetonitrile-acetic acid (5:2 v/v) for 60 seconds. Meanwhile, for the rebinding studies, the electrode was inserted into different solutions of D-xylose (PBS, pH 8.0) for 10 minutes. The modified electrode was characterized by several techniques, such as cyclic voltammetry, electrochemical impedance spectroscopy, scanning electron microscopy, RAMAN spectroscopy and atomic force microscopy. The parameters that influence the analytical performance of the GCE/RGO-MIP sensor were optimized and the electroanalytical response of this device was monitored by differential pulse voltammetry using the redox pair [Fe(CN)₆]^{3-/4-} as an electrochemical probe. Under optimized conditions, the developed sensor presented wide linear ranges from 1.0×10⁻¹³ to 1.0×10⁻¹⁰ mol L⁻¹, with detection limit and quantification limit of 2.6×10⁻¹⁴ mol L⁻¹ and 8.6×10⁻¹⁴ mol L⁻¹ (n = 3) respectively. In addition, this device showed to be selective for the recognition of D-xylose in the presence of other sugars that are present in the sugarcane bagasse. The methodology developed in this work was successfully applied in a sample of sugarcane bagasse. The determination of D-xylose in this biomass was performed by the standard addition method. The amount of D-xylose determined was 4.8×10⁻³ mol L⁻¹. The results obtained were validated by recovery assays, where values between 96 and 104% were found.

¹ Martin del Campo, J. S. et al., *Angew. Chem. Int. Ed.*, v.52, p.4587-4590, 2013; ² Li, L. et al., *Biosens. Bioelectron.*, v.33, p.100-105, 2012; ³ Vaz Jr. S. et al., *Bioresources*, v.10, p.8168-8180, 2015; ⁴ Ribeiro, J. A. et al., *Anal. Chim. Acta*, v.981, p.41-52, 2017.

Acknowledgments

CNPq (Process: 159701/2017-1), CAPES (Process: 1777201) and FAPESP (Process: 2017/23529-6).

Study of semiochemicals from tomatoes cultivated in Catalão - GO.

Marcos H. Faleiros-Santos (PG),¹ Jéssica S. Silva (IC),¹ Marcelo B B. Guerra (PQ)^{1,2}, André L. F. Sarria (PQ),³ Richele P. Severino (PQ).^{1*}

Jessicassilvaq1@outlook.com; *richeleps@yahoo.com.br

¹Unidade Acadêmica Especial de Química, Universidade Federal de Goiás – Regional Catalão, Av. Dr. Lamartine P. Avelar, Catalão, Goiás, Brasil; ²Departamento de Química, Universidade Federal de Lavras, Câmpus Universitário, Caixa Postal 3037, CEP 37200-000, Lavras/MG; ³Green Universe Agriculture, Calle Patones, s/n – Parcela 28.3 – P.I. Ventorro del Cano 28925 Alcorcón, Madrid, España.

Palavras Chave: *semiochemicals, tomatoes, whitefly.*

Highlights

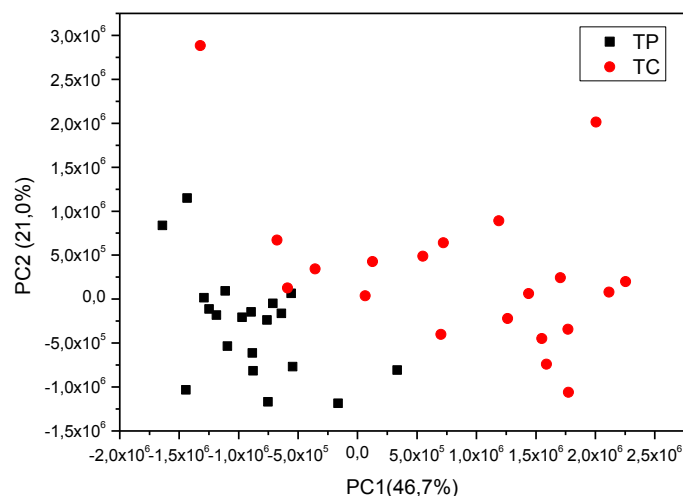
GC-MS was a useful tool for detecting the target compounds.

Principal Component Analysis helps visualization of the differences between the varieties of tomatoes based on raw chromatographic spectra.

Resumo/Abstract

Plants are naturally exposed to a large number of enemies, therefore, as mechanisms of defense, they can produce specific compounds to act directly or indirectly against pests. Among these pests, insects are recognized as an important player and plants are able to emit chemical compounds (semiochemicals) to communicate with them. The study of these insect-plant interactions belongs to the field of Chemical Ecology. Some pests, such as whitefly, are responsible for economic damages related to commercial production of tomatoes. This work aims at studying Volatile Organic Compounds (VOCs) and Non-Volatile Organic Compounds (NVOCs) produced by varieties of tomatoes in Catalão (Goiás State): Puglia (TP) and Compack (TC). TC is a resistant variety to geminivirus released by whitefly. The seedlings were collected from a plant nursery and grown in a greenhouse at the Federal University of Goiás and at a farm in Catalão. The NVOCs were extracted with ethanol and the VOCs were collected using SPME fibers and both were analysed by Gas Chromatography-Mass Spectrometry. The NVOCs were analysed by Principal Component Analysis (PCA), where the PC1, PC2 and PC3 explained 83% of variance. The scores plot of PC1 showed the separation of two groups of tomatoes varieties (Figure 1). The analyses of the SPME fibers of all cultivars showed an abundance of the compounds β -felandren, (-)- β -pinene, (+)-4-carene, *p*-cymene. The next step in this study will be the controlled infestation of crops with whitefly, in greenhouse conditions, and the further determination of the emitted VOCs and NVOCs, as a way to elucidate the semiochemical defense mechanism.

Figure 1: Scores plot of Principal Component Analysis (PCA). Tomatoes varieties: Puglia (TP) and Compack (TC).



Agradecimentos/Acknowledgments

UFG-RC, FAPEG, CAPES e CNPQ.

42ª Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química: Eixos Mobilizadores em Química

Synthesis and Characterization of Cu/CNT Heterogeneous Catalyst for Application in Click Chemistry.

Caroline Maroli (IC),¹ Sumbal Saba (PQ),¹ Tairine Pimentel (PG),² Jamal Rafique (PQ),² Daniela Zambelli Mezalira (PQ).^{1*}

caroline_maroli@hotmail.com; daniela.z.m@ufsc.br.

¹Department of Chemistry, Federal University of Santa Catarina (UFSC), Florianópolis - SC; ²Institute of Chemistry, Federal University of Mato Grosso do Sul (UFMS), Campo Grande – MS.

Keywords: Cu-Nanotubes, Heterogeneous catalysis, Click chemistry, Green chemistry.

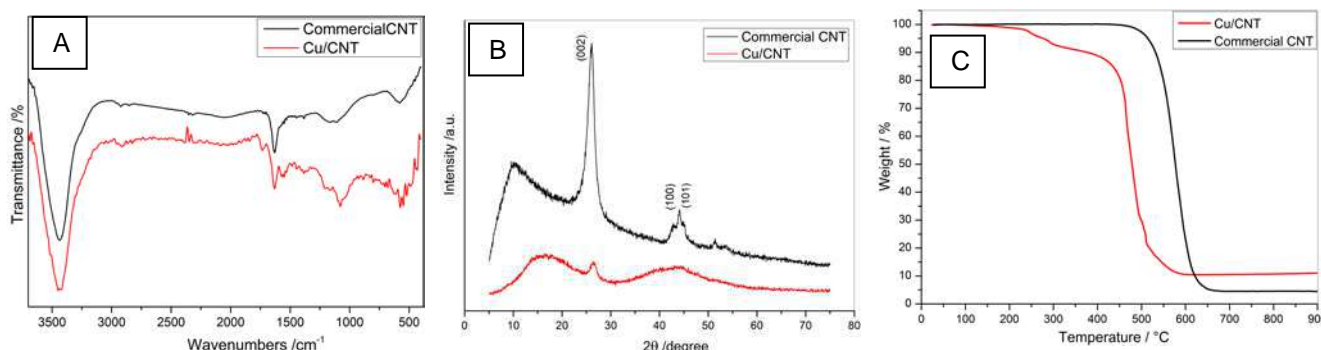
Highlights

Synthesis of Cu/CNT by the polyol method using microwave irradiation. Catalyst characterization and application in click chemistry. A sustainable and one-pot approach.

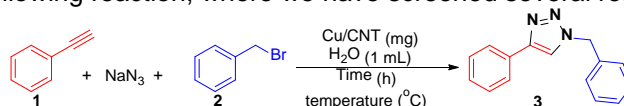
Abstract

Catalysts are extremely important in organic reactions by reducing the processing time of a reaction. In last few decades, click chemistry appeared to be an important tool for academia as well as for pharmaceutical industries.¹ Recently, major advances have been achieved in area of click chemistry, in order to access triazole.² Keeping in mind that the triazole family has pharmacological and material science applications and considering our interest in transition metal-catalyzed coupling reactions and sustainable chemistry,^{3,4} herein, we report the synthesis of Cu/CNT via polyol method using microwave irradiation and their successful application in the preparation of triazole via click chemistry. The catalyst was characterized by X-ray diffraction (XRD), Fourier transform infrared spectroscopy (FTIR) and thermogravimetric analysis (TGA), as shown in Figure 01. Such analyzes were compared with commercial carbon nanotubes in order to observe differences after addition of copper.

Figure 01: (A) FTIR, (B) XRD and (C) TGA of commercial CNT (black line) and the catalyst Cu/CNT obtained by polyol method (red line).



In order to explore the application of Cu/CNT we applied it on click chemistry. For this, we initiated our studies by evaluating the following reaction, where we have screened several reaction parameters:



It is noteworthy to mention that the best reaction condition was established by using 7 mg of the catalyst at 70 °C for 6 hours reaction time, affording the desired product 3 in 99% yield.

Acknowledgments

UFSC, UFMS, CAPES and CNPq (433896/2018-3) for financial support and scholarship; LCME-UFSC and Central de Análises-QMC/UFSC for the free access to the necessary equipment.

¹GG. Clave, S. Campidelli, *Chem. Sci.*, **2011**, 2, 1887-1896.

²F. Alonso, et al., *Org. Biomol. Chem.*, **2011**, 9, 6385-6395

³S. Saba, et al., *Molecules*, **2017**, 22, 1367.

⁴M. M. Peterle, et al., *ChemistrySelect*, **2018**, 3, 13191-13196.

Highly efficient upscalable processes to concentrate glycosylated diterpenes from coffee beans using Macroporous Polimeric Resins with detection by TLC-MS.

Gabriel Diniz de Moura Oliveira (IC)^{1,2*}, Filipe Kayodè Felisberto dos Santos (PG)²; Claudia Moraes de Rezende (PQ)¹; Valdir Florêncio Veiga Júnior (PQ)².

mouragabriel94@gmail.com; filipe.kayode@gmail.com;

¹Federal University of Rio de Janeiro ²Military Engineering Institute

Keywords: Coffee, Extraction, Resin, TLC-MS

Highlights

Enrichment of glycosylated diterpenes (GD), key molecules in coffee quality. Use of mixtures of organic solvents and macroporous polymer resins for the concentration of GD's. Evaluation by TLC-MS in normal and reverse phase.

Resumo/Abstract

Coffee is an important matrix of the chemistry of natural products and compounds such as glycosylated diterpenes (GD) have been shown capable of influencing the taste of the beverage and thus act as markers of quality. However, there are no specific methodologies in the literature that aid in the detection of these substances, since this group of polar molecules are found in small amounts in the coffee beans. In order to optimize the analytical processes, the objective of this work is to develop a methodology that can extract GDs, using different organic solvents and making use of macroporous polymeric resin chromatography (MPR) for the enrichment of the products of interest. From various combinations of solvents, chloroform/acetone system showed the best result to clean apolar substances and, later, ethanol was able to extract only polar substances. Ethanol fraction was better fractionated in MPR XAD-16 than XAD-2. After concentration processes, fractions were analyzed by TLC-MS (Thin Layer Chromatography - Mass Spectrometer).

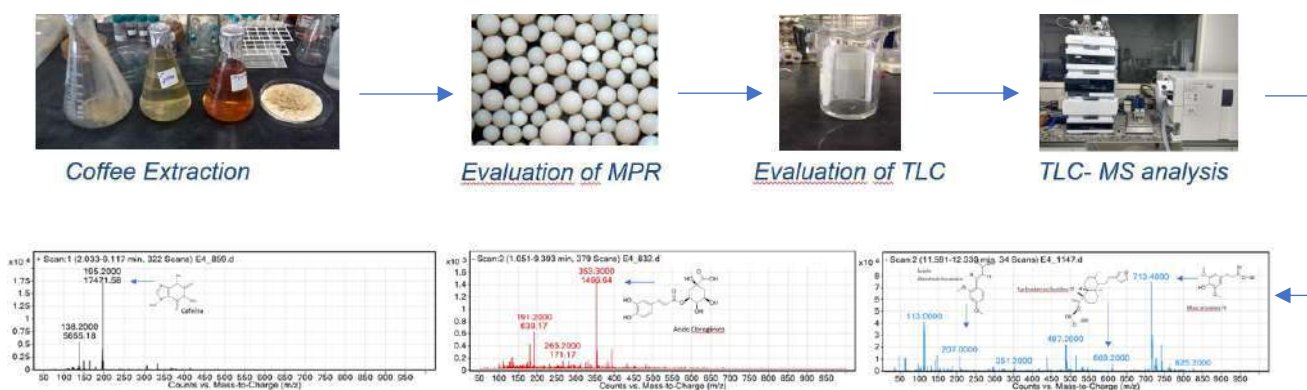


Figure 1: Fluxogram of the steps for obtaining and detecting glycosylated diterpenes

It was possible to separate and detect several substances through molecular ions such as caffeine and chlorogenic acids. In the GDs enriched fraction were identified mascaroside IV and carboxyatractyloside III. The developed methodologies showed to be effective in promoting a concentration and identification of more polar compounds using robust analytical techniques.

Agradecimentos/Acknowledgments

Thanks to CAPES and CNPq for the financial support and to the Army Technological Center (CTEx) for providing equipments to carry out this work

Área: ANA

Nº de Inscrição: 00989

Colorimetric method for detecting methanol in ethanol fuel fraud

Larissa A.M.Modesto (PG),^{1*} José Eduardo de Oliveira (PQ),¹ Marcos Roberto Monteiro (PQ),¹ Danilo Luiz Flumignan (PQ).²

larissamodesto@gmail.com.

¹UNESP - São Paulo State University, Institute of Chemistry, Center for Monitoring and Research of the Quality of Fuels, Biofuels, Crude Oil and Derivatives (CEMPEQC); ²Federal Institute of Education, Science and Technology of São Paulo (IFSP).

Palavras Chave: (Ethanol, Methanol, Fuel fraud, Chromotropic acid)

Highlights

Methanol is common in ethanol fuel fraud. We triggered the oxidation of the alcohol sample and then, we colored the methanol oxidation product. UV-Visible analysis determinate the quantity of methanol in ethanol.

Resumo/Abstract

The Brazilian National Agency of Petroleum, Natural Gas and Biofuels limits the quantity of methanol in ethanol fuel and gas to 0.5%, and establishes that methanol must be determined by gas chromatography^[1]. Recently, the Agency has detected a large number of gas stations selling fraudulent gasoline and ethanol fuels that contained methanol above permitted. In order to control the quality of these fuels, Guilherme Martins^[2] developed a colorimetric kit for detection of methanol, but its chromogenic agent is not stable, so its method is only qualitative. In order to obtain an alternative one with a stable chromogenic agent, which will be validated by gas chromatography and could be used as a quantitative method, faster and cheaper than chromatography, we studied the oxidation of the alcohol sample with potassium dichromate, and then, we colored the methanol oxidation product with chromotropic acid. Finally, a UV-Visible spectroscopy analysis is made to quantify the methanol present. Figure 1 shows the alcohol samples with potassium dichromate and then the addition of chromotropic acid solution. It's possible to see that the purple increases with the quantity of methanol present.



Figure 1. A) Left to right: ethanol samples mixed with 0,3%, 0,5%, 0,6%, 0,9% methanol. After, all solutions were mixed with potassium dichromate solution. B) Left to right: ethanol mixed with 0,3%, 0,5%, 0,6%, 0,9% methanol. After, potassium dichromate and chromotropic acid solution were added to all the solutions.

^[1]AGÊNCIA NACIONAL DO PETRÓLEO. Resolução ANP N^o 696 DE 25 de outubro de 2013. Diário Oficial da União, Brasília, DF, 30 oct. 2013. Available in: <<https://www legisweb.com.br/legislacao/?id=261207>>. Accessed in: 09 nov. 2018. ^[2] MARTINS, G.B.C. Kit colorimétrico para detecção de metanol em etanol combustível para o monitoramento da qualidade de combustíveis. Química Nova, Vol. 38, No. 2, 280-284, 2015.

Agradecimentos/Acknowledgments

CEMPEQC (Institute of Chemistry - UNESP), IFSP (Campus Matão), CNPq.

Área: CAT

Nº de Inscrição: 00990

CO₂ Hydrogenation to Methanol and Dimethyl Ether (DME) over Modified γ -Alumina Bifunctional Catalysts

Guilherme C. Almeida (PQ)¹, Davi F. Carvalho*(PG)², Robson S. Monteiro (PQ)^{2,3}, Claudio J.A. Mota (PQ)^{1,2}

g.camelier@gmail.com; davifceq@gmail.com

¹ Institute of Chemistry, UFRJ; ² School of Chemistry, UFRJ; ³ Companhia Brasileira de Metalurgia e Mineração (CBMM).

Palavras Chave: (CO₂, Hydrogenation, Dimethyl Ether, Methanol, γ -Alumina, Bifunctional Catalysts).

Highlights

Cu.ZnO based catalysts supported on acid materials have been used to hydrogenate CO₂ to produce DME. We report the use of (NH₄)₂SiF₆ to modify a γ -Al₂O₃ and incorporate some Si atoms on its structure.

Resumo/Abstract

The hydrogenation of CO₂ to methanol is a key process regarding CO₂ reuse and reutilization. CO₂ hydrogenation is performed over promoted Cu.ZnO based catalysts. Supporting these Cu.ZnO based catalysts over acidic materials such as γ -Al₂O₃ or zeolites, it's possible to directly produce DME¹. Our research group has been studying the hydrogenation of CO₂ to methanol and DME¹. We report the use of (NH₄)₂SiF₆ to modify the acidity of a γ -Al₂O₃ solid acid support. To a suspension of the γ -Al₂O₃ on an ammonium acetate solution it was added, drop wise, a 0.3M (NH₄)₂SiF₆ aqueous solution to achieve an incorporation of 4 and 8 wt% of Si atoms. The resulting material was characterized by X-ray fluorescence, NMR and n-butylamine TPD. Table 1 shows the acidity, indicating that incorporation of Si atoms led to an increase of the strong acid sites.

Table 1: Number of acid sites in mmol/g. Done by n-butylamine TPD analysis.

| Support | Weak Sites | Medium sites | Strong sites | Total acid sites |
|--|------------|--------------|--------------|------------------|
| Pure γ -Al ₂ O ₃ | 1.17 | 0.39 | 0.21 | 1.77 |
| 4%Si on γ -Al ₂ O ₃ | 0.82 | 0.40 | 0.30 | 1.53 |
| 8%Si on γ -Al ₂ O ₃ | 0.90 | 0.40 | 0.37 | 1.67 |

The bifunctional catalysts were prepared by the impregnation of the metals to our modified γ -Al₂O₃. The effect of Zr promotion over Cu.ZnO was also investigated. We observed from the catalytic tests performed that Zr promotion led to slightly decrease on the production of DME. The results indicated that modification of alumina with (NH₄)₂SiF₆ increases the concentration of the strong acid sites leading to a better selectivity to DME.

Agradecimentos/Acknowledgments

The authors would like to acknowledge COPPETEC Foundation and FAPERJ.

¹Da Silva, R. J.; Pimentel, A.F.; Monteiro, R. S.; Mota, C..J.A. J. CO₂ Util. **15**, 83-88, 2016.

Virtual screening and molecular modeling studies on the inhibition of the enzyme amyloid- β alcohol dehydrogenase (ABAD).

Charline B. F. T. Abreu (PG),¹ Joyce S. F. D. de Almeida (PQ),¹ Tanos C. C. França (PQ),^{1,2} Kamil Kuca (PQ).^{1,2}

joycesfdalmeida@gmail.com; tanosfranca@gmail.com

¹Department of Chemical Engineering, Military Institute of Engineering (IME); ²Department of Chemistry, University of Hradec Kralové (UHK)

Keywords: ABAD, Virtual screening, Docking, Alzheimer disease.

Highlights

ABAD, mTOR and AChE activities are related to Alzheimer disease (AD);
New drugs capable of inhibit those enzymes are useful for the treatment of AD;
Virtual screening techniques are useful to find new potential inhibitors of these enzymes.

Resumo/Abstract

About 115 million people over 60 years-old are expected to present Alzheimer disease (AD) by 2050¹. This disease causes dementia and neuronal loss, mainly to the elderly, and may lead to death in 3 to 9 years after the appearance of the first symptoms². The activities of some enzymes like amyloid- β alcohol deshydrogenase (ABAD), mammalian target of rapamycin (mTOR) and Acetylcholinesterase (AChE) may contribute to the development AD in human body. Then it is important for the AD treatment to find compounds that can inhibit one or more of them.³ In this work, ligand and receptor-based virtual screening and docking studies were performed with ABAD tetramer using the softwares Autodock Vina⁴ and Molegro Virtual Docker⁶⁵. 15 compounds presenting more than 80% of similarity with the ABAD natural substrate TDT (tienopyrimidine pirazole analogue) were selected. In the next step, surface screening on the enzyme were carried out to evaluate interaction energies and also preferential binding sites. Results showed that the selected ligands presented very close binding energy values to TDT and that the preferential binding site is the shared active site between monomers B and C. Figure 1 shows the result for one of the ligands. It presented H-bond interactions with residues Gly17, Ser20, Asp41, Ser155, Gln165, Tyr168, Lys172 on the monomer B, and binding energy value close to TDT.



Figure 1. Virtual screening results for ABAD tetramer

References:

1. Shajil, K. S.; Smitha, K.; Praveen, K. L.; Prince M. **Caregivers Of Patients With Alzheimer's Disease : A Qualitative Study From The Indian 10/66 Dementia Research Network.** *Int. J. Geriatr. Psychiatry.* 2002,18,1.
2. Schonrock, N.; Matamales, M.; Ittner, L. M.; Gotz, J. **MicroRNA networks surrounding APP and amyloid- β metabolism—implications for Alzheimer's disease.** *Exp. Neurol.* 2012, 235, 447.
3. Constantino, L.; Barlocco, D. **Designed multiple ligands: basic research vs clinical outcomes.** *Curr. Med. Chem.* 2012,19,3353.
4. Trott, O.; Olson, A.J. **AutoDock Vina: improving the speed and accuracy of docking with a new scoring function, efficient optimization and multithreading.** *J. Comp. Chem.* 31. 2010, 455.
5. Thomsen, R.; Christensen, M. H. **MolDock: A New Technique for High-Accuracy Molecular Docking.** *J. Med. Chem.* 2006, 49, 3315.

Agradecimentos/Acknowledgments



Área: AMB

Nº de Inscrição: 00992

Evaluation of the Applicability of Pineapple Peels for Direct Removal of the Methylene Blue Dye from Aqueous Medium

Lanna V. S. Rodrigues (IC)¹, Carlos F. Silva (IC)¹, Fabiana A Marques (PQ)^{*1}lannawanessa98@gmail.com; fabiana.marques@ifgoiano.edu.br¹ Departamento de Química, Instituto Federal Goiano – Campus Ceres

Keywords: Adsorption, Dye, Pineapple, Biosorbent.

Highlights

We show the biosorbent potential of the pineapple peel for the removal of the methylene blue dye from aqueous medium. It presented satisfactory results reaching a percentage of adsorption up to 60%.

Abstract

The pollution of natural resources due to the environmental impacts caused by the various human activities, especially in industrial sectors such as the dumping of the textile industries of dye-containing effluents, contributes seriously to the contamination of these resources¹. Therefore the use of alternative treatment methods is necessary, and one of these techniques is the process of biosorption. Thus the present work aims at the development of alternative material for the removal of methylene blue dye in aqueous medium. Initially the adsorbent material was obtained through of the drying (65°C for 24 hours) and crushing of the pineapple peels, was used granulometry of 500 µm. The adsorbent was characterized by the Fourier transform (mid-FTIR) medium infrared spectroscopy technique and zero charge point according to the methodology proposed by Regalbuto et. al. An intense band in the region of 3400 cm⁻¹ was observed through the FTIR spectrum of the biosorbent (*Ananas comosus*), which may indicate the axial deformation of OH of carboxylic acids and alcohols (intermolecular hydrogen bonding), the confirmation of the carboxylic structure can be observed by the band in the region of 1650-1550 cm⁻¹. The strong band in the range 1200-1000 cm⁻¹ represents the axial deformation of C-O. Through the spectrum it is possible to affirm that the material presents ionizable functional groups that instigates studies for the sorption of ionic species of diverse environmental interests. The zero charge point of the biosorbent was pH 4.47. Below that pH 4,47 the surface charge of the biosorbent will be positive, while at pH above the surface charge will be negative. The pH of the solutions used in the adsorption tests was around of pH 7, the dye used in the tests is cationic, so the adsorption of cations in these conditions was favored. For the adsorption assay, aqueous solutions of the methylene blue dye in the range of 2 mg.L⁻¹ to 10 mg.L⁻¹ were prepared to obtain the calibration curve of the respective solute, using the UV-VIS spectroscopy (663 nm). The adsorption assays were performed in duplicate with constant mass of adsorbent (60 mg) in contact with 30 mL of methylene blue aqueous solution at different concentrations (2, 6 and 8 mg.L⁻¹)². After 15 hours of equilibration the removal percentage of adsorbent was verified. The solution was stirred and after was centrifuged at 4000 rpm for 15 min. The resulting supernatants were then analyzed by UV-VIS spectrometry at 663 nm² to determine the remaining concentration of the dye after adsorption. It was observed that the adsorption is reduced with increase of the initial concentration of the dye, due to the saturation of the surface of the adsorbent making it difficult to adsorb the dye. However, the adsorption capacity of the dye is favored by the increase of the initial methylene blue concentration, with a maximum adsorptive capacity of 1,9504 mg.g⁻¹. Thus, the adsorbent material analyzed presented satisfactory results, with removal of up to 60% of the dye in aqueous solutions, demonstrating as an alternative material and also a way to minimize the accumulation of residues in the environment. The study is still underway and after the characterization of the material, the biosorbent will be applied for adsorption of agrochemicals.

1. UDDIN, M. T. et al.. Journal of Hazardous Materials, 2009

2. MILANI et al. Environ Sci Pollut Res Int., v. 25, p.35895-3590, 2018.

3. REGALBUTO, J. R.; ROBLES, J. The engineering of Pt/Carbon Catalyst Preparation, University of Illinois, Chicago, 2004.

Acknowledgments

IF Goiano campus Ceres and PIBIC program for opportunity.

Synthesis of novel kinetin derivatives containing a 1,2,3-triazole moiety

Natália Machado Pereira de Oliveira Torres (PG),* Rossimiriam Pereira de Freitas (PQ), Rosemeire Brondi Alves (PQ).

mpotnatalia@gmail.com

Departamento de Química, UFMG

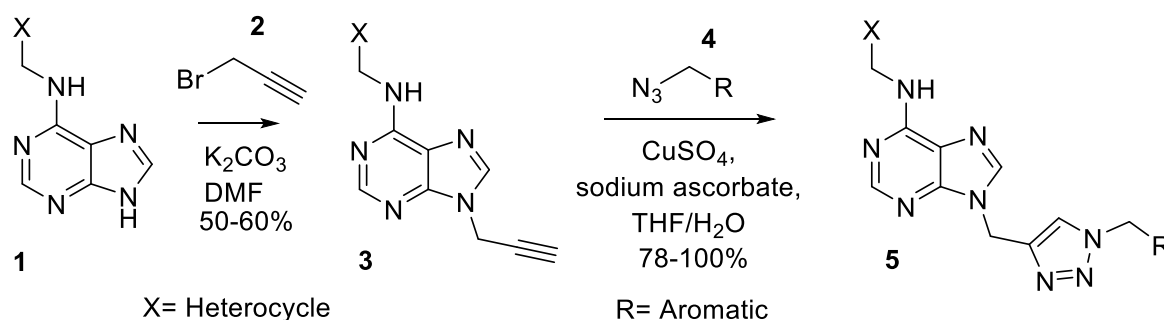
Keywords: Kinetin, 1,2,3-triazole, click, Plant Growth Regulators, cytokinins

Highlights

Synthesis of novel 1,2,3-triazoles-1,4-disubstituted derivatives of kinetin; Synthesis of new cytokines and plant growth regulators.

Abstract

Kinetin is a hormone present in plants and belongs to a class of plant growth regulators (*PGRs*) known as cytokinins. Cytokinins are cell division regulators and participate in cell division and differentiation, chloroplast development, chlorophyll biosynthesis, flower and fruit development, cellular senescence delay and differentiation of vascular tissue.¹ It is class that has not yet been fully explored and very important in fruit growing and horticulture,² presenting a large space for new molecules with low toxicity. In this context, the work aims the synthesis of new derivatives of kinetin. The new derivatives were synthesized via the click reaction (Scheme 1). Triazoles of type **5** were obtained in 78-100% yield from the alkyne of type **3** and the azides of type **4**. Alkyne of type **3** was obtained in 50-60% yield from an alkylation reaction of kinetin and propargyl bromide.¹ Posteriorly the triazoles of type **5** will be biologic activities tested.



Scheme 1. Synthetic route to obtain the novel 1,2,3-triazoles-1,4-disubstituted derivatives of kinetin.

References:

¹ Mik, V.; Szucova, L.; Smehilova, M.; Zatloukal, M.; Dolezal, K.; Nisler, J.; Gruz, J.; Galuszka, P.; Strnad, M.; Spichal, L. *Phytochemistry*, 72, 821–831, **2011**;

² Rademacher, W. *J. Plant Growth Regul.*, 34, 845–872, **2015**;

Acknowledgments

CNPq, CAPES and FAPEMIG

Área: ANA

Nº de Inscrição: ID 00994

Classificação de petróleos pela Análise discriminante por mínimos quadrados parciais (PLS-DA)

Francine D. Santos* (PG)¹, Layla P. Santos (IC)¹, Luana S. de Oliveira (IC)¹, Flávia Tosato (PG)¹, Mayara da Silva (PG)¹, Cristina M. S. Sad (PG)¹, Rayane R. B. Corona (PG)¹, Laine B. Pereira (PG)¹, Juliéte S. D. Leite (PG)¹, Paulo R. Filgueiras (PQ)¹, Wanderson Romão (PQ)^{1,2}, Élcio Cruz de Oliveira(PQ)³. francinedalapicola@gmail.com;

¹ Laboratório de Pesquisa e Desenvolvimento de Metodologias para Análises de Petróleos (LabPetro), Departamento de Química, UFES; ² Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia do Espírito Santo, Campus Vila Velha (IFES); ³ Gerência de Tecnologia de Dutos e Terminais, Petrobrás Transporte S.A. – TRANSPETRO.

Palavras Chave: Petróleo, quimiometria, PLS-DA.

Highlights

Crude oil classification by partial least squares discriminant analysis (PLS-DA). 93 samples from three different origins (Origin 1, 2 and 3) were well discriminate by PLS-DA model with specificity, sensibility and precision of 100%.

Resumo/Abstract

Petróleo é uma matriz formada por milhares de compostos orgânicos que difere entre seus tipos (ex: *onshore*, *offshore*, pré-sal, pós-sal) de acordo com a quantidade percentual de cada um desses compostos. Encontram-se estudos quanto à utilização da espectroscopia do infravermelho para avaliação de petróleos no monitoramento, classificação e determinação de propriedades críticas. Os espectros do NIR consistem de sobreposições e combinações das bandas de absorções moleculares, o que torna a leitura das informações complicadas, sendo, então por isso, beneficiada pela combinação com ferramentas quimiométricas. Assim, o presente estudo tem por objetivo empregar PLS-DA (Análise discriminante por mínimos quadrados parciais) para diferenciar a origem de petróleos utilizando um espectrômetro portátil de infravermelho. Foram utilizadas 93 amostras de petróleos pertencentes a três origens diferentes (Origem 1, 2 e 3). Os espectros foram adquiridos em triplicatas de forma aleatória utilizando um espectrômetro portátil MicroNIR™ (modelo Pro 1700 da empresa Viavi Solutions) na faixa de 908-1676 nm, com varredura de 100 scans, tempo de integração de 8 ms, com aquisição de 125 pontos por varredura. Utilizou-se a média das triplicatas dos espectros e esses foram tratados por primeira derivada. Dos 93 espectros médios, 74 foram separados para a construção do modelo (conjunto de amostras de treinamento, 80%) e 19 espectros para o conjunto de validação, 20%. Para minimizar erros da regressão PLS-DA ajustada, foi selecionado o número de variáveis latentes, de acordo com a taxa de erro de classificação, prevista pelo processo de validação cruzada. Neste caso, foi observado um mínimo com 4 variáveis latentes. Apenas uma amostra da Origem 1 do conjunto de treinamento foi designada como não pertencente à origem correta. Todas outras amostras do conjunto de treinamento e teste foram corretamente classificadas. Assim, observou-se excelente capacidade discriminatória pelo método proposto, com valores de sensibilidade, especificidade e exatidão igual a 100%. A inovação na técnica de NIR em um aparelho portátil possibilita a avaliação direta e imediata no local onde as amostras são colhidas, sendo que a classificação de petróleos segundo origem é um artifício importante em casos de derramamento e contaminação por óleo.

Agradecimentos/Acknowledgments

UFES, LABPETRO, CNPq, CAPES e FAPES.

Área: MED

(Inserir a sigla da seção científica para qual o resumo será submetido. Ex: ORG, BEA, CAT)

Nº de Inscrição: 00995

(Inserir o número de inscrição do autor que fez a submissão)

Thermosensitive liposomes: a study of thermotropic phase transitions

Ana Luiza C. Maia (PG),^{1*} Aline T.M. Silva (PQ),¹ Cristiane S. Giuberti (PQ),² Christian Fernandes (PQ),¹ Ângelo Malachias (PQ),³ André Luís B. Barros (PQ),¹ Daniel C.F. Soares (PQ),⁴ Gilson Andrade Ramaldes (PQ).¹

*anafarmaciaufof@yahoo.com.br; danielcristianf@gmail.com

¹Pharmaceutical Products Department, UFMG; ²Health Sciences Center, UFES; ³Physics Department, UFMG; ⁴Pure and Applied Sciences Institute, UNIFEI.

Keywords: Thermotropic phase transitions, Thermosensitive liposomes; Dynamic light scattering (DLS); Differential scanning calorimetry (DSC); Small angle x-ray scattering (SAXS).

Highlights

- Thermosensitive liposomes for cancer treatment, with different lipid compositions, were prepared.
- Characterization of thermotropic phase transitions of liposomes membranes was performed by means DLS, DSC and SAXS analysis.
- The results allowed to identify the temperature at which the phase transition responsible for the release of encapsulated drugs, occurs in each of the formulations.
- The temperatures phase transitions identified are consistent with the temperatures used in the treatment of cancer using hyperthermia.

Abstract

Thermosensitive liposomes are composed of synthetic phospholipids and constitute promising nanocarriers for cancer treatment. Phospholipids have several forms of supramolecular organization, with characteristic transitions temperatures. T_m corresponds to the transition from the state in lamellar gel order phase (L_β) to the fluid lamellar phase (L_α). When a liposome is composed of several miscible phospholipids, which have different T_m values, the $L_\beta \rightarrow L_\alpha$ transition occurs at an intermediate temperature between the temperatures of all components. The release of a drug encapsulated in a thermosensitive liposome occurs by passive transfer, mediated by a concentration gradient, and is maximal when the temperature is close to T_m . The proper choice of the lipid composition of liposomes can influence the T_m , and thus, affect the treatment efficacy. The hyperthermia techniques can be used associated with thermosensitive liposomes to reach T_m and increased the apoptosis of neoplastic cells. Therefore, the aim of this study was to characterize the thermotropic phase transitions of different liposomes: (i) traditional thermosensitive liposomes (TTSL), and (ii) thermosensitive liposome containing lysophospholipids (LTSL). The thermosensitivity was assessed preliminary by DLS (heating range: 37°C to 45°C, heating rate: 1°C/minute). T_m of formulations were determined by DSC (heating range: 15°C to 65°C, heating rate: 1°C/minute). The supramolecular organization of liposomes membranes was analyzed by SAXS (heating range: 25°C to 50°C, heating rate: 1°C/minute). The DLS results demonstrated that the lipid composition chosen for formulations was adequate since T_m values (TTSL: 41°C; LTSL: 40°C) are compatible with the moderate hyperthermia (41°C to 45°C). The T_m values obtained by DSC (TTSL: 45°C; LTSL: 43°C) were higher than obtained by DLS probably due to the difference in sensitivity between the techniques. Diffraction patterns of formulations showed SAXS peaks with Bragg indexes 1, 2, and 1, 2, 3, which characterizes the presence of lamellar phases. The T_m values observed in SAXS are in agreement to T_m obtained by DSC. The results demonstrated that both formulations present suitable features for future *in vitro* studies using moderate hyperthermia.

Acknowledgments

CAPES, CNPq, FAPEMIG, Laboratory of Biomolecular Analysis (LABIOM) at Health Sciences Center from UFES, and National Synchrotron Light Laboratory (LNLS) at Campinas, Brazil.

Enzymatic synthesis of fatty acid amide from *Berthalletia excelsa* (Brazil nut) oil and its anti-inflammatory activity

Pedro H. S. Barata (IC)¹, Harlyson L. Carvalho(IC)¹, Ícaro R. Sarquis (PG)¹, Helison de O. Carvalho (PG)², Albenise S. Barros (PG)², David E. Q. Jimenez (PQ)¹, José Carlos T. de Carvalho (PQ)², Irlon M. Ferreira (PQ).

harlyson.carvalho@gmail.com; irlon.ferreira@gmail.com

¹Grupo de Biotecnologia e Síntese Orgânica Aplicada, Departamento de Ciências Exatas, Universidade Federal do Amapá, Rod. JK, KM 02, 68902-280, Macapá, Amapá, Brasil. ²Laboratório de Pesquisa em Fármacos, Departamento de Ciências Biológicas e da Saúde, Colegiado de Farmácia, Universidade Federal do Amapá, Macapá, Amapá, Brazil

Palavras Chave: Direct aminolysis; Castanha-do-Brazil; Biocatalysis; Fatty amide; Anti-inflammation

Highlights

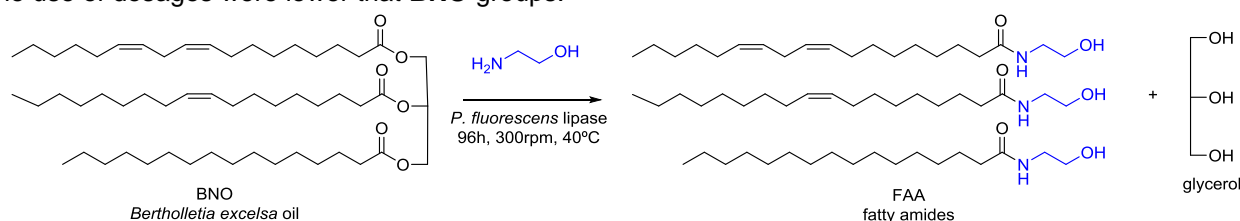
Enzymatic synthesis of fatty acid amide from *Berthalletia excelsa* (Brazil nut) oil and its anti-inflammatory activity; Synthesis of fatty amides, analogous to anadamide, were prepared oil of the *B. excelsa*.

Abstract

The anadamide, are known as *N*-arachidonoyl ethanolamide or fatty amides (FAA),¹ was identified and characterized as a neuromodulator of endocannabinoid class in 1992. Although at the time attention was denied due to the simplicity of the molecule², nowadays these molecules are one of the most studied endocannabinoid not only for vasorelaxant activities, also by its versatility in biological activities such as analgesic, antimicrobial activity, antidepressant, anti-inflammatory and anti-carcinogenic.

For optimize the production of FAA, initial experiments on was development using Amano Lipase from *Pseudomonas fluorescens* (10%). The initial reaction was carried out 10% of lipase using 3 equiv. of ethanolamine as amine donor, the direct aminolysis using the lipase from *P. fluorescens* provided the desired FAA in 68% conversion within 24 h. When the reactions were finished at 96 h, the reaction conversion increased to 86%. The amidation reaction of the triglyceride from the *Bertholletia excelsa* oil (BNO) was performed in the absence of the *P. fluorescens* lipase at 96 h with magnetic stirring (300 rpm; 40 ° C), the amide product was formed in 17%, after purification by chromatographic column with silica gel. The product was characterized by GC-MS and 13C-NMR.

The BNO anti-inflammatory effect and the FAA were evaluated by carrageenan-induced paw edema method.³ The volume increasing of animals paws was performed in interval times 1h, 2h, 3h and 4h according with the aggression caused by the phylogistic agent (carrageenan 1%) in the animals paw producing edema.⁴ For the first hour was possible to observe significant anti-inflammatory effect ($p < 0.05$) of treatment groups, mainly the Indomethacin groups (10mg/kg) and FAA (40 mg/kg), during the analysis time of edema formation, was observed that all treatments were capable of reducing the edema evolution significantly ($p < 0.001$). The final analysis (4 h) was observed that did not have significant difference between BNO and FAA groups, however, the FAA groups demonstrated greater anti-inflammatory potency because the use of dosages were lower than BNO groups.



Acknowledgments

The authors would like to acknowledge Fundação de Amparo à pesquisa do Estado do Amapá (FAPEAP, grant no. 34568.515.22257.28052017) for their financial support.

References: ¹ Lopes, C. R.; D'Oca, C. D. R. M.; Duarte, R. d. C.; Kurz, M. H. S.; Primel, E. G.; Clementin, R. M.; Villarreyes, J. A. M.; D'Oca, M. G. M. *Quím. Nov.* **2010**, *33*, 1335. ² Ezzili, C.; Otrubova, K.; Boger, D. *Bioorganic Med. Chem. Lett.* **2010**, *20*, 5959. ³ Tian, J.; Wang, Y.; Xu, Y.; Yu, Z.; Wei, A.; Zhang, W.; Gao, J. *Bioorganic Med. Chem. Lett.* **2016**, *26*, 338.

Área: QPN

Nº de Inscrição: 00998

Fingerprint of Amazonian *Siparuna* species by mass spectrometry

Carla M. Leal (PG),^{1,2*} **Simony C. Mendonça** (PG),² **Mariana F. Campos** (PG),^{1,3} **Brendo A. Gomes** (PG),^{1,3} **Rosineide C. Simas** (PQ),³ **Suzana G. Leitão** (PQ),³ **Gilda G. Leitão** (PQ).²

carlam.leal@yahoo.com.br

¹Programa de Biotecnologia Vegetal e Bioprocessos, UFRJ; ²Instituto de Pesquisas de Produtos Naturais, UFRJ;

³Departamento de Produtos Naturais e Alimentos, Faculdade de Farmácia, UFRJ.

Keywords: (*Siparunaceae*, *Flavonoids*, *Mass identification*, *Multivariate analysis*, *PCA*, *PLS-DA*).

Highlights

Siparuna species are used in Brazilian Folk Medicine.

Analysis of crude extract of *Siparuna* species by mass spectrometry and multivariate analyses showed chemical similarity.

Resumo/Abstract

Siparuna species (*Siparunaceae*) are distributed in Central and South America (NEGRI *et al.*, 2012), being used in Brazilian Folk Medicine for the treatment and prophylaxis of fever, headache, colds, rheumatism (LEITÃO *et al.*, 1999). They present ethnobotanical and ethnopharmacological importance and may be promising sources of bioactive compounds. Among the classes of secondary metabolites, free and glycosylated flavonoids were previously reported in the genus *Siparuna* (LEITÃO *et al.*, 2000; CASTAÑEDA *et al.*, 2016). In this study *S. monogyna*, *S. sarmentosa*, *S. reginae*, *S. glycyarpa* and *S. decipiens* were analyzed with the aim of verifying the chemical composition of their extracts through the profile by mass spectrometry. Their leaves were collected at Reserva Florestal Adolpho Ducke, Manaus-AM, Brazil. Its dried and ground leaves were macerated with ethanol. The crude extracts were subjected to liquid-liquid partition between water and solvents of increasing polarity (hexane, dichloromethane, ethyl acetate and butanol). A preliminary analysis of the crude extracts was performed by DI-APCI-MS/MS and DI-ESI-MS/MS in positive and negative modes, with ion trap 3D analyzer, flow rate of 0.1 mL/min and MeOH:H₂O as mobile phase with 0.1%NH₄OH for negative mode and 0.1% formic acid for positive mode. It was possible to observe that mass spectra obtained by ESI (+) and APCI (+) ionization have more ions than in ESI (-) and APCI (-). In addition, the spectra of all species showed characteristic ions in three regions: A (*m/z* 100-400), B (*m/z* 420-760) and C (*m/z* 790-1000), showing the chemical similarity between them, while there are ions that differentiate the species according to the results of the multivariate analysis. The major ions at *m/z* 871.5, *m/z* 621.5, *m/z* 331.3 were observed in ESI (+). However, the corresponding ions were not present in ESI (-). In APCI the same ions cited for ESI were observed but the spectrum shows to be richer in other compounds. Based on these observations it is necessary to analyze both ionization modes for further dereplication studies. Multivariate analysis of the data acquired by mass spectrometry, using PCA (Principal Components Analysis) and PLS-DA (PLS Discriminant Analysis) methods, confirmed the discrimination of samples recognized their main ions responsible for differences between them. Only *S. monogyna* and *S. reginae* species remained in the same group showing the chemical similarity between them. The results are promising and studies continue in order to provide the identification and further information on the chemical structures of these compounds.

Agradecimentos/Acknowledgments

We are indebted to CAPES for financial support.

Synthesis of resveratrol's derivatives and their DNA interaction studies

Bruna B. Ferreira (IC),^{1*} Maitê S. da Silva (PG),¹ Samuel R. Mendes (PQ).¹

brunabrocardo98@gmail.com; maitequimica@gmail.com; samuel.mendes@udesc.br

¹Laboratório de Síntese e Catálise (SinCa) – Departamento de Química, Centro de Ciências Tecnológicas – UDESC

Palavras Chave: resveratrol, benzo[b]selenofeno, agentes intercalantes.

Highlights

Resveratrol's derivatives were synthesized and its stabilities were tested using spectroscopy for further tests with DNA solution.

Resumo/Abstract

O *trans*-resveratrol tem origem vegetal^[1], podendo ser encontrado em amendoins, uvas, amoras e outros vegetais^[2]. Estima-se que essa fitoalexina interage com o DNA preferencialmente por interações de intercalação^[3]. Para o estudo das interações entre o ssDNA e o resveratrol, foram sintetizados diversos derivados do mesmo, como mostrado na Figura 1, afim de melhorar sua performance.

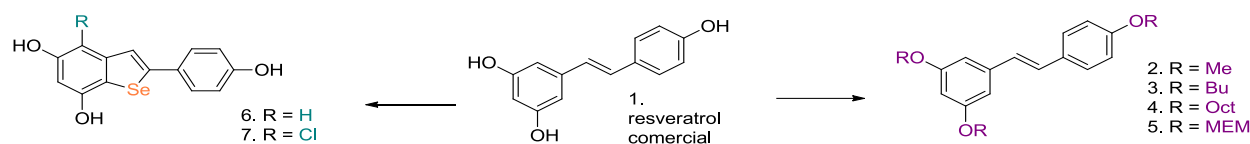


Figura 1: Derivados do resveratrol sintetizados.

Após a síntese, os compostos foram identificados por RMN ¹H e ¹³C. Uma vez que os compostos se mostraram estáveis, realizou-se testes de intercalação com DNA utilizando-se um espectrofotômetro UV-Vis. Os resultados obtidos nos testes de estabilidade e degradação são observados na Figura 2.

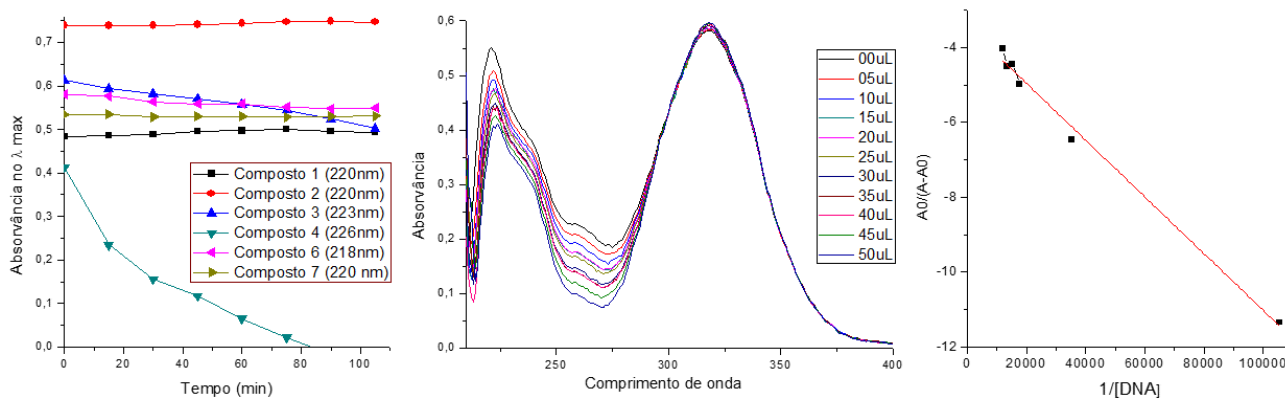


Figura 2: Testes de estabilidade dos compostos sintetizados (a), espectro UV-Vis do Composto 7 (b).

Dentre os compostos, o 4-chloro-2-(4-hydroxyphenyl)benzo[b]selenophene-5,7-diol (composto 7) apresentou melhor interação com o DNA, com um Kb de aproximadamente $4,8 \times 10^4 \text{ M}^{-1}$.

Agradecimentos/Acknowledgments

CNPq, UDESC, CAPES, FITEJ e FAPESC.

[1] ORALLO, F. Comparative studies of the antioxidant effects of cis- and trans-resveratrol. *Current Medicinal Chemistry*. V 13. p. 87-98. 2006. [2] BAUR, Joseph A.; SINCLAIR, David A. Therapeutic potential of resveratrol: the in vivo evidence. *Nature Reviews Drug Discovery*. V 5. p. 493-506. 2006. [3] GAO, Lin; WEI, Xiaohan; WANG, Fei; ZHANG, Bingying. Electrochemical behaviors of resveratrol and its interaction with DNA. *Journal of Chinese Chemical Society*. V61. p. 1141-1146. 2014.

Study of the influence of electronic, geometric and energetic effects of metallic complexes containing 1,2 - dithiolene ligands

Glauber S. Melengate (FM),^{1,2*} Daniel G. Quattrociochi (PG),² Glaucio B. Ferreira (PQ),² Leonardo M. Costa (PQ)²

glaubermelengate@id.uff.br

¹ Colégio Estadual Antônio Peçly, Secretaria Estadual de Educação, CEP: 28540-000, Cordeiro – RJ, Brasil

² Programa de Pós-Graduação em Química, Universidade Federal Fluminense, CEP: 24020-141, Niterói –RJ, Brasil

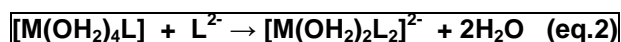
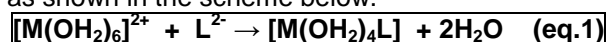
Palavras Chave: Cátions Metálicos Divalentes, Ligantes Ditiolatos, EDA, NBO e DFT.

Highlights

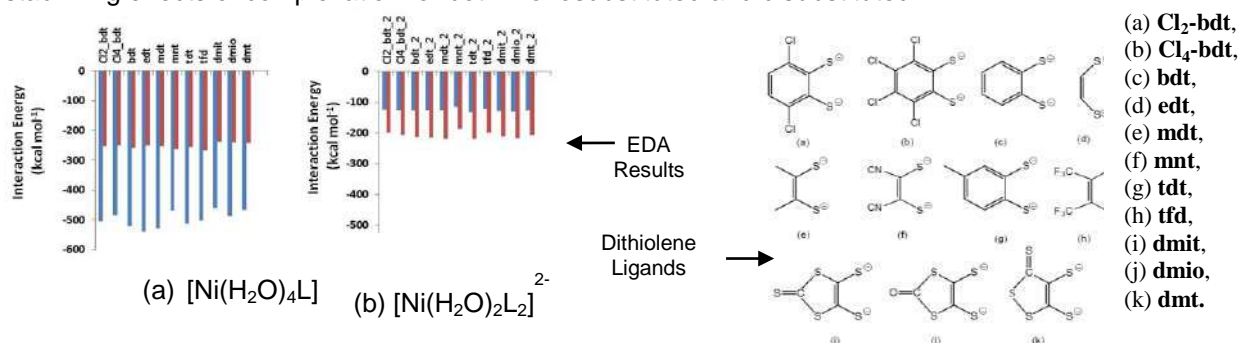
Theoretical study of effects of ligands with metallic cations is an area of continuous interest mainly in the coordination chemistry, materials science and some biological systems. This study reports results of 1,2-dithiolene ligands with metallic cations: Ca^{2+} , Mg^{2+} , Ni^{2+} and Zn^{2+} .

Resumo/Abstract

Metal dithiolene complexes have been extensively investigated since 1960 mainly due to their conducting, optical and magnetic properties.^{1,2} Experimental and computational studies have analyzed the interaction among divalent metal cations with large number of ligands. In the present work, the interaction between the Mg^{2+} , Ca^{2+} , Ni^{2+} and Zn^{2+} metal cations with 11 dithiolene ligands were analyzed.^{3,4} Three series of dithiolene molecules were studied, differing by the organic moiety bonded to the two sulfur atoms: the first with an aromatic ring, the second with an ethylene group and the last one with a heterocyclic ring. To simulate the hydrated metal cations octahedral geometries were considered for all the hexaaquacomplexes, as shown in the scheme below.



DFT calculations were performed with the B3LYP functional and the 6-311++G(d,p) basis set using the Gaussian 09 software. After full geometry optimization, vibrational modes calculations were performed for analysis of the thermodynamic parameters. Geometric, electronic and energetic parameters of the metal adduct and isolated ligands were correlated with the metal-ligand affinity for rationalization of the main stabilizing effects of complexation for both monosubstituted and disubstituted.



The energy decomposition analysis (EDA) of the metal-ligand interaction showed a very pronounced electrostatic character for monosubstituted complexes. The most representative Lewis resonance structure was analyzed, with emphasis on electron delocalization, from the calculation of natural bonding orbitals (NBO). The metal-ligand interaction had a predominantly covalent character for disubstituted complexes: the ethylene ligands showed higher affinity for the metal centers, and the active sites of ligands were more promising for interaction with the Mg^{2+} , Ca^{2+} , Ni^{2+} and Zn^{2+} cations.

Agradecimentos/Acknowledgments

CNPq, CAPES, FAPERJ, PROPPi UFF e LMQC-UFF.

References:¹ Belo, D.; Almeida, M.; *Coord. Chem. Rev.* **2010**, *254*, 1479. ² Hine, F. J.; Taylor, A. J.; Garner, C. David.; *Coord. Chem. Rev.* **2010**, *254*, 1570. ³ Melengate, G.; Stoyanov, S.; Quattrociochi, D.G. S.; Da Costa, L.; Ferreira, G.; *J. Braz. Chem. Soc.* **2018**, *29(4)*, 856. ⁴ Melengate, G.; Quattrociochi, D.G. S.; Siqueira Junior, J. M.; Stoyanov, S.; Da Costa, L.; Ferreira, G.; *J. Braz. Chem. Soc.* **2019**, *in press*.

Área: MED

Inscrição: 01004

A new biphenyl 3-nitro-1,2,4-triazolic derivative is thousands-fold more potent and selective than the anti-*Trypanosoma cruzi* drug benznidazole

Frederico S. Castelo-Branco (PQ),¹ Cheyene Almeida Celestino Menozzi (PG),^{1,2} Rodolfo R. F. França (PG),^{1,2} Mayara dos Santos Baptista (IC),^{1,4} Policarpo Ademar Sales-Júnior (PQ),³ Silvane Maria Fonseca Murta (PQ),³ Álvaro José Romanha (PQ),³ Angelo da Cunha Pinto (PQ) (*in memoriam*),⁵ Nubia Boechat (PQ).^{1*}

frederico.branco@far.fiocruz.br; nubia.boechat@far.fiocruz.br

¹Departamento de Síntese de Fármacos, Farmanguinhos/FIOCRUZ; ²Instituto de Ciências Biomédicas, Universidade Federal do Rio de Janeiro; ³Laboratório de Parasitologia Celular e Molecular - Centro de Pesquisa René Rachou/FIOCRUZ; ⁴Instituto de Química, Universidade Federal Fluminense; ⁵Instituto de Química, Universidade Federal do Rio de Janeiro.

Keywords: nitrotriazole, azole, *Trypanosoma cruzi*, Chagas disease, benznidazole.

Highlights

In this work, it was developed a new biphenyl 3-nitro-1,2,4-triazolic derivative with activity against *Trypanosoma cruzi*, the causative agent of Chagas disease, in the picomolar scale and with a selectivity index of more than 4 million. This substance proved to be four thousand-fold more potent and three thousand-fold more selective than benznidazole, the reference drug for this disease.

Abstract

Chagas disease (CD) is the parasitic disease that kills most in the Americas. Its etiological agent is the protozoan *Trypanosoma cruzi* (*T. cruzi*).¹ Some of the main substances with antichagasic activity have as a key-group an azole. The only drug approved and used in Brazil, benznidazole (BZD), is a nitroimidazole representative.² However, although the acute phase of this disease can be cured with BZD, the chronic phase remains without any effective therapeutic options, and is therefore imperative the search for potentially curative new substances. For such reason, the aim of this work is the design, synthesis and biological evaluation of eight new substances containing 1,2,4-triazole, 3-nitro-1,2,4-triazole and 2-nitroimidazole in order to evaluate the importance of these heterocycles in the activity against the aforementioned parasite. Taking into account that CD is a neglected disease and reaches poor countries, the synthesis of the planned derivatives is simple and inexpensive. It is composed of two or three steps, starting from a Friedel-Crafts acylation in two different aromatic rings with chloroacetyl chloride, followed by nucleophilic substitutions with the corresponding azoles and the corresponding final reduction of the carbonyl with sodium tetrahydroborate. All derivatives were obtained in overall good yields. The *in vitro* intracellular evaluation was carried out in L929 cells infected with *T. cruzi*. The results showed that the 3-nitro-1,2,4-triazole heterocycle promotes a much higher anti-*T. cruzi* potency than 2-nitroimidazole and 1,2,3-triazole. In addition, derivatives that had their carbonyl reduced to a hydroxyl showed an up to 540-fold improvement in activity. The most promising substance in the series was a biphenyl 3-nitro-1,2,4-triazolic, with an IC₅₀ of 0.00037 μM against *T. cruzi*, which was more than 4 thousand-fold more potent than the reference drug BZD. In addition, this derivative presented low toxicity to L929 cells with CC₅₀ >1600 μM, which led to a very high selectivity index, greater than 4 million, being more than 3 thousand-fold more selective than BZD. These results motivated us to evaluate this compound in a murine *in vivo* model in order to verify its curative potential. This evaluation is in progress.

References: ¹ WHO, *Chagas disease (Special Programme for Research and Training in Tropical Diseases, TDR)*, 2018, <https://www.who.int/tdr/diseases-topics/chagas/en/>; ² França et al. *RVq*, 2014, 6, 1483

Acknowledgments

The authors thank CNPq, FAPERJ and CDTS-FIOCRUZ for support.

41ª Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química: Construindo o Amanhã

Síntese e Avaliação da Atividade Antitumoral de Calcogenoaminas

Thiago Puccinelli (PG),¹ Armando M. M. Neto (IC),¹ Aline A. V. de Lima (IC)¹, Karina Miyuki Retamiro (PG) Francielle Pelegrin Garcia (PG),² Celso Vataru Nakamura (PQ)², Alfredo R. M. de Oliveira (PQ),² Leandro Piovan (PQ),^{1*}

thiago.puccinelli@ufpr.br; lpiovan@quimica.ufpr.br

¹Laboratório de Síntese Química e Enzimática (LaSQuE), Universidade Federal do Paraná – UFPR, Curitiba-PR, Brasil.

²Laboratório de Inovação Tecnológica no Desenvolvimento de Fármacos e Cosméticos, Universidade Estadual de Maringá, Maringá PR, Brasil.

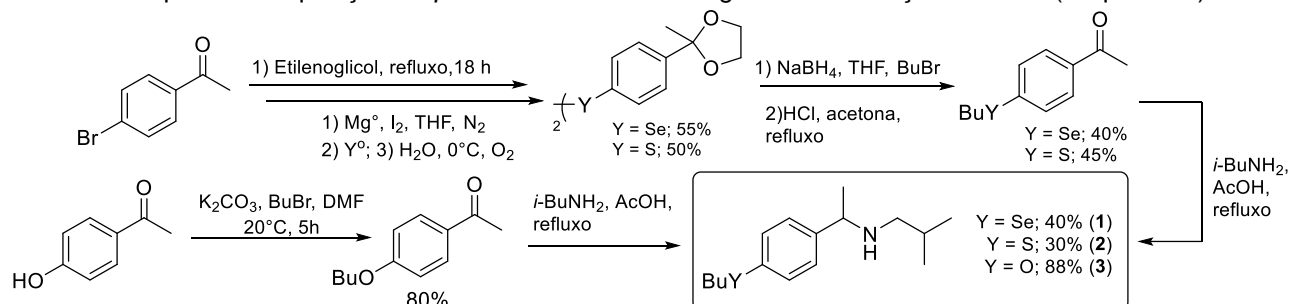
Palavras Chave: *Síntese química, Calcogeno aminas, Atividade Anti-tumoral.*

Highlights

Synthesis and Evaluation of Chalcogen Amine as Potential Antitumoral Agents - Synthesis of two novel compounds chalcogen amines containing oxygen and sulfur - Selenoamine presented high activity and selectivity against tumoral cells -

Resumo/Abstract

Compostos organocalcogenados (S, Se e Te) são descritos na literatura com atividades antioxidante, antimicrobiana, antitumoral e anti-inflamatória. esma maneira, muitos fármacos comerciais apresentam o grupamento amina em sua estrutura sendo que a combinação de calcogênio e amina pode levar a fortes candidatos a agentes biologicamente ativos. Neste trabalho calcogenoaminas contendo (O, S e Se) foram sintetizadas e avaliadas como agentes antitumorais. Para síntese das calcogenoaminas **1** e **2** foi realizada a proteção da *p*-bromoacetofenona, seguida da inserção do calcogênio (S ou Se) via reagente de Grignard e oxidação para formação do dicalcogeneto. Após clivagem, alquilação e desproteção, uma reação de aminação empregando isobutilamina levou aos produtos **1** e **2** de interesse. A calcogenoamina **3** foi sintetizada a partir da alquilação da *p*-hidroxiacetofenona seguida da aminação reductiva (Esquema 1).



Esquema 1: Rota sintética para a formação de calcogenoaminas **1-3**.

A seleno amina **1**, foi avaliada frente as células tumorais HT-29, PC-3 e HeLa e (Tabela 1) e apresentou elevados índices de seletividade para HT-29 (IS = 5,2) e PC-3 (IS = 2,5). A partir desses resultados mais duas calcogeno aminas contendo S e O foram sintetizadas e estão sendo analisadas.

Tabela 1: Valores de citotoxicidade e índice de seletividade do composto 1 frente as células tumorais.

| Composto 1 | HACAT | HT-29 | PC-3 | HeLa |
|---|-------------|------------|-------------|-------------|
| CC ₅₀ (μmolL ⁻¹ + dp) | 195,5 ± 6,4 | 37,5 ± 1,2 | 78,3 ± 16,1 | 555,0 ± 7,1 |
| Índice de Seletividade | ----- | 5,21 | 2,5 | 0,3 |

HACAT (queratinócitos de pele humana); HT-29 (câncer intestinal), PC-3 (câncer de próstata), HeLa (câncer colo útero). Índice de seletividade é razão entre o CC₅₀ da célula HACAT e o CC₅₀ da célula tumoral.

Agradecimentos/Acknowledgments

Back, Thomas G., ed. *Organoselenium chemistry: a practical approach*. OUP, 1999.

Sowmya, P. T., and KM Lokanatha Rai. *Aust. J. Chem* 2017, 70.7, 764-768.

Dalmolin, M. C. et. al. *J. Organomet. Chem.* 2018, 874, 32-39



Studies towards two novel Ni(II) thiosemicarbazone-based complexes: pharmacological properties and protein-ligand interactions assessment

Ana M. R. Polez¹(IC), Renan L. de Farias¹(PG), Débora E. S. Silva¹(PG), Mariete B. Moreira¹(PQ), José C. M. Pereira¹(PQ), Victor S. Batista²(PG), Berthold L. Reis²(PG), Nailton M. Nascimento-Júnior²(PQ), Adriano B. de Oliveira³(PQ), Javier A. Ellena⁴(PQ), Antônio E. Mauro¹(PQ) and Adelino V. G. Netto¹(PQ)*

Corresponding author: ana08polez@gmail.com (A.M.R.P.) and adelino.netto@unesp.br (A.V.G.N.)

¹ UNESP – Univ Estadual Paulista, Instituto de Química, Departamento de Química Geral e Inorgânica, Araraquara, Brazil.

² UNESP – Univ Estadual Paulista, Instituto de Química, Departamento de Química Orgânica, Araraquara, Brazil.

³ UFS – Univ Federal de Sergipe, Departamento de Química, São Cristóvão, Brazil.

⁴ USP - Univ de São Paulo, São Carlos, Instituto de Física, São Carlos, Brazil.

Keywords: thiosemicarbazone complexes; antitumor activity; DNA/HAS binding studies; computational studies

Highlights

Good cytotoxicity for cancer cells, but weak for normal cells. Crystal structure and Hirshfeld surface analysis. DNA minor groove affinity and HSA protein-ligand binding studies.

Abstract

This work deals with two novel Ni(II) complexes (**1-2**) of general formulae $[\text{Ni}(\text{L}1)_2]$ and $[\text{Ni}(\text{L}2)_2]$, where L1 = *N*-4-methyl-cinnamaldehyde thiosemicarbazone and L2 = *N*-4-ethyl-cinnamaldehyde thiosemicarbazone, as potential antitumor agents. All compounds were fully characterized by elemental analysis, molar conductivity and spectroscopic techniques (FTIR, NMR, and UV-Vis). The molecular structure of **2** was solved by X-ray diffraction analysis (Fig 1). All compounds have been screened against tumour cell lines (MCF-7 and A549) and normal cell line (MRC5) via MTT assays. The complexes exhibited higher cytotoxicity against A549 cells than cisplatin, ranged at $\text{IC}_{50} = 1.06 - 1.96 \mu\text{M}$. Likewise, **1-2** revealed reduced cytotoxicity to MRC5 cells ($\text{SI} > 10$). Both **1-2** exhibited DNA minor groove affinity in presence of Hoescht 33258. The antioxidant activity of **1-2** was carried out via 2,2-diphenyl-1-picrylhydrazyl (DPPH) radical scavenging assay. Finally, the binding ability of them to HSA has been evaluated by warfarin competitive assay and molecular docking (Fig 2 a,b).



Fig 1. The molecular structure of **2**, showing the atom-labelling and displacement ellipsoids drawn at the 50% probability level.

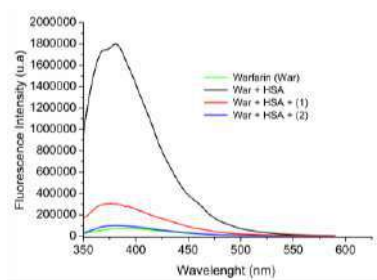


Fig 2a. Competitive fluorescence spectra of warfarin and equimolar mixtures with **1** and **2**. The concentration of all compounds was $1.0 \times 10^{-5} \text{ mol L}^{-1}$ in $50 \times 10^{-3} \text{ mol L}^{-1}$ phosphate buffer, $\text{pH}=7.4$ and $\lambda_{\text{ex}} = 330 \text{ nm}$.

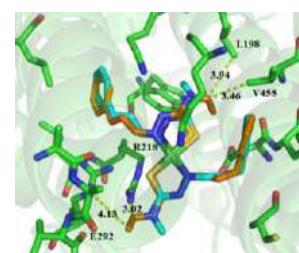


Fig 2b. Superimposed ligands **1-2** (light blue and orange, respectively). Regarding the distances, the ethyl group of **2** is assumed to interact with the labelled residues while the methyl group of **1** does not.

Acknowledgments

This work was sponsored by grants from FAPESP (proc. 2016/17711-5), CNPq INCT-INOFAR (proc. 573.564/2008-6), FAPERJ (proc. E-26/170.020/2008) and PROPe-UNESP (proc. 840). AMRP thanks CNPq for PIBIC scholarship. RLF thanks CAPES foundation for PhD fellowship.

Nucleoside hydrolase from *Leishmania donovani* immobilized on magnetic particles: a new enzymatic activity assay approach

Mariana Delle Piane de Carvalho¹ (IC), Lívia Marques Casanova² (PQ), Luzineide Wanderley Tinoco² (PQ), Marcela Cristina de Moraes^{1*} (PQ)

mcmoraes@id.uff.br; mariana.piane@hotmail.com

¹Departamento de Química Orgânica, Instituto de Química, UFF; ²Instituto de Pesquisas de Produtos Naturais, UFRJ.

Palavras Chave: leishmaniose, Hidrolase de Nucleosídeos, cromatografia líquida.

Highlights

Nucleoside hydrolase from *Leishmania donovani* was covalently immobilized on magnetic particles. Enzyme activity was assessed by the direct quantification of formed hypoxanthine using an HPLC-DAD method. Kinetic and stability assays were conducted.

Resumo/Abstract

Nucleoside hydrolase (NH) is considered an important biological target for the development of new drugs for the treatment of Leishmaniasis, a parasitic disease caused by *Leishmania* genus protozoan. NH enzymes catalyze the hydrolysis of N-glycosidic bonds of β -nucleosides, forming nucleic ribose and free bases to be used in purine synthesis^{1,2}. The most traditional methodologies employed in the drug discovery program for the identification of new lead compounds are considered expensive and time consuming. Therefore, the development of new screening methods for the rapid identification of new ligands is considered an important task. The main of this work is the covalent immobilization of the NH enzyme from *Leishmania donovani* on magnetic particles and its characterization as an early step in the development of a new NH specific inhibitors screening approach. NH enzyme was immobilized on the surface of amine-terminated magnetic particles (Sigma, 1 μ m) using glutaraldehyde as spacer, following the protocol provided by Sigma. The activity of immobilized NH enzyme was monitored by an HPLC-DAD method through the direct quantification of the formed hypoxanthine. Chromatography separation of inosine (substrate) and hypoxanthine (product) was performed by the use of a C₁₈ column (Phenomenex 15 x 0,46 cm, 5 μ m), and triethylamine 1% pH 6.0:MeOH (95:5) as mobile phase at a flow rate of 0.8 mL/min and detection at 249nm. The chromatographic method was validated with respect to linearity in the range of 5-1000 μ M ($y=7469.19x-619.71$, $R^2=1.00$), selectivity, accuracy (95.3-114.6%), precision (0.29-7.46%) and limit of quantification (5 μ M). The conditions of the activity assay were optimized by the evaluation of the following parameters: concentration of NH-coated magnetic-particles (5-100ng/mL), time of reaction (10, 30 and 60s) and time of magnetic extraction (30 and 60s). It was determined that 5ng/mL of NH-coated magnetic particles, 10s of reaction and 30s of magnetic extraction results in an adequate hypoxanthine formation and enables the fast recovery of the magnetic particles. The stability of the immobilized NH was assessed by the periodic evaluation of enzyme activity. Until now, four months of the immobilization procedure, the enzyme retained the same initial catalytic activity. Kinetic studies showed that the K_M value for the immobilized enzyme was similar to that reported for the free enzyme (465.2 \pm 65.4 μ M for the immobilized enzyme and 434 \pm 109 for the free enzyme¹), demonstrating that the immobilization procedure did not affect the enzyme affinity for inosine substrate. The results evidence that the immobilized NH-enzyme retained its catalytic activity with high stability, enabling the reuse of the same amount of enzyme in several assays, and that this approach represents a promisor assay for inhibitors screening.

Referências:

¹RENNÓ, M.N.; FRANÇA, T.C.C.; NICO, D. SOUSA, C.B.P.; TINOCO, L.W.; FIGUEROA-VILLAR, J.D. European Journal of Medicinal Chemistry 56 (2012) 301-307.

²FIGUEROA-VILLAR, J.D.; SALES, E.M. Chémico-Biological Interactions 263 (2017) 18-27.

Agradecimentos/Acknowledgments

CNPq, FAPERJ and CAPES.

Identificação de piperamidas em extratos hexânico e diclorometânico dos resíduos agroindustriais de pimenta do reino (*Piper nigrum* L.)

Danielle dos Reis Lucas (PG),^{1*} Paulo Rogério G. de Moura (PQ),¹ Ricardo Machado Kuster (PQ)¹.

daniellelucasr@gmail.com

¹Departamento de Química, UFES, Vitória - ES.

Palavras Chave: *Pimenta do reino, Piperamidas, Resíduo agroindustrial.*

Highlights

Identification of piperamides in hexane and dichloromethane extracts of agroindustrial residues of *Piper nigrum*

Use of mass spectrometry for the identification of piperamides in the *Piper nigrum* agroindustrial residue.

Resumo/Abstract

Introdução

A pimenta do reino (*Piper nigrum* L.), pertencente à família Piperaceae, é uma planta que apresenta diferentes atividades farmacológicas, as quais estão descritas na literatura como: anticancerígena, anti-inflamatória, antidepressiva, antialérgica, antioxidante, dentre outras.¹ Além disso, os seus frutos contêm princípios inseticidas, antibacterianos e antifúngicos, os quais têm atraído atenção a esta planta. Dentre seus metabolitos secundários, as amidas são as mais importantes, comumente conhecidas como piperamidas, as quais são responsáveis por desenvolverem a maioria de suas atividades biológicas.^{2,3}

Assim, tendo em vista o potencial desta planta objetivou-se identificar nos extratos hexânico e diclorometânico dos resíduos gerados na produção da pimenta do reino de regiões produtoras do Espírito Santo, a presença destas piperamidas.

Resultados e Discussões

Os extratos foram preparados a partir de resíduos fragmentados e moídos, submetendo-os à percolação com os solventes orgânicos hexano e diclorometano. Os extratos obtidos foram submetidos à análise por espectrometria de massas de ressonância ciclôtrica de íons com transformada de Fourier (FT-ICR MS) com a fonte de ionização por eletrospray (ESI) no modo positivo. E as principais piperamidas encontradas se encontram na figura 1.

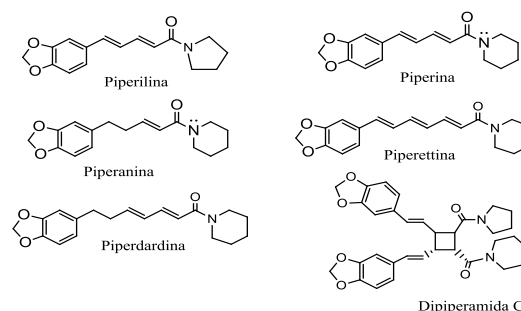


Figura1: Piperamidas identificadas nos extratos

Conclusão

A presença destas piperamidas no resíduo da pimenta do reino demonstra o potencial que este possui para ser utilizado como matéria-prima para sua obtenção e posterior aplicação industrial.

Referências

- DAMANHOURI, Z. A.; AHMAD, A. A Review on Therapeutic Potential of *Piper nigrum* L. (Black Pepper): The King of Spices. Medicinal & Aromatic Plants, 2014. 3. No. 3.
- RAMESH, B. et al. Simultaneous Determination of Six Marker Compounds in *Piper nigrum* L. and Species Comparison Study Using High-Performance Thin-Layer Chromatography–Mass Spectrometry. Journal of Planar Chromatography, 2015. 28. No. 4. 280–286.
- ZARAI, Z. et al. Antioxidant and antimicrobial activities of various solvent extracts, piperine and piperic acid from *Piper nigrum*. Food Science and Technology, 2013. 50. 634-641.

Agradecimentos/Acknowledgments



Área: ELE

Nº de Inscrição: 01012

Otimização de um método voltamétrico para determinação de chumbo, cobre e mercúrio em meio ácido usando eletrodos impressos de ouro

Maria de Lourdes S. Vasconcellos (PG)^{1*}, **Luiz R. G. Silva (PG)²**, Diego P. Rocha (PG)², Sílvia V. F. Castro (PG)², Rodrigo A. A. Munoz (PQ)², Rafael de Queiroz Ferreira (PQ)¹.

luizricaridogus@gmail.com; lourdes-vasconcellos@hotmail.com

¹Departamento de Química, UFES, Vitória – ES; ²Instituto de química, Uberlândia, UFU, Uberlândia-MG

Palavras Chaves: Chumbo, Cobre, Mercurio, SWASV, SPGEs

Highlights

Optimization of a voltametric method for determination of lead, copper and mercury in acid medium using gold screen printed electrode

Optimization of an electroanalytic method for the simultaneous determination of lead, copper and mercury using square wave anodic stripping voltammetry (SWASV) coupled with gold printed electrode (SPGEs).

Resumo/Abstract

Introdução

Dentre os poluentes, os metais tóxicos estão entre os mais preocupantes, já que vários processos têm produzido resíduos ricos nesses elementos, tais como mineração e fundição, produção de energia e combustível, aplicações de fertilizantes e pesticidas, indústria metalúrgica, galvanoplastia, eletrólise, fotografias, fabricação de aparelhos elétricos¹. Os metais apresentam toxicidade por não se degradarem de forma natural e acumularem-se nos tecidos vivos, causando vários distúrbios e doenças^{2,3}. Entre os metais tóxicos podemos destacar o Pb, Cu e Hg uma vez que são metais presente em diversos resíduos. Nesse contexto, o presente trabalho otimizou uma metodologia eletroanalítica, usando SWASV, associada com eletrodos impressos de ouro (SPGEs) para determinação multielementar de Pb, Cu e Hg.

Resultados e Discussões

A Figura 1 apresenta os parâmetros da otimização da SWASV para ensaios feitos em triplicata e empregando concentração de 10 µg L⁻¹ de Pb²⁺, Cu²⁺ e Hg²⁺ em HCl 0,05 mol L⁻¹.

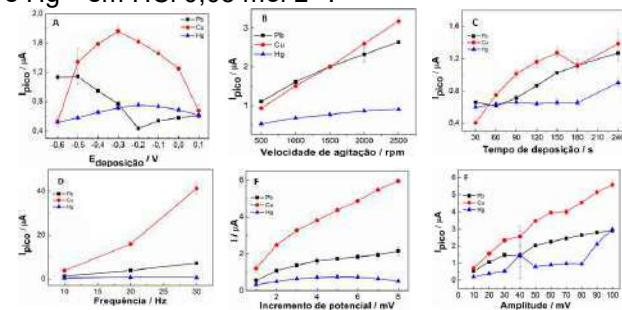


Figure 1: Parâmetros de otimização da SWASV (A) $E_{\text{deposição}}$ (0,1 a -0,6 V), (B) Velocidade de agitação (500 a 2500 rpm), (C) Tempo de deposição (30 a 240 s), (D) Frequência (10 a 30 Hz), (E) E_{step} (1 a 10 mV), (F) Amplitude (10 a 100 mV). E_{cond} 0,5 V por 60 s.

A partir da análise da Figura 1, os valores ótimos escolhidos foram 2 mV incremento de potencial; 10 Hz frequência, 30 mV amplitude, 90 segundo o tempo de deposição, -0,4 V $E_{\text{deposição}}$ e 1500 rpm para

velocidade de agitação. Partindo então desses valores determinamos as principais figuras de mérito da metodologia eletroanalítica proposta. Para isso, construímos uma curva analítica para cada metal a partir das correntes de pico média dos voltamogramas e variando as concentrações dos metais de 5 a 45 µg L⁻¹.

A Tabela 1 apresenta as principais figuras de mérito obtidas para os ensaios. Podemos observar que a metodologia eletroanalítica desenvolvida é muito eficaz na determinação dos analitos de interesse. Tal fator se reflete nos valores encontrados para os coeficientes de correlações (> 0,99), e nos valores de LD e LQ na faixa ppb e com sensibilidade de 0,052 µA µg⁻¹ L para Pb(II), 0,088 µA µg⁻¹ L para Cu(II), e 0,054 µA µg⁻¹ L para Hg(II).

Tabela 1. Principais figuras de mérito obtidos para a determinação de Pb(II), Cu(II) e Hg(II) por SWASV.

| Figuras de mérito | Pb(II) | Cu(II) | Hg(II) |
|---------------------------------------|---------------|---------------|---------------|
| Sensibilidade (µA µg ⁻¹ L) | 0,052 ± 0,002 | 0,088 ± 0,001 | 0,054 ± 0,001 |
| LD (µg L ⁻¹) | 1,31 | 1,99 | 0,87 |
| LQ (µg L ⁻¹) | 4,37 | 6,62 | 2,89 |
| R | 0,989 | 0,996 | 0,994 |

Conclusão

O método eletroanalítico otimizado demonstrou-se eficaz para a determinação simultânea de traços de Pb, Cu e Hg, podendo assim ser um método de monitoramento alternativo frente as técnicas convencionais.

Referencias

1. WANG, J.; CHENG, C. Biosorbents for heavy metals removal and their future. *Biotechnology Advances*, v. 27, n. 1, p. 195-226, mar./abr. 2009.
2. IBRAHIM, M. N. M. et al. A novel agricultural waste adsorbent for the removal of lead (II) ions from aqueous solutions. *Journal of Hazardous Materials*, v. 182 n. 1-3, p. 377- 385, out. 2010
3. PEHLIVAN, E., et al. Equilibrium isotherm studies for the uptake of cadmium and lead ions onto sugar beet pulp. *Bioresource Technology*, v. 99, n. 9, p. 3520-3527, 2008.

Agradecimentos/Acknowledgments

FAPES Nº 18/2018, CAPES, UFES, LabPetro, CNPq

Área: QPN

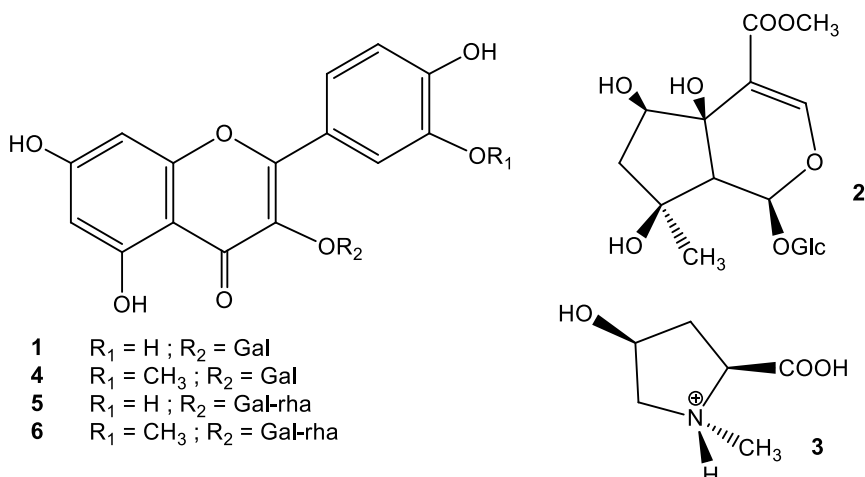
(Inserir a sigla da seção científica para qual o resumo será submetido. Ex: ORG, BEA, CAT)

Nº de Inscrição: 01014

(Inserir o número de inscrição do autor que fez a submissão)

Chemical constituents from the leaves of *Adenocalymma axillarum*.João P. C. Andrade (PG),^{1*} Osvaldo J. A. Alves (PG),¹ Valéria M. M. Gimenez (PG),¹ Wilson R. Cunha (PQ),¹ Márcio L. A. e Silva (PQ),¹ Ana H. Januário (PQ),¹ Patrícia M. Pauletti (PQ)¹.patricia.pauletti@unifran.edu.br; jpandrade.eq@hotmail.com¹ Núcleo de Pesquisa em Ciências Exatas e Tecnológicas, Universidade de Franca.Palavras Chave: (*Adenocalymma axillarum*, iridoides, flavonoides).**Highlights**The crude extract from the leaves of *Adenocalymma axillarum* showed moderate leishmanicidal activity. The extract was analyzed by HPLC-HRMS and purified, furnishing flavonoids and iridoids.**Resumo/Abstract**

Adenocalymma axillarum, synonym *Memora axillaris*, popularly known as "cigarrinha", "caroba amarela", belongs to Bignoniaceae family. Additionally, biological assay indicated moderated leishmanicidal activity for the ethanol extract. Thus, the aim of this study was the phytochemical bioassay-guided study of this bioactive extract. The leaves ethanol extract was subjected to a liquid-liquid partition furnishing three fractions: hexane, EtOAc, and hydromethanolic. The EtOAc fraction was chosen for purification since it showed better results in the bioassays. Thus, this fraction was purified by solid phase extraction, which resulted in 5 subfractions. Subfraction 1 was selected for the further phytochemical study. Subfraction 1 was purified by Sephadex LH-20 and preparative HPLC. The High-Performance Liquid Chromatography-High Resolution Mass Spectrometry (HPLC-HRMS) data allowed us to identify in the crude extract the presence of hyperin (**1**), 6 β -hydroxypolamiide (**2**), 4-hydroxy-*N*-methylproline (**3**), and 3'-*O*-methylhyperin (**4**) since those compounds were previously described in the genus *Memora*.¹ During the purification process, **1-4** were isolated and also identified by Nuclear Magnetic Resonance (NMR). Other subfractions also furnished the flavonoids: quercetin-3-*O*-robinobioside (**5**), and isorhamnetin 3-*O*-robinobioside (**6**), which were isolated for the first time in the genus, and were also observed in the HPLC-HRMS. Thus, further studies are in progress to separate other compounds, and to evaluate the biological activity of the isolated compounds.



Reference

¹Grassi, RF; Resende, UM; da Silva, W; Macedo, MLR; Butera, AP; Tulli, EdeO; Saffran, FP; de Siqueira, JM. **2005**. *Quím. Nova*. **28**, 199-203.

Agradecimentos/Acknowledgments

The authors are grateful to CAPES, CNPq and FAPESP (# 2016/10313-4).

Área: QPN

Nº de Inscrição: 01015

(Inserir o número de inscrição do autor que fez a submissão)

Antimicrobial and antileishmanial activity of *Banisteriopsis malifolia* (Ness & Mart.) B. Gates

Roberto Chang (PQ)¹, Vanessa E. X. Martins (PG)^{1*}, Helena M. T. Silingardi (PQ)², Evandro A. Nascimento (PQ)¹, Luís C. S. Cunha (PQ)³, Carlos H. G. Martins (PQ)⁴, Cassiano C. Rodrigues (PG)⁵, Claudio V. da Silva (PQ)⁵, Sérgio A. L. Morais (PQ)¹, Francisco J. T. de Aquino (PQ)¹.

chang@ufu.br; *vanellenxm@hotmail.com

¹Núcleo de Pesquisa em Produtos Naturais, Universidade Federal de Uberlândia, CEP 38400-902, Uberlândia/MG;

²Instituto de Ciências Biomédicas, Universidade Federal de Uberlândia, CEP 38400-002, Uberlândia/MG; ³Núcleo de Bioprospecção em Produtos Naturais, Instituto Federal do Triângulo Mineiro, CEP 38064-790, Uberaba/MG;

⁴Laboratório de Pesquisa em Microbiologia Aplicada, Universidade de Franca, CEP 14404-600, Franca/SP. ⁵Laboratório de Tripanossomatídeos, Universidade Federal de Uberlândia, CEP 38405320, Uberlândia/MG.

Keywords: Extracts and partitions, *Banisteriopsis malifolia*, biological activity.

Highlights

The species *Banisteriopsis malifolia* (Ness & Mart.) B. Gates (Malpighiaceae) is popularly known as the “flor-do-dia”, a typical Cerrado plant. The ethanolic extract from the leaves was obtained by maceration and subjected to partitioning by polarity. Biological activity assays against oral microorganisms and antileishmanial activity were carried out using the broth microdilution method. The ethyl acetate and dichloromethane partitions showed moderate activities against the oral bacteria and leishmania cell types.

Resumo/Abstract

The genus *Banisteriopsis* is well known to have a variety of metabolites such as alkaloids (*B. caapi*), flavonoids, tannins and terpenes that are capable of presenting important pharmacological activities.¹ Among these properties, antibacterial, anticholinesterase, antinociceptive, antitumor, antifungal, analgesic, vasodilator, hypothermic and analgesic agents are described.^{2,3} This work aims to study the species *Banisteriopsis malifolia* (Ness & Mart.) B. Gates (Malpighiaceae), popularly known as the “flor-do-dia”, typical of tropical environments and very common in the Cerrado. However, to date, only phenological and morphological studies of this plant have been carried out^{4,5} which aroused interest in studies related to chemical composition and evaluation of the biological activity of the species. The ethanolic extract was obtained by maceration of the leaves and partitioned by solvents of increasing polarities. The ethanolic extract and the ethyl acetate partition showed moderate antibacterial activity (MIC 200 to 400 µg mL⁻¹ for aerobic bacteria and MIC 100 to 200 µg mL⁻¹ for anaerobic bacteria). The dichloromethane partition had moderate antibacterial activity for all the bacteria tested (with MIC 100 to 400 µg mL⁻¹). The antimicrobial activity is considered good for MICs values below 100 µg mL⁻¹ and moderate between 100 and 500 µg mL⁻¹.⁶ For antileishmanial activity, the ethyl acetate partition presented the best result (IC₅₀ of 195.5 ± 0.12 µg mL⁻¹), while the other samples reached the maximum concentration of 512 µg mL⁻¹. HPLC-MS for the identification of the bioactive compounds of this sample are underway.

Acknowledgments: UFU, UNIFRAN, FAPEMIG.

References:

- ¹Frias, U. A. et al. *International Journal of Biotechnology for Wellness Industries* **2012**, 1, 3. ²Nunes, B.C. et al. *Ind. Crops Prod.* **2016**, 92, 277–289. ³Gates, B. 1982. New York: *The New York Botanical Garden*. ⁴Chibale, K. et al. *Phytochemistry* **2007**, 68, 1200-1205. ⁵Ferreira, C. A. 2013. *Dissertação de Mestrado em Ecologia e Recursos Naturais*. UFU-MG. ⁶Holetz, F. B. et al. *Memorias do Instituto Oswaldo Cruz*. **2002**, 97(7), 1027-1031.

Lipase lactonization as an alternative process for lichenysin-A cyclization obtained by solid-phase peptide synthesis

Matheus Rodrigues Bofinger (PG)*,¹ Anita Jocelyne Marsaioli (PQ)¹

matheusbofinger@gmail.com; anita@iqm.unicamp.br

¹Instituto de Química – IQ – UNICAMP – Rua Monteiro Lobato, 270 – Cidade Universitária – Campinas-SP

Palavras Chave: Peptide synthesis, Lactonization, lipase esterification, solid-phase peptide synthesis

Highlights

Lipopeptides are important molecules for biological activities. They can be synthesized by solid-phase peptide synthesis, but cyclization is a time-consuming step. Lipases can be used as an alternative.

Resumo/Abstract

Biosurfactants are amphiphilic compounds that lower surface tension and comprise a wide range of chemical structures. Lichenysins belong to the class of biosurfactants produced by *Bacillus licheniformis* with a cyclic polypeptidic chain of 7 amino acids linked by a β -hydroxy-fatty acid of 13, 14 or 15 carbon atoms.¹ The absolute configuration elucidation of such lipopeptides is a time-consuming job, which could be abbreviated by the access to enantiomerically pure standards.² These are not commercially available but an alternative route would be the enantioselective synthesis with readily available chiral building blocks like amino acids and β -hydroxy fatty acids. The lichenysin polypeptide moiety formation was achieved by solid phase synthesis using Wang's resin and Fmoc strategy (Fluorenylmethyloxycarbonyl) linking the 7 amino acids and the β -hydroxy-myristic acid (Figure 1). Herein we demonstrate the potential cyclization of open lichenysin-A using lipases from various sources.

Cyclization was tested submitting 2.5 mg of opened lichenysin to a flask with 900 μ L of toluene and approximately 5 mg of freeze-dried lipase from *Candida Antarctica* (free, freeze-dried and immobilized onto resin), *Pseudomonas cepacia*, *Pseudomonas fluorescens*, hog pancreas, *Rhizopus niveus*, *Mucor miehei*, *Rhizopus arrhizus*, *Candida cylindracea*, *Candida rugosa*, Lipozyme TL IM and RM IM and *Aspergillus sp.* The mixture was stirred for 36 hours at 35 °C and 250 rpm (Figure 1).

After the test, the samples were centrifuged, and supernatant was submitted to MALDI-TOF analysis.

The open lichenysin (m/z 1039) is found mainly as a sodium adduct [M+Na], and detected by monitoring peak of m/z 1061. Upon the enzymatic reaction, a peak of m/z 1043 corresponding to lichenysin-A [m/z 1021] sodium adduct [m/z 1021+ ²³Na] was expected. Lipases from *C. Antarctica* (freeze-dried), *M. miehei*, *R. arrhizus*, *P. fluorescens*, Lipozyme TL IM and Lipozyme RM IM showed the expected peak, indicating the successful lactonization. The reaction will now be scaled up to provide enantiomerically pure lichenysin-A to allow further investigation on the absolute configuration of natural compounds produced by *Bacillus licheniformis*

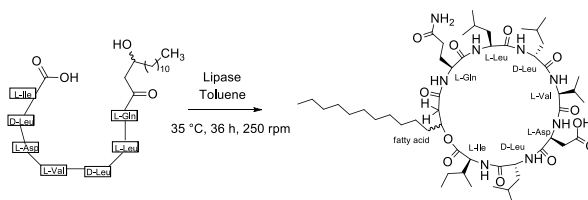


Figure 1. Lactonization of open lichenysin-A using lipase in organic media.

¹ Sharma, D., Saharan, B. S., Chauhan, N., Bansal, A. & Procha, S. *Sci. World J.* **1**, 25–31 (2014).

² Merrifield, R. B. *J. Am. Chem. Soc.* **85**, 2149 (1963).

³ Gargouri, M., Drouet, P., Legoy, M. D. *J. Biotechnol.* **92**, 259 – 266 (2002)

Agradecimentos/Acknowledgments

The authors thank CAPES, FAPESP (Grants 2018/07978-0 and 2014/50249-8) and CNPq (Grant 307885/2013-5)

Área: CAT

Nº de Inscrição: 01017

Catalytic activity of $\text{Fe}_{3-x}\text{M}_x\text{O}_4$ ($0 \leq x \leq 0,16$; $\text{M}=\text{V}^{5+}$, W^{6+}) nanoparticles applied in the heterogeneous solar photo-Fenton process.

Fausto E.B Júnior^{1*}(IC), Amanda C.N. Pinheiro¹(PG), Willyam R.P. Barros¹ (PQ)*

willyambarros@ufgd.edu.br

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

Keywords: methylene blue, Fe_3O_4 nanoparticles, solar foto-Fenton process.

Highlights

Evaluation of the degradation kinetics of methylene blue dye staining using magnetite nanoparticles doped with V^{5+} or W^{6+} ions by the solar photo-Fenton process.

Resumo/Abstract

This work describes the study of advanced oxidative processes (AOPs) based on the Fenton process system for the degradation of the methylene blue (MB) dye using $\text{Fe}_{3-x}\text{M}_x\text{O}_4$ ($\text{M} = \text{V}^{5+}$, W^{6+} $0 \leq x \leq 0.16$) nanoparticles (NPs) as heterogeneous catalysts. The MB dye solution (100 mg L^{-1}) was studied in acidic (pH 2.5) and alkaline (pH 9.0) media to verify the influence of the ions and the conductivity in the degradation process. Based on the Fenton and photo-Fenton process, the reactor used, was a single compartment and the process was performed to constant stirring for 180 min. at 25°C . Samples collected during MB degradation were analyzed by spectrophotometry. For the photo-Fenton process, a black light lamp of 8W (UVA radiation) was used. It was also studied the replacement of the lamp by solar radiation, i.e., the solar photo-Fenton process (SPF). This process was carried out in a reactor composed by mirror in which the radiation was reflected to the solution. The characterization of the NPs showed high surface area (BET), particle size around 6.5 nm (MET). The unmodified and modified NPs are aggregated and have quadratic format. By EDS analysis it was confirmed that the V^{5+} and W^{6+} ions were inserted in the cubic inverse spinel of Fe_3O_4 . This process showed high efficiency (100% of color removal) in short degradation time (30 min.) when compared to the process optimized by UV lamp (Fig. 1).

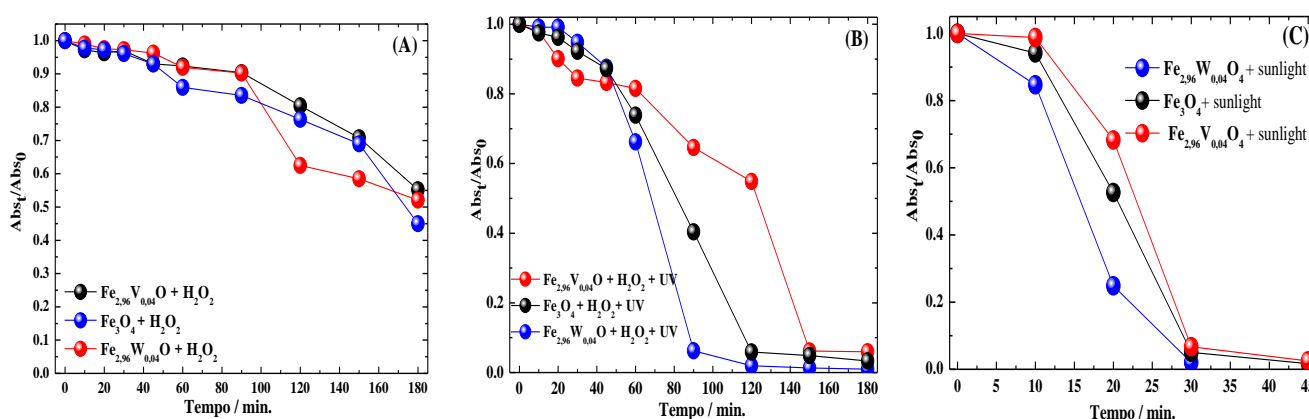


Figure 1: Absorbance decay of MB dye in acidic media after degradation process by (A) Fenton process, (B) photo-Fenton process and (C) solar photo-Fenton process.

Agradecimentos/Acknowledgments

CNPQ, UFGD.

Novos Derivados do Gingerol e suas Atividades Citotóxicas

William C. L. Silva (PG),^{1*} Raphael Conti (PQ),¹ Valdemar L. Junior (PQ),¹ Pedro A. B. Morais (PQ),² Letícia V. C. Lotufo (PQ),³ Warley S. Borges (PQ)¹.

William.lima.xp@outlook.com

¹Departamento de Química UFES, Vitória - ES; ²Departamento de Química CCENS-UFES, Alegre - ES; ³Departamento de Farmacologia do Instituto de Ciências Biomédicas USP.

Palavras Chave: Gingerol, Síntese orgânica, Atividade citotóxica.

Highlights

New Gingerol Derivatives and Their Cytotoxic Activities

New 6-gingerol were synthesized.; The chemical structure of the new 6-gingerol were characterized by means of IR, NMR and HRMS.; The new 6-gingerol derivatives were assayed against tumoral cells.

Resumo/Abstract

Introdução

Os gingeróis compreendem uma classe de substâncias fenólicas presentes no óleo resina da planta *Zingiber officinale*. Essas substâncias constituem uma série homóloga, diferindo-se apenas em sua cadeia hidrocarbônica por dois carbonos¹. Pesquisas recentes sinalizaram que a atividade antioxidante e antitumoral da referida classe, e ensaios realizados *in vitro* e *in vivo* sugerem que estes compostos se caracterizam como agentes quimioterápicos seguros e não tóxicos, quando comparados à terapêutica convencional.^{2,3}

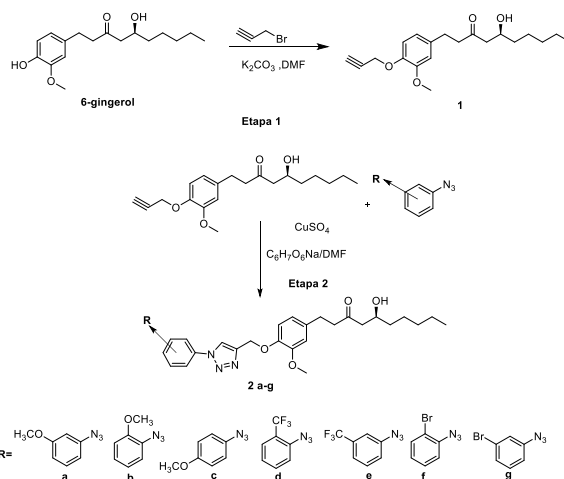
Sendo assim, em razão da múltipla aplicabilidade dos gingeróis e da continua necessidade de novos e potentes compostos com aplicação na terapia antitumoral, a busca por novos derivados sintéticos desta classe de compostos, torna-se de real importância.

Resultados e Discussões

O produto natural 6-gingerol foi isolado da planta *Zingiber officinale*. A partir dele foi realizada a preparação de derivados alquinil (**1**) e triazóis **2 a-g** inéditos, por meio de duas etapas, com bons rendimentos, conforme ilustrado no **esquema 1**.

Um método simples foi utilizado, empregando-se carbonato de potássio (K₂CO₃), 2,0 equivalentes, brometo de propargila comercial, 1,5 equivalentes, em DMF e temperatura ambiente, durante 5 horas. Todos os compostos foram identificados por IV, RMN de ¹H e ¹³C e por EM de alta resolução.

Todos os compostos tiveram sua atividade antitumoral avaliada.



Esquema 1: Novos derivados do 6-gingerol **1** e **2 a-g**

Conclusão

À partir do 6-gingerol foram sintetizados oito novos derivados e suas respectivas atividades citotóxicas serão discutidas nesse trabalho.

Referências

- ÁVILA. R.M.D., *Obtenção de Derivados de Compostos Isolados de Zingiber officinale por Biotransformação e Semi-síntese e Avaliação Frente à Cisteinil-proteases*. 2016. 183f. Tese de Doutorado- USP, São Paulo, 2016.
- WANG. C.Z. et al. Cancer Chemoprevention Effects of Ginger and its Active Constituents: Potential for New Drug Discovery - The American Journal of Chinese Medicine - USA - 12 de October de 2015. Vol.43. No. 7. 1-13.
- GUNDALA. Et al. Ginger Phytochemicals Exhibit Synergy to Inhibit Prostate Cancer Cell Proliferation. Nutrition and Cancer - USA - 26 de February de 2013. 65. No. 2. 263 - 272.

Agradecimentos/Acknowledgments



Partitioning behavior of lidocaine in aqueous biphasic systems

Francielle O. Chagas (PG)^{1,2}, Luis H. M. da Silva (PQ)^{2,3}, Maria C. Hespanhol (PQ)^{1,3*}

franochagas@gmail.com; [*mcarhohespanhol@gmail.com](mailto:mcarmohespanhol@gmail.com)

¹Grupo de Análises e Educação para a Sustentabilidade (GAES), ²Grupo de Química Verde Coloidal e Macromolecular (QUIVECOM), Departamento de Química, Centro de Ciências Exatas e Tecnológicas, Universidade Federal de Viçosa – MG; ³Instituto Nacional de Ciências e Tecnologias Analíticas Avançadas (INCTAA)

Keywords: Partition behavior, Lidocaine, Aqueous two-phase systems, Cocaine adulterant.

Highlights

Lidocaine (LD) partition behavior. Interactions more favorable between EO segments and LD molecules. Aqueous two-phase system (ATPS) is an alternative to separate LD from other adulterants.

Abstract

Lidocaine is a local anesthetic widely used in the pharmaceutical industry due effectiveness in the treatment of superficial lesions. In addition, this pharmacological agent also is employed by drug designers to adulterate cocaine (CC) due it pharmacological activity¹. Therefore, it is essential the development of new methods for LD determination. Aqueous two-phase system (ATPS) is an interesting alternative to assist forensic chemistry in the identification and determination of lidocaine, because they are low-cost, environmentally friendly and easy to execute². In order to evaluate the potential of ATPS to separate LD of other adulterant, we investigated the influence of the tie-line length (TLL), cation forming of ATPS, molar mass and hydrophobicity of the macromolecule on the partition coefficient of LD (K_{LD}). Figure 1 shows that higher K_{LD} values were obtained for ATPS formed by Li^+ ($K_{LD} = 9.63 \pm 0.16$) than Na^+ ($K_{LD} = 5.95 \pm 0.10$) and Mg^{2+} ($K_{LD} = 7.86 \pm 0.47$) in similar TLL values (~ 47 % (w/w)). Li ions interact more strongly with chain PEO, forming pseudopolycations more positively charge². These pseudopolycations interact electrostatically with oxygen present in LD molecules, consequently molecules LD partition preferentially to phase macromolecule-rich. Figure 2 shows that increasing hydrophobicity of the ATPS (changing PEO1500 to PPO425) decrease the K_{LD} , due the more favorable interactions between LD molecules and EO segments of PEO chain. Figure 3 shows that increasing molar mass of PEO decrease K_{LD} values due the decrease of LD molecules entropy in the macromolecular rich-phase. PEO1500 + Li_2SO_4 + water ATPS in TLL ~47 % (w/w) is the better system to separate LD molecules, and can be applied to separate LD from other adulterants.

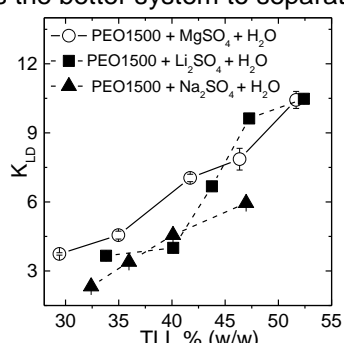


Fig.1 Cation influence in the K_{LD}

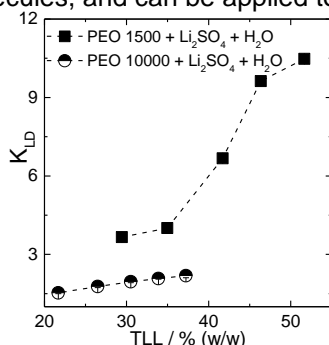


Fig.2 Macromolecule hydrophobicity effect in the K_{LD} .

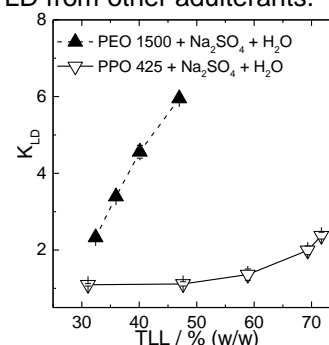


Fig.3 Molar mass effect in the K_{LD}

References

- E.J. Magalhães, et al., Evaluation of the composition of street cocaine seized in two regions of Brazil, Science and Justice (2013), <http://dx.doi.org/10.1016/j.scijus.2013.05.003>.
- H.M. Silva, W. Loh, Calorimetric Investigation of the Formation of Aqueous Two-Phase Systems in Ternary Mixtures of Water, Poly (ethylene oxide) and Electrolytes (Or Dextran), (2000) 10069–10073.

Acknowledgments

FAPEMIG, CNPq, CAPES/forense and INCTAA.

Área: ORG

(Inserir a sigla da seção científica para qual o resumo será submetido. Ex: ORG, BEA, CAT)

Nº de Inscrição: 01021

(Inserir o número de inscrição do autor que fez a submissão)

New methodologies for the catalytic asymmetric insertion of Sulfoxonium Ylides into N-H bonds

Lucas G. Furniel (PG),¹ Antonio C. B. Burtoloso (PQ).¹

lucasfurniel@usp.br; antonio@iqsc.usp.br

¹São Carlos Institute of Chemistry, University of São Paulo, IQSC-USP, CEP 13560-970.

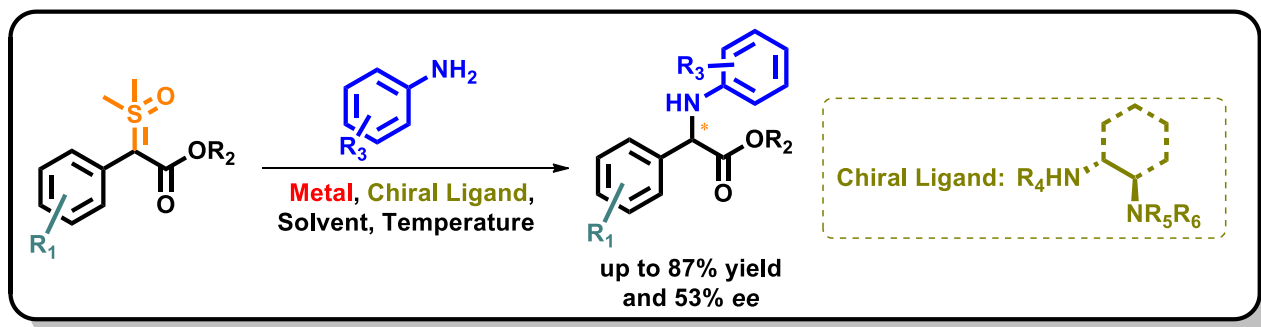
Keywords: Sulfoxonium Ylides, Asymmetric N-H Insertion, Metal-Carbene, Asymmetric H-Bond Catalysis

Highlights

This first report of catalytic asymmetric insertion of sulfoxonium ylides into N-H bonds allows the synthesis of enantioenriched α -aminoesters, which are important building blocks in organic synthesis.

Resumo/Abstract

α -aminofunctionalized carbonyl compounds have a wide versatility as synthetic building blocks, due to a variety of transformations that it can participate. However, there are a limited number of asymmetric methodologies to prepare this class of compounds in an enantioenriched fashion. Therefore, the development of such methodologies is of great importance in the area of organic synthesis. One of the methodologies commonly used to prepare this class of compounds is asymmetric N-H insertions using diazocarbonyl compounds. Although this methodology is well documented, there are no reports of such transformations regarding sulfoxonium ylides, which are safer and more stable synthetic equivalents of diazocarbonyl compounds. Herein we report the first enantioselective methodology using sulfoxonium ylides as metal-carbene precursors. α -aminoesters were obtained as N-H insertion products in yields up to 87% and enantiomeric excesses of 53%. Studies of more efficient catalysts to achieve a higher selectivity and ampliation of the substrate scope for these reactions are underway.



References: 1. Dias, R. M. P.; Burtoloso, A. C. B. *Org. Lett.* **18**, 3034–3037 (2016). 2. Burtoloso, A. C. B., Dias, R. M. P.; Leonarczyk, I. A. *Eur. J. Org. Chem.* **2013**, 5005–5016 (2013). 3. Burtoloso, A. C. B., Santiago, J. V., Bernardim, B.; Talero, A. G. *Curr. Org. Synth.* **12**, 650–659 (2015). 4. Liu, B., Zhu, S.-F., Zhang, W., Chen, C.; Zhou, Q.-L. *J. Am. Chem. Soc.* **129**, 5834–5835 (2007). 5. Zhu, S.-F.; Zhou, Q.-L. *Acc. Chem. Res.* **45**, 1365–1377 (2012). 6. Saito, H. *et al. Heterocycles* **81**, 1149 (2010). 7. Vaitla, J.; Bayer, A. *Synthesis* **51**, 612–628 (2019). 8. Vaitla, J., Bayer, A.; Hopmann, K. H. *Angew. Chem. Int. Ed.* **57**, 16180–16184 (2018). 9. Janot, C.; Palamini, P.; Dobson, B. C.; Muir, J.; Aïssa, C. *Org. Lett.* **21**, 296–299 (2019).

Agradecimentos/Acknowledgments

The authors would like to acknowledge São Paulo Research Foundation (FAPESP), for research financial support (2017/23329-9) (2013/18009-4) and fellowship grant (2018/17800-3) to L.G.F. We also thank National Science and Technology Development Council (CNPq) for a PhD fellowship to L.G.F. (140276/2018-1).

Área: ORG

(Inserir a sigla da seção científica para qual o resumo será submetido. Ex: ORG, BEA, CAT)

Nº de Inscrição: 01022

(Inserir o número de inscrição do autor que fez a submissão)

Green Synthesis of Oxazinanones: Intramolecular Cyclization of Amino Acid-Derived Diazoketones Using a Silica-Supported HClO₄ Catalyst

Orlando C. Campovilla Jr. (PG),¹ Rafael D. C. Gallo (PG),¹ Anees Ahmad (PQ),¹ Antonio C. B. Burtoloso (PQ)^{1*}.

orlandocampovilla@usp.br; antonio@iqsc.usp.br

¹Instituto de Química de São Carlos, Universidade de São Paulo, IQSC-USP, CEP 13560-970.

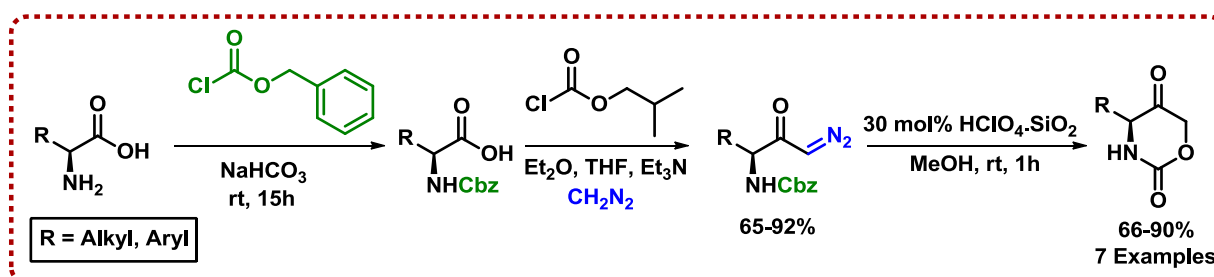
Palavras Chave: Heterocycles, Oxazinanones, Intramolecular Cyclization, Brønsted acid, Diazo carbonyls.

Highlights

The synthesis of 1,3-oxazinanone-2,5-diones is reported here via intramolecular cyclization of *N*-Cbz-protected amino acid-derived diazoketones using Brønsted acid catalysis. The developed protocol involves the use of the silica-supported HClO₄ as a green catalyst in methanol as solvent.

Resumo/Abstract

Cyclic urethanes or oxazinanones skeletons are present in many important biologically and pharmaceutically active compounds such as the anticancer agent “Maytansine” and the anti-HIV drug “Efavirenz”. This class of compounds also exhibit other biological activities, among them important are: antibacterial, anti-inflammatory, anti-influenza, antithrombotic, antidiabetes, antialzheimer, and enzyme inhibition. The methodologies described in literature to obtain this class of compounds mostly employ expensive and/or toxic heavy metals such as In, Sc, Rh, Au, Pd, Sn, Sb and Os. Thus, the development of a sustainable, metal-free, cheap and easily available catalysts for the efficient green synthesis of cyclic urethanes is still necessary. Herein, we are presenting ecofriendly, practical and operationally simple methodology to access variety a of oxazinanones. The intramolecular cyclization mediated by silica supported HClO₄ using diazoketones derived from α-amino acids leads to several 1,3-oxazinanone-2,5-diones in high yields (66-90%). This protocol is environmentally friendly, metal-free, occurs in mild reaction conditions and uses methanol as the solvent. Moreover, the silica supported HClO₄ catalyst is stable, easy to prepare and handle, and enables the synthesis of different oxazinanones in a short reaction time.



Agradecimentos/Acknowledgments



134400/2018-6



2017/23329-9

2013/18009-4

Teaching of Analytical Chemistry for the course of Zootecnics: Proposal of contextualized experimental activities

Darlina M. Souza (PG),¹ Jaqueline F. Reichert (PG)¹, Vanessa Klein (PG)¹, Paola de A. Mello (PQ)¹

darliana.ms@gmail.com

¹Departamento de Química, Universidade Federal de Santa Maria (UFSM).

Palavras Chave: *Analytical Chemistry. Volumetric techniques. Contextualized approach.*

Highlights

- Experimental activities contextualized to the Zootecnics course were proposed
- Correlation of the discipline of Analytical Chemistry with soil, fertility and animal nutrition was the focus.
- Titrations with samples of milk, soils, limestone and fertilizers were developed.

Abstract

Chemistry concepts have an indispensable role in the training of students in the areas of agricultural science. In the context of essential professional contents, subjects involving soil, soil management and conservation, animal and plant nutrition and fertilization strongly characterize the need for a real understanding of the chemistry in the initial subjects. Therefore, the best use of these contents in specific disciplines can take place. Experimentation in chemistry should not be taken as a ready-made recipe, but rather adapted to the reality of the professional profile of the course to which the production of the specific didactic material aimed at target public. In this way, this study aimed to allow the students a better association of the content discussed in the classroom through the contextualization of the practices developed in the laboratory with themes of interest to the training of the zootecnician in the discipline of Analytical Chemistry. The programmatic content involves the various types of volumetry and a series of experiments was planned, tested and systematized. The study was developed during the second semester of 2018, with 46 students, divided in two classes. Before each practical class, texts were made available problematizing the practice challenging the students to conduct prior research with regard to the content that would be developed. At the beginning of each experimental class a discussion was conducted on the problem to be addressed. The practical proposals developed in the bias of problem solving were: Milk quality (neutralization volumetry); limestone evaluation for the neutralization power (return neutralization volumetry) and for the determination of calcium and magnesium concentrations (complexation volumetry); content of chlorides in fertilizers (precipitation volumetry); dosage of iodine in mineral salt for cattle (oxidation); determination of oxidizable organic carbon in soil (oxidation). In the week prior to the end of the semester, students received a questionnaire to evaluate the teaching interventions, as these were seen by the academics. During the development of activities throughout the semester, it was possible to note the effective participation of the students in front of the questions, demonstrating that the proposed approach aroused their interest. The data obtained through the evaluation of the questionnaires showed that the majority of the students affirm that contextualization contributed positively to arouse their interest in chemistry classes. More than 90% of the class said that before attending the course in the format approached believed that it had no relation to the course of zootecnics, but in the course of classes began to perceive a relationship between the areas. In addition, approximately 26% of the students were repeaters and had taken the course in the traditional format, where the experiments were this approach was not used. All of these affirmed that the practices encompassing the resolution of interconnected problems in the area made the discipline more relevant and instigated interest in it. In general, the results obtained during the semester indicated that the use of the elaborated and contextualized teaching material, associated with problem solving, has the potential to arouse interest and motivate the students, thus improving learning.

Área: INO **Nº de Inscrição: 01024**

Obtaining and characterization of films based on hydrolyzed collagen extracted from tilapia scales containing layered cobalt (II) hydroxysalicylate as filler.

**¹Kauani Caldato* (IC), ¹Andressa Xavier Ferreira Lefchak (IC), ¹Leandro Zatta (PQ).
kauani96caldato@gmail.com;**

¹Departamento de Química, Universidade Tecnológica Federal do Paraná, UTFPR, Pato Branco, PR, Brasil.

Keywords: *hydrolyzed collagen film, cobalt (II) hydroxysalicylate, cobalt lamellar hydroxide.*

Highlights

The material can be applied as a bandage by your compatibility with human skin, antimicrobial activity and possible drug rated release.

Resumo/Abstract

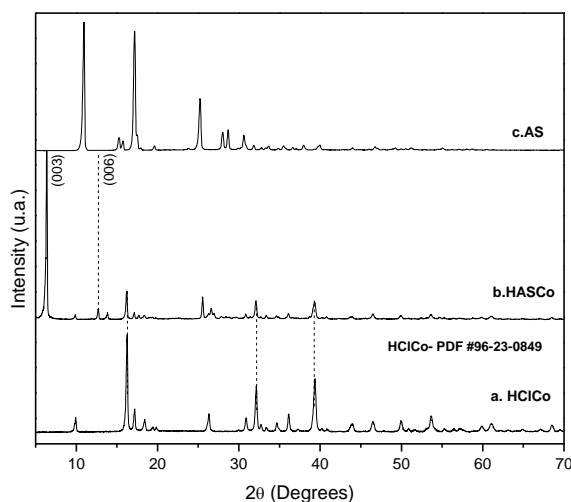


Figura 1. a. HCICo compound obtained after hydrothermal synthesis, precursor salt for the sample b.HASCo; B. HASC- compound obtained after the attempt of intercalation of the precursor salt and salicylic acid; C. AS- salicylic acid

The X-ray diffraction of the HCICo sample (Figure 1a) shows the formation of the cobalt(II) hydrochloride according to the crystallographic chart PDF-96-230849, which was used as a precursor for the HASCo sample, by the anion exchange method (where the chloride anion is replaced by the salicylate in the interlamellar space). By analyzing the HASCo sample (Figure 1b) the main XRD peaks was observed at 6.3° (2θ) and its harmonic at 12.7° (2θ), which indicates a lamellar structure of the material, this result agrees with literature reports. The basal spacing calculated by Bragg's law was 14.2 \AA . The peaks corresponding to the HCICo sample were unchanged, but with less intensity, in the intercalated sample (HASCo), demonstrating that the anion exchange processes did not obtain an absolute yield. The characteristic peaks of the precursor drug were not shown in HASCo indicating that the anion is intercalated in the interlamellar space of $\alpha\text{-Co(OH)}_2$, another indicative of its intercalation is the elevated basal spacing due to the size of the anion.

When the HASCo filler was added in the biofilm polymer matrix, a relevant antimicrobial activity against *Staphylococcus aureus* (ATCC 25923) and *Escherichia coli* (ATCC 25922) was observed by the agar diffusion method. For the gram-positive bacteria, *Staphylococcus aureus*, was obtained a inhibition halo of 150 mm. By comparing, the positive control sample (tetracycline) showed a halo of 450 nm. For the gram-negative bacteria *Escherichia coli*, the observed halo was 90 mm while for the positive control a halo of 310 mm was observed.

The solubility results were compared to the film in which there was no charge addition (FB). For the film with the load the value obtained was $7.55 \pm 3.7\%$, and for the FB the result was $31.32 \pm 6.6\%$. There is a significant decrease in solubility of material when adding a charge in polymer matrix.

Amino-modified Merrifield resin as heterogeneous catalyst for diazo transfer reactions to 1,3-dicarbonyl compounds

Mariane Fantinel (PG), Marcus M. Sá (PQ)*

mari-fantinel@hotmail.com; marcus.sa@ufsc.br

Departamento de Química, Universidade Federal de Santa Catarina, Florianópolis, SC 88040-900

Keywords: Merrifield resin, diazo transfer reaction, heterogeneous catalyst, diazo compounds

Highlights

Synthesis of a new and efficient basic heterogeneous catalyst through chemical transformations on the Merrifield resin. Application of the amino catalyst in the diazo transfer reaction to dicarbonyls.

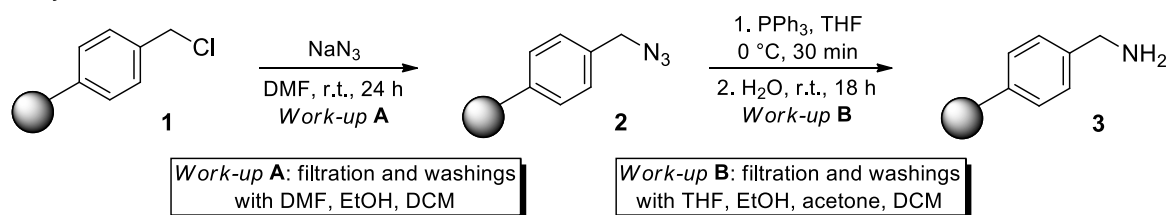
Abstract

Recently, we developed a simple and mild condition for the preparation of diazo compounds through the diazo transfer reaction using *t*-BuNH₂ as the catalyst.¹ With the view of achieving an efficient and reusable heterogeneous catalyst for this important reaction, we planned to prepare amino-modified resins. The Merrifield resin **1** (200–400 mesh, 1.26 mmol/g, 2% crosslink) carries a chloromethyl functional group and was chosen as the precursor due to its innocuous nature and relatively low cost. Thus, nucleophilic chloro displacement in the presence of NaN₃ in DMF² resulted in the azide **2**, which was reduced to amine **3** with PPh₃ and H₂O (Scheme). Both the azide intermediate **2** and the amine **3** were readily isolated by vacuum filtration and washing with several solvents. The catalyst **3** was employed in the diazo transfer reaction to substrates **4a–e** with the diazo transfer reagents **5** in THF at room temperature. The new catalyst worked well for the tested β -ketoesters and diketones **4a–e** (Scheme), giving the corresponding α -diazo carbonyl compounds **6a–e** in 26–96% yields after isolation through filtration and washing with *n*-hexane to separate the insoluble byproduct **7**. The catalyst could be quantitatively recovered after successive washings with different solvents. The reuse of the recovered amine-supported resin **3** is now under study and its application in other base-catalyzed reactions will be investigated.

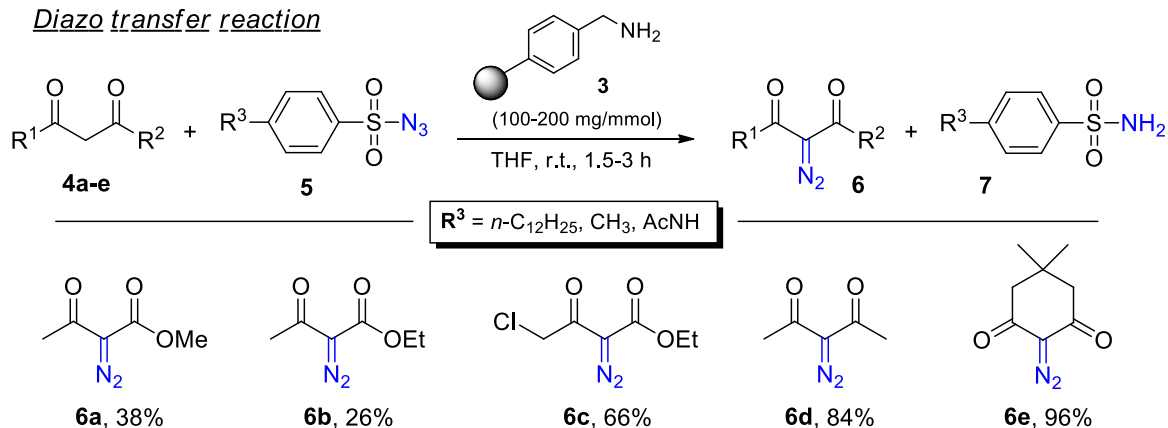
[1] Costin, T. A.; Dutra, L. G.; Bortoluzzi, A. J.; Sá, M. M. *Tetrahedron* **2017**, *73*, 4549.

[2] Castro, V.; Rodriguez, H.; Albericio, F. *Org. Lett.* **2013**, *15*, 246.

Synthesis of the amino-modified Merrifield resin



Diazo transfer reaction



Scheme. Preparation of the heterogeneous catalyst **3** and application in the diazo transfer reaction.

Acknowledgements: UFSC, CNPq, CAPES, INCT-Catalysis.

Área: MED

Nº de Inscrição: 01026

Antibacterial activity of selenoquinolines against *Staphylococcus aureus*.

Milena Noronha dos Santos (IC),¹ Isadora Maria de Oliveira (PG),² Flavia Manarim (PQ),¹ Helio A. Stefani (PQ),² Helton José Wiggers (PQ),¹ Juliana Cheleski (PQ)*.¹

milenanoronhaqmc@gmail.com, juliana.unioeste@gmail.com

¹Grupo de pesquisa em química orgânica sintética e medicinal, 645 –Jardim La Salle, Toledo - PR, 85903-000; ²Instituto de química USP – AV. Prof. Lineu Prestes, 748 – Vila Universitária, São Paulo – SP, 05508-000.

Palavras Chave:(Selenoquinolines, Bactericidal assays, Structure activity-relationship, *Staphylococcus aureus*).

Highlights

Staphylococcus aureus is considered to be the main causative agent of hospital-acquired infections, considering difficult to be treated due to antibiotic-resistant due to biofilm formation. New molecules with functional derivatives of selenium, similar in structure to the drug fluoroquinolones, selenoquinolines, have been synthesized and showed antimicrobial activity against *Staphylococcus aureus*.

Abstract

In the attempt to determine the structure activity relationship, a series of selenoquinolines molecules were synthesized¹ and screened against *Staphylococcus aureus* bacteria by Broth microdilution method protocol.² The overall structures of selenoquinolines have different groups substituents (R) at positions R1, R2, R3 and R4. Kanamycin antibiotic (C) was used as positive control. The inhibition percentages (%) of selenoquinolines (S) against *S. aureus*, at a single dose of 1 mg/ml, are shown at table 1.

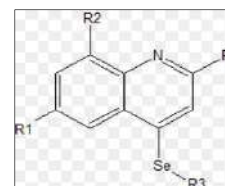


Table 1. Determination of inhibition percentage (I%) of selenoquinolines (S)

| | C | S1 | S2 | S4 | S6 | S7 | S8 | S10 | S11 | S14 | S19 | S20 | S21 |
|----|----|-----|-----|-----|-----|-----|-----|-------|-------|--------|---------|---------|------|
| R1 | | MeO | H | Br | H | Me | MeO | MeO | MeO | MeO | MeO | Cl | MeO |
| R2 | | H | H | H | Cl | H | H | H | H | H | H | H | H |
| R3 | | Ph | Ph | Ph | Ph | Ph | Ph | Ph | Ph | Ph | PhPhOMe | PhPhOMe | PhPh |
| R4 | | AcO | AcO | AcO | AcO | AcO | Ph | PhOMe | C4H3S | PhClCl | AcO | AcO | AcO |
| % | 80 | 60 | 43 | 89 | 100 | 100 | 80 | 100 | 100 | 100 | 89 | 50 | 88 |

When compared with the commercial kanamycin antibiotic, eight selenoquinolines tested showed better inhibition percentage. Overall, the positions that presented the higher inhibition, are located at R1 (MeO) and R3 (Ph). Change of the group AcO for Ph, PhOMe at position R4 have no significant contribution to bacterial activity, as can be seen for example, for molecules S6 and S10.

These modifications indicated that at R1 is preferential a mildly hydrophobic substituent and in position R3, hydrophobic, for bacterial inhibition. Selenoquinolines are promising for development of novel antibacterial drugs.

¹Oliveira, I., et al. Ytterbium(III)-catalysed three-component reactions: synthesis of 4-organoselenium-quinolines. *New journal of Chemistry*, 2017.

²Uttaswam, S et al. A Comprehensive Review of the Present and Future Antibiotic Susceptibility Testing (AST) Systems. *Arquivos of Clininal Microbiology*, 2018.

Acknowledgments

Unioeste and CNPq.

Área: QPN

Nº de Inscrição: 01027

Ligand Fishing: Search of binders of cysteine proteases in the stem ethanolic extract of *Melia azedarach* (Meliaceae)

¹Luciano R. Pereira (PG)*, ¹Cleiton S. Leandro (PG), ¹Romario P. Costa (PG), ¹Welma B. Costa (PG),
²Larissa R. G. da Silva (PG) ¹Quezia B. Cass (PQ), ¹Maria Fátima G. F. da Silva (PQ),

luciano.ufma@gmail.com

¹Departamento de Química, UFSCar

²Departamento de química, UFF

Key words: Ligand fishing, Cysteine proteases, *Melia azedarach*.

Highlights

Chemical characterization by mass spectrometry of binders from the stem ethanolic extract of the *Melia azedarach* using magnetic beads containing immobilized papain.

Abstract

Nature shows great potential as source of compounds with pharmacological activity. Screening, isolation, purification and chemical elucidation of these substances for later application has, however, proved to be laborious. Ligand fishing approach allows mitigating the drawbacks involved in the classical approaches, since the selected target is used to search the binders directly into natural product extracts. For that, the target can be immobilized onto magnetic particles which facilitate the separation of the target binders. Compounds with affinity for the immobilized target will be retained while the non-binders will be kept in solution. After extraction, the binders can be characterized by LC-MS/MS.¹ Lysosomal cysteine peptidases, also known as human cathepsins, form an important family composed of 11 papain-like enzymes and are associated with the development of cancers and other pathologies.² In this context, papain was used as model target immobilized on to magnetic beads and the ligand fishing assay³ was carried out using the ethanolic extract of the stem of *M. azedarach*. To meet this end, the chromatographic separation conditions of the extract was first evaluated and the ligand fishing assay carried out using papain active beads (MB-A) and control beads (with denatured enzyme, MB-C). The assay evidenced the presence of a series of ligands (m/z : 291.0877, 455.3507, 511.3392, 555.2936, 567.2955), that were not present in the control experiment. The MS/MS experiments carried out for the $[M-H]^+$ of 291.0877 ions allowed the characterization of the two compounds, (+) - Catechin and (-) – Epicatechin. The identified compounds were later confirmed by standard analysis under the same chromatographic and ionization conditions. The other binders, among them a limonoid (m/z 555.2936), are under chemical characterization and will be fully discussed in this paper.

References:

1. Toxicon, 152, 1, 2018
2. Eur. J. Med. Chem., 54, 10, 2012
3. J. Pharm. Biomed. Anal, 153, 232, 2018

Acknowledgments



Fluorescent nanoprobes based on capped of *N*-acetyl-*L*-cysteine CdTe quantum dot for direct thimerosal quantification in vaccines

Amidou Tall (PG)^{1,*}, Karolayne R. da Costa (PG)^{2,*}, Marília O. Fonseca Goulart (PQ)², Issa Tapsoba (PQ)¹ and Josué Carinhanha C. Santos (PQ)²

karolaynerocha97@gmail.com // amidtal96@gmail.com

¹Chemistry Department, University Ouaga 1 Pr Joseph Ki Zerbo, Ouagadougou, Burkina Faso. ²Institute of Chemistry and Biotechnology, Federal University of Alagoas; Maceió - Alagoas, Brazil.

Palavras Chave: Quantum dot, CdTe Thimerosal, Fluorescence, Vaccine.

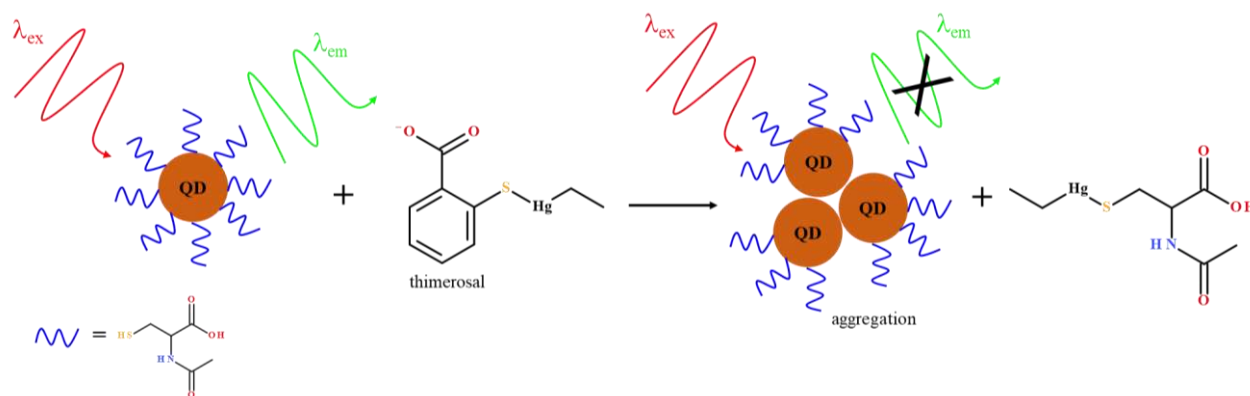
Highlights

Synthesis and characterization of nanofluorescent CdTe quantum dot functionalized with *N*-acetyl-*L*-cysteine with different diameters for determination of thimerosal, used in vaccines conservation.

Resumo/Abstract

Quantum dots (QD) are nanoparticles formed by semiconductors whose main characteristic is the high fluorescence, being used as fluorescent probes in varied systems.¹ For the determination of thimerosal, an organic mercury compound widely used in the preservation of vaccines, we designed *N*-acetyl-*L*-cysteine capped CdTe quantum dots. The synthesis was carried out by adding of CdCl₂ (99.6 μmol), sodium citrate (765 μmol), mercaptosuccinic acid (229 μmol), Na₂TeO₃ (167 μmol) and NaBH₄ (661 μmol), in this order, in a round bottom flask containing 25 mL of water. The mixture was then heated at 90°C under reflux for different times: 1, 2 and 4h. The detection is based on quenching effect of QD's fluorescence in the presence of thimerosal (Fig. 1). Synthesis time was the first parameter evaluated for the production of these nanoparticles. The QD of 1 h was the one that initially presented the best results and then used for further optimizations. The best results were obtained for 125 mM Tris-HCl buffer at pH 9, using QD concentration of 0.16 μM. The ionic strength of the medium had no significant influence on the sensitivity up to 300 mM NaCl. The QD showed photostability for up to 1 h with continuous radiation exposure, while in the kinetic assay there was a stability in the signal after 15 min. The linear range was from 0.1 to 1 mg L⁻¹ (0.25 - 2.47 μM), with LOD of 68.2 μg L⁻¹ (0.17 μM). Finally, the recovery assay applied in vaccine samples lead to recoveries from 90 to 97%, shown the applicability of the proposed method.

Fig. 1. Principle of the proposed method. The thiosalicylic acid generated in the reaction was omitted.



Agradecimentos / Acknowledgments

ANEC/ISP, FAPEAL, CAPES, PPGQB, IQB-UFAL.

¹CARVALHO, M. S. et al. J. Braz. Chem. Soc. 2017, 28(7) 1167-1176.

Área: MED

Nº de Inscrição: 01030

Molecular docking of antibacterial selenium-containing quinolines

Luis Alberto F. Moraes (IC), ¹*Helton J. Wiggers (PQ), ¹Juliana Cheleski (PQ), ¹Flávia Giovana Manarin (PQ).

lafmoraes@hotmail.com; *helton.unioeste@gmail.com

¹Universidade Estadual do Oeste do Paraná, Campus Toledo, Toledo, PR, Brasil.

Palavras Chave: Docking, Selenoquinoline, antibacterial activity.

Highlights

Novel structures based on fluoroquinolones. Molecular docking of selenoquinoline. Development of the antibacterial drugs.

Resumo/Abstract

Fluoroquinolones are important antibacterial drugs available for the treatment of infectious diseases in humans since the 1990s. However, the growing number of resistant bacterial strains is impacting the clinical utility of these drugs. Although several resistance mechanisms have been described, the most significant form of resistance is caused by specific mutations in gyrase and topoisomerase IV that disrupt an intermolecular interaction of the water–metal ion bridge responsible for molecular recognition.^{1,2} Therefore, in order to increase the number of antibacterial drugs available, fluoroquinolones derivative molecules have been studied, synthesis based on selenium has been carried out obtaining a series of selenoquinolines compounds.

The novel selenoquinolines compounds recently synthesized for our group have shown significant antibacterial activity (*Staphylococcus aureus*). The mechanism of action of these compounds has been investigated by computational studies based on molecular docking, aiming to get insights on the antibacterial activity. Molecular docking has been conducted in Autodock 2.4 program. The crystal structure of DNA gyrase (PDB ID: 5BS8) was used as macromolecular receptor. The active site for ligand docking was defined 5 Å surrounding the moxifloxacin (co-crystallized ligand). The results of molecular docking, the ligand binding poses, binding energy and interaction pattern will be presented. This information will be correlated with biochemical assays in order to validate the computational assays and provide a comprehension at molecular level of selenoquinoline antibacterial activity. Computation studies and antibacterial assays can be used to discovery new generation of antibacterial drugs.

¹Aldred, et al. Mechanism of quinolone action and resistance. *Biochemistry*, 2014.

²Blower TR et al. Crystal structure and stability of gyrase-fluoroquinolone cleaved complexes from *Mycobacterium tuberculosis*, PNAS, 2016.

Agradecimentos/Acknowledgments

Agradecimento à UNIOESTE, Fundação Araucária e ao CNPq.

Síntese de novas amidas através da condensação da 8-aminoquinolina e ácidos cinâmicos substituídos

Maurício Rocha de Brito (IC)^{1*}, Aurea Echevarria (PQ)¹, Cláudio Eduardo Rodrigues-Santos (PQ)¹.

mauriciorochasic@gmail.com

¹Instituto de Química, UFRRJ.

Palavras Chave: Ácido cinâmico, 8-Aminoquinolina, Leishmaniose, condensação

Highlights

Synthesis of new amides from condensation between 8-aminoquinoline and different cinnamic acids. These molecules can present great potential antileishmanial activity due to the pharmacophoric group. The World Health Organization considers leishmaniasis one the most serious diseases worldwide caused by protozoan parasites.

Resumo/Abstract

As leishmanioses são um conjunto de doenças causadas pelos protozoários do gênero *Leishmania*, que por afetar os estratos mais economicamente vulneráveis da população, é considerado negligenciado. No presente trabalho, é relatada a síntese de amidas a partir da 8-aminoquinolina e diferentes ácidos cinâmicos substituídos, ambos grupos funcionais que já demonstraram ser ativos frente à leishmania separadamente.^{1,2}

Primeiramente, os ácidos cinâmicos foram preparados através da condensação de Knoevenagel-Döbner utilizando benzaldeídos substituídos (**1a-d**) e ácido malônico (**2**), como pode ser observado na figura 1.

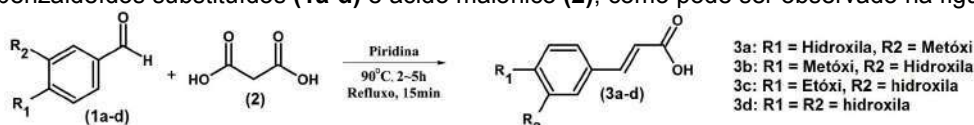


Figura 1. Preparação dos ácidos cinâmicos substituídos.

Seguindo-se então para as reações de cloração, utilizando cloreto de tionila e posterior condensação *in situ* dos cloretos de acila obtidos (**3a-e**) com a p-nitroanilina (**5b**) ou 8-aminoquinolina (**5a**), obtendo os compostos **6a-6f**. A combinação de condições reacionais que forneceram os melhores resultados globais estão descritas na figura 2.

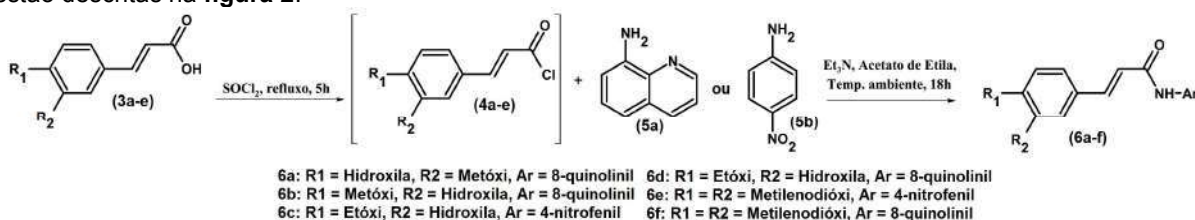


Figura 2. Síntese das amidas.

As reações foram monitoradas a partir da técnica de cromatografia em camada fina. Os produtos **6e** e **6f** foram caracterizados utilizando as técnicas espectroscópicas usuais e os compostos **6a-d** estão em processo de caracterização. Todos compostos obtidos terão suas atividades biológicas avaliadas e espera-se que estudos de modelagem molecular também sejam realizados a partir dos resultados obtidos.

Referências:

1 - Masic, A.; Hernandez, A. M. V.; Hazra, S.; Glaser, J.; Holzgrabe, U.; Hazra, B.; Schurigt, u.; PlosOne, 2015.

2 - Coimbra, E. S.; Antinarelli, L. M.; Silva, N. P.; Souza, I. O.; Meinel, R. S.; Rocha, M. N.; Soares, R. P.; da Silva, A. D.; *Chemico-biologicalinteractions*, 2016.

Agradecimentos/Acknowledgments

Os autores são gratos às agência CAPES, FAPERJ e CNPq pelo apoio financeiro.

Síntese de novos derivados benzimidazólicos com potenciais Atividades Antileishmania

Rafael de Lima Pinto (IC),^{1*} Maurício Rocha de Brito (IC),¹ Aurea Echevarria (PQ)¹ Cláudio E. Rodrigues-Santos (PQ)¹

rafaeldelimap@hotmail.com

¹Instituto de Química, UFRRJ

Palavras Chave: Benzimidazóis, síntese, fenilhidrazina, leishmaniose

Highlights

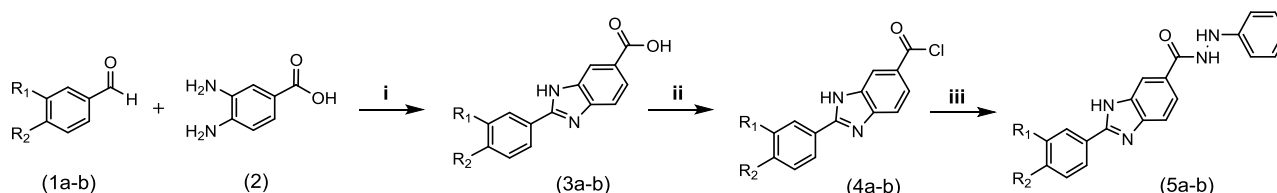
Synthesis of new benzimidazole derivatives with potential Antileishmania Activities. These molecules will be submitted the evaluation against *Leishmania*. New cases of leishmaniasis per year are reported from nearly 100 endemic countries.

Resumo/Abstract

Os parasitas protozoários do gênero *Leishmania* causam um grupo de doenças conhecidas como Leishmaniose, uma parasitose que afeta mais de 12 milhões de pessoas no mundo e é responsável por altas taxas de mortalidade em países tropicais e subtropicais.¹

De acordo com a nomenclatura de Hantzsch-Widman, aceita pela IUPAC, 1-H benzimidazóis são compostos derivados da condensação de um anel benzênico e um anel imidazólico, nas posições 4 e 5. Muito desses compostos apresentam atividades biológicas diversas, incluindo antiprotozoária. O presente trabalho relata a síntese de alguns compostos dessa classe.

A primeira etapa do processo se deu através da reação de ciclização de um benzaldeído (**1a-b**) com o ácido 3,4-diaminobenzóico (**2**), resultando nos benzimidazóis (**3a-b**), com bons rendimentos (82 e 99%, respectivamente). Posteriormente foi realizada a cloração dos compostos obtidos 3a-b, seguida da adição *in situ* da fenilhidrazina, obtendo os compostos hidrazínicos (**5a-b**), como pode ser observado na figura 1:



$R_1 = R_2 = H$, $R_1 = R_2 =$ metilendióxido // i. DMF/H₂O (9/1), refluxo 24 h; ii. SOCl₂, refluxo 8 h; iii. C₆H₅NHNH₂, etanol, refluxo.

Figura 1. Rota sintética dos derivados benzimidazólicos.

As reações foram monitoradas por cromatografia em camada fina. Os compostos **3a-b** foram caracterizados pela técnica de RMN e estão em processo de avaliação das atividades biológicas em parceria com a Fundação Oswaldo Cruz. Os produtos **4a-b** estão em fase de ajustes metodológicos e purificação.

Agradecimentos/Acknowledgments

Os autores são gratos às agências CNPq, pela concessão de bolsas de iniciação científica, a CAPES e a FAPERJ.

Referências Bibliográficas

[1] - Pinatto-Botelho, M. F., Crotti, A. E. M., Souza, J. M. de, Magalhães, L. G., & Donato, P. M. (2014). *Microwave-Assisted Synthesis and Antileishmanial Activity of 3-methoxycarbonyl-γ-butyrolactone Derivatives*. *Journal of the Brazilian Chemical Society*.

Synthesis and characterization of graphene by ultrasound method for the generation of H₂O₂

Thays S. Lima (PG),¹ Felipe M. Souza (PG),² Edson C. Paz (PG),² Victor S. Pinheiro(PG),² Fábio H. Batista(PG),¹ Fábio R. Simões(PQ),³ Mauro C.Santos (PQ),² Lúcia Codognoto (PQ).¹

thays.lima@gmail.com

¹ Department of Chemistry, DQ-UNFESP, Rua prof. Artur Riedel, 275, Diadema, SP, 09972-270, Brazil.

² Universidade Federal do ABC (UFABC), Av. dos Estados, 5001 - Bangu, Santo André – SP

³ Institute of Marine Sciences, IMAR-UNIFESP, Rua Carvalho de Mendonça, 144 - Encruzilhada - Santos/SP

Keywords: Graphene; Ultrasound method; Electrocatalytic activity; Oxygen reduction reaction.

Highlights

The electroactivity of graphene was investigated by electrochemical impedance and was about about 70 % during the oxygen reduction reaction in the generation of H₂O₂.

Abstract

In this work, we prepared graphene by ultrasound method [1] for graphite exfoliation with thermal reduction, to investigate the electrocatalytic activity for H₂O₂ production by oxygen reduction reaction (ORR). After the synthesis Graphene synthesized was characterized by scanning electron microscopy (SEM) showed in Figure 1A, energy dispersive spectroscopy (EDS), Raman spectroscopy showed in Figure 1B and Infra-Red spectroscopy (IR). The results at Figure 1A and 1B showed a comparison between graphite, graphene and graphene reduced, the ratio of areas between the Raman bands (I_D/I_G), were for graphite I_D/I_G = 0.59, for commercial graphene I_D/I_G = 1.45 and for the synthesized graphene I_D/I_G = 1.04, and for the reduced graphene I_D/I_G = 0.69. The ratio of approximately 1 found in commercial graphene and synthetic graphene indicate that only a single sheet of material was observed, making evident the formation of graphene by the ultrasound method. The electroactivity of graphene was investigated using electrochemical impedance spectroscopy and generation of H₂O₂. The electrogeneration of H₂O₂ measurements were performed using a rotating ring-disc electrode with a vitreous carbon disc (0.245 cm²) and gold ring (0.1866 cm²) with an experimental efficiency factor: 0.28. For graphene the H₂O₂ percentage was 70 % for two electrons transferred during ORR [2]. The results are promising for further application in the generation of H₂O₂, since using only graphene there is a high production of hydrogen peroxide, as graphene reduced is recognized as a good electrocatalyst for hydrogen peroxide production, the value of 70 % can be increased, because the thermal reduction there is an increase in the conductivity, observed in the impedance analysis, thus indicating a possible high production of H₂O₂.

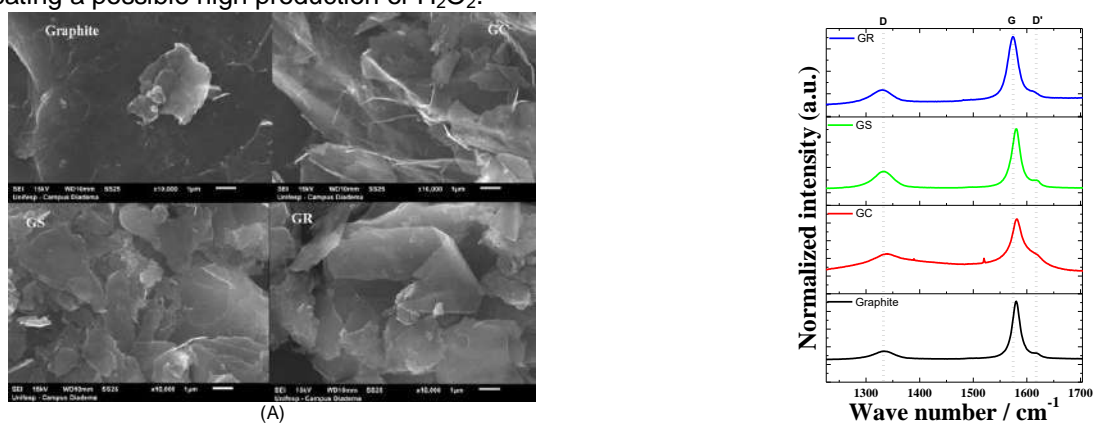


Figure 1: Characterization of graphene: A) SEM images of graphite, graphene commercial (GC), graphene synthesized(GS) and graphene reduced(GR); B) Raman spectroscopy of graphite, graphene commercial (GC), graphene synthesized(GS) and graphene reduced(GR)

Acknowledgments

UNIFESP, UFABC, CEM-UFABC, FAPESP (2017/21846-6, 2017/26288-1, 2017/22976-0, 2017/24742-7 and 2017/10118-0) and Laboratório de Eletroquímica e Materiais Nanoestruturados (LEMN)-UFABC

References

- [1] V. Sharma et al., *Int. J. Eng. Trends and Technology(IJETT)*, 26:1 (2015)38-42.
- [2] L. Demarconnay et al., *Electrochimica Acta* 49 (2004) 4513-4521.

Área: **EDU**Nº de Inscrição: **01036**

Proposta de Sequência Didática aplicado em aulas experimentais de Química Inorgânica II da Universidade Federal de Alfenas-MG

Eduardo Francisco da Silva Guimarães (IC),¹ Márcia Regina Cordeiro (PQ),¹

ed23ardo@gmail.com; ed23ardo@gmail.com

¹Instituto de Química, Universidade Federal de Alfenas-MG (UNIFAL-MG)

Palavras Chave: Química Inorgânica, Graduação, Aulas Experimentais, complexos, Ensino de Química

Highlights

Proposal of Didactic Sequence applied in experimental classes of Inorganic Chemistry II of the Federal University of Alfenas-MG. Didactic sequence from a bibliographic review, the need to rethink the process of teacher training. The advantages of experimentation in teaching chemistry. Inverted classroom, a promising methodology.

Introduction

Crescentes são as pesquisas que buscam melhorar o processo educacional no Brasil, e inúmeras dificuldades são apontadas como a razão dos problemas educacionais enfrentados no país, destacando-se o processo de formação dos professores brasileiros. Ciente deste fato, o presente trabalho aborda o processo de construção de uma sequência didática para aulas experimentais de Química Inorgânica II, disciplina ofertada no 3º período do curso de Química Licenciatura da Universidade Federal de Alfenas-MG.

Results and Discussion

Inicialmente verificou-se as leis e diretrizes que regulamentam os cursos de licenciatura no Brasil, em seguida pesquisou-se artigos destinados à experimentação, e como essa ferramenta didática pode auxiliar no processo de formação de professores. Posteriormente analisou-se o Projeto Político Pedagógico do curso de Química Licenciatura da Universidade Federal de Alfenas-MG, observando seus objetivos e alinhamento com a legislação vigente. Dedicou-se atenção as ementas das disciplinas, buscando estabelecer relações conceituais entre as mesmas, com objetivo de desenvolver as aulas experimentais numa perspectiva interdisciplinar. Para o desenvolvimento das aulas definiu-se como metodologia a metodologia da Sala de Aula Invertida, selecionando ao final do processo o material que será utilizado como apoio. A busca destes artigos foram feitas em diferentes plataformas de pesquisa, utilizando-se como palavras chaves os conceitos a serem ensinados. Adotou-se como critérios de escolha

destes artigos observando aqueles que possuíam procedimento experimental, a disponibilidade dos materiais e reagentes no laboratório e a possibilidade de execução em 140 minutos. Obteve-se como resultado a sequência expressa no Quadro 1.

| Aula | Conceito a ser aprendido | Experimento | Podem se correlacionar com |
|------|--|--|---|
| 1 | Introdução acerca dos sais duplos e técnicas de síntese de sais duplos. | Síntese de Sais Duplos com diferentes íons metálicos. | conceitos de matéria, estrutura atômica, propriedade periódica dos elementos químicos, e aspectos dos metais de transição. |
| 2 | Propriedades dos compostos de coordenação e técnicas de síntese de compostos de coordenação. | Síntese de compostos de coordenação com diferentes íons metálicos. | conceitos de matéria, estrutura atômica, propriedade periódica dos elementos químicos, e aspectos dos metais de transição, cinética química. |
| 3 | Teoria do Campo Cristalino | Síntese de diferentes complexos de Níquel. | interação interatômica, interação intermolecular, estrutura atômica, transição eletrônica, ligação covalente do tipo coordenada e iniciar seus estudos em métodos instrumentais de análise. |
| 4 | Esterioquímica dos compostos de coordenação. | Síntese de complexos acrilacetatos, utilizando como íon central o Ni(II) e Fe(II). | Conceitos como estereoquímica, geometria molecular, Teoria Ligação de Valência, Teoria do Orbital Molecular e Teoria de Repulsão dos Pares de Elétrons. |
| 5 | Simetria em compostos de coordenação. | Síntese de diferentes compostos de Níquel. | Geometria analítica, estrutura eletrônica, interações interatômicas e intermoleculares. |
| 6 | Cinética Química | cinéticos da aquação do trans-[Cr(en) ₂ Cl ₂ Cl] | Cinética química, estabilidade, reação química, Lei de Lambert-Beer, estereoquímica. |
| 7 | Reação de substituição em meio aquoso. | Compostos de alumínio a partir da Bauxita. | Propriedade periódica dos elementos, reação ácido-base, métodos de separação, métodos analíticos qualitativos. |
| 8 | Reação de substituição em meio não aquoso. | Síntese de complexo de ferro com ligante nitrogenado. | Reatividade química, propriedade periódica dos elementos, retro-doação, reação química, métodos instrumentais de análise. |
| 9 | Compostos de coordenação com átomo central não metálico. | Síntese e caracterização de complexos de Boro. | reatividade do boro, estrutura eletrônica, interação interatômica, conceitos que estão sendo aprendidos na disciplina teórica com esfera de coordenação e estabilidade de compostos de coordenação. |
| 10 | Experimento Livre | Experimento Livre | Experimento Livre |

Quadro 1: Sequência de aulas Química Inorgânica II Experimental

Conclusion

Ao fim da elaboração desta sequência didática pôde-se concluir que poucos são os artigos destinados à experimentação no ensino superior e também sobre a metodologia da sala de aula invertida, sendo necessário se desenvolver novas pesquisas nestas vertentes. Não foi possível aplicar a sequência didática, mas como perspectiva futura pretende-se aplicá-la na disciplina de Química Inorgânica II realizando as alterações necessárias.

Agradecimentos/Acknowledgments

**Universidade Federal de Alfenas,
Instituto de Química, Comissão
Organizadora 42º RASBQ**

Effect of different carbon blacks on the simultaneous determination of drugs as water contaminants based on screen-printed sensors

Patricia B. Deroco^{*1}(PG), Orlando Fatibello-Filho (PQ)¹, Fabiana Arduini² and Danila Moscone²

patyderoco@hotmail.com;

¹Departamento de Química, Universidade Federal de São Carlos, UFSCar; São Carlos – SP; ²Department of Chemical Science and Technologies, University of Rome “Tor Vergata”, Rome, Italy.

Palavras Chave: Acetaminophen, Paracetamol, Levofloxacin, Emerging environmental substances, Electroanalysis

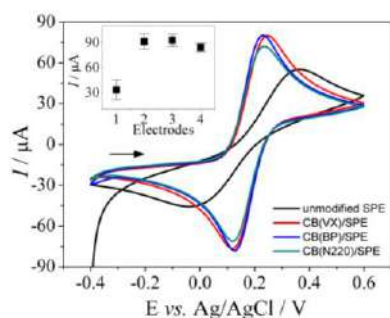
Highlights

A miniaturized electrochemical sensor based on SPE electrode modified with nanoparticles of carbon black. It was used to quantification simultaneously acetaminophen and levofloxacin in water sample.

Resumo/Abstract

Emerging pollutants encompasses a wide range of compounds, which continuously enter into the aquatic environment [1]. The pharmaceutical industry has been contributing to the increase of emerging pollutants in the waters, due to the high consumption of medicines around the world and as a consequence, the elimination of these drugs through the sewage [2]. In this context, emerging pollutants are global challenges affecting several research sectors in many areas. The analytical chemistry has the role to develop new methods for sensitive detection/quantification of these substances as well as to deliver cost-effective, fast and easy to use tools for on-site routine control/monitoring of the aquatic environment. Thus, we developed a simple sensor based on screen-printed electrode (SPE) modified with carbon black (CB) to determine simultaneously acetaminophen (ACP) and levofloxacin (LVF), important drugs used in combination and recently classified as emerging pollutants by NORMAN Group [3]. This is first time that a suitability miniaturized sensor modified with CB is used for the simultaneous determination of these drugs.

For the construction of the sensor, three different CB materials (VXC72R, BP 4750 and CB N220) were explored as modifying nanomaterial. Firstly, the electrochemical activity of the each SPE modified was compared by CV and EIS techniques, using $[\text{Fe}(\text{CN})_6]^{3-/4-}$ as redox couple. As can be inferred from the below Fig., the incorporation of CB on the SPE surface caused a remarkable increase of peak currents (anodic and cathodic) (c.a. 3 times for the CB(VX)/SPE and CB(BP)/SPE sensors and 2.5 times for the CB(N220)/SPE sensor) and a decrease of peak-to-peak potential separation (ΔE_p) (c.a. 258, 278 and 265 mV for the CB(VX)/SPE, CB(BP)/SPE and CB(N220)/SPE sensors, respectively), which is characteristic of an electrocatalytic effect.



The electrochemical activity of these electrodes also was investigated for electrooxidation of the analyte of interest (ACP and LVF) using CV. After demonstrating that electrodes modified with different types of CB were characterized by improved electrochemical performances when compared with bare electrodes, and among them, the electrode CB(BP)/SPE is characterized by slightly better electrochemical properties, this type of electrode was used for the development of the analytical method.

By applying SWV technique using 0.02 mol L^{-1} phosphate buffer (pH 3.0), the obtained analytical curves for ACP and LVF were linear in the concentration range from 4.0 to $80.0 \text{ } \mu\text{mol L}^{-1}$ and from 0.90 to $70.0 \text{ } \mu\text{mol L}^{-1}$ with limit of detection of $2.6 \text{ } \mu\text{mol L}^{-1}$ and $0.42 \text{ } \mu\text{mol L}^{-1}$ for ACP and LVF, respectively. Finally, the quantification of these drugs in river water was evaluated using the new here-proposed sensor by recovery method in spiked samples, obtaining satisfactory recovery values (from 98.3 to 106 %). Clearly, this new proposed sensor can be considered of great analytical interest, since demonstrated appropriate electrochemical performances with the advantages to be cost-effective. The miniaturized devices can be applied for environmental monitoring and control in situ.

[1] Geissen V et al. *J. Int Soil Water Cons Res* 3 (2015) 57-65.

[2] Fatta-Kassinos D, Meric S, Nikolaou A. *Anal Bioanal Chem* 399 (2011) 251-275.

[3] NORMAN List of Emerging Substances, <http://www.norman-network.net/?q=node/81>, accessed 10.11.2017

Agradecimentos/Acknowledgments

FAPESP (2014/07919-2 and 2017/23940-0) CNPq (405546/2018-1) e CAPES.

Área: TEO Nº de Inscrição: 01038

(Inserir a sigla da seção científica para qual o resumo será submetido. Ex: ORG, BEA, CAT) (Inserir o número de inscrição do autor que fez a submissão)

Computational study of saccharide solvation using minimum-distance distribution functions.

Rafael A. Vicente (IC),¹ Leandro Martínez (PQ).^{1*}

rafael_ph1@hotmail.com; leandro@iqm.unicamp.br

¹Instituto de Química e Centro de Computação em Engenharia e Ciências, Universidade Estadual de Campinas.

Palavras Chave: Saccharide, Carbohydrate, Preferential solvation, Minimum-distance, Distribution function.

Highlights

This work presents the minimum-distance distribution function of saccharides. These distribution functions represent more accurately the spatial distribution of solvents around complex shaped solutes.

Resumo/Abstract

Distribution functions represent how a solvent is distributed around a solute. These functions are based on the ratio between the density of the solvent molecules in a certain solvation shell and the density of the bulk solution, where intermolecular interactions become negligible. This mathematical relationship contains the basic information necessary for the determination of molecular structure and its interactions.

These distribution functions are generally radial, which means that they represent the distribution of the solvent molecules radially to the solute's center of mass. However, molecules whose structure is complex, i.e. large glycans, pose a problem being represented radially, since its shape is far from being spherical. Thus, a different approach is necessary in order to obtain a better representation of the solvent structure for these complex solutes.

An alternative distribution function explored in our research group is the minimum-distance distribution function (MDDF). This function is based on the solute surface, instead of its center of mass. This means that the distance of the solvent is considered to be the shortest distance between any atom of the solute and any atom of the solvent and not the distance to the solute's center of mass^{[1],[2]}.

Here, we use MDDFs to study the solvation structure of carbohydrates. Figure 1 shows the MDDF obtained from molecular dynamics simulations of the solvation of glycerol by water in contrast to the usual radial distribution function (RDF).

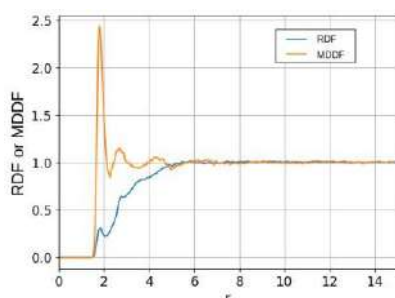


Figure 1 – Radial (RDF) and minimum-distance (MDDF) distribution functions of glycerol dissolved in water.

The structural information present in MDDF is much clearer. The intensity of the first solvation shell, related to hydrogen bonds between water and glycerol hydroxyl groups, is easier to notice. Moreover, two other secondary shells around 2,8 Å and 4,5 Å are perfectly observable, differently from the RDF where these interactions are hardly seen as peaks.

Beyond offering a clearer and more informative structural output, the MDDF can be easily decomposed into atomic type contributions and facilitates the calculation of thermodynamic properties, like the KirkwoodBuff integrals and, consequently, preferential solvation parameters.

[1] - Martínez, L., & Shimizu, S. (2017). Molecular interpretation of preferential interactions in protein solvation: a solvent-shell perspective by means of minimum-distance distribution functions. *Journal of chemical theory and computation*, 13(12), 6358-6372.

[2] - Oliveira, I. P., & Martínez, L. (2016). Molecular basis for competitive solvation of the Burkholderia cepacia lipase by sorbitol and urea. *Physical Chemistry Chemical Physics*, 18(31), 21797-21808.

Agradecimentos/Acknowledgments

We thank FAPESP process numbers 2018/13262-7, 2010/16947-9, 2013/05475-7 and 2013/03293-7 for the financial support.

Effect of Cu²⁺ in CuMgFe-CO₃ layered double hydroxide as catalysts in the degradation of the antibiotic sulfatiazole in heterogeneous photo-Fenton process

Nayara de Melo Costa (PG),¹ Rosembergue Gabriel Lima Gonçalves (PG),¹ Hernán Dario Rojas Mantilla (PG),¹ Celso Valentim Santilli (PQ),¹ Raquel Fernandes Pupo Nogueira (PQ).¹

nayarameloc@hotmail.com

¹Universidade Estadual Paulista (UNESP), Instituto de Química.

Palavras Chave: Eficiência Catalítica, Fármacos, Hidróxidos Duplos Lamelares (HDL), Fenton Heterogêneo.

Highlights

- CuMgFe-CO₃ (7% Cu) showed better catalytic efficiency than MgFe-CO₃ (0% Cu) in sulfatiazole degradation.
- The materials showed crystallinity, phase purity and stability.

Resumo/Abstract

A ocorrência de fármacos em efluentes mesmo em baixas concentrações aliada à ineficiência dos tratamentos convencionais e ao déficit de regulamentações governamentais para a remoção destes contaminantes, pode ter impacto negativo no ecossistema e na saúde humana.¹ No presente trabalho, foi estudada a atividade de Hidróxidos Duplos Lamelares (HDL) à base de ferro e cobre como catalisadores em processo foto-Fenton heterogêneo visando a degradação do antibiótico sulfatiazol (STZ) em água. Os materiais MgFe-CO₃ (0% Cu) e CuMgFe-CO₃ (7% Cu) foram caracterizados por técnicas adequadas a fim de correlacionar a composição e estrutura à sua atividade. Os difratogramas de raios X dos HDL com e sem Cu mostram os planos basais em 003, 006 e 009, característicos de compostos de estrutura lamelar e correspondentes aos planos de empilhamento das lamelas (Figura 1a). A alta intensidade dos picos reflete a cristalinidade dos materiais. A atividade catalítica dos HDL foi avaliada em processo de fotodegradação em 300 mL de solução de STZ (150 µg L⁻¹) contendo 0,5 g L⁻¹ do material e 4,0 mmol L⁻¹ de H₂O₂ sob agitação magnética (1200 – 1400 rpm) e fonte de irradiação LED visível (460 nm ± 10 nm). Os resultados apontam que a introdução de Cu²⁺ no material acelera a degradação atingindo a concentração de STZ abaixo do limite de detecção (4,8 µg L⁻¹) após 90 min (Figura 1b) e com baixo consumo de peróxido de hidrogênio (~ 12%) (Figura 1c). A maior eficiência de degradação do catalisador CuMgFe-CO₃ (7% Cu) está relacionada ao par redox Cu⁺/Cu²⁺, pois a transferência de elétrons do Cu⁺ para o H₂O₂ favorece a geração de radicais HO[•]: Cu⁺ + H₂O₂ → Cu²⁺ + HO⁻ + HO[•] k = 1 x 10⁴ M⁻¹ s⁻¹.² O catalisador CuMgFe-CO₃ (7% Cu) apresenta maior área superficial específica (91,84 ± 0,41 m² g⁻¹) comparado a MgFe-CO₃ (0% Cu) (42,87 ± 1,62 m² g⁻¹) que também favorece a reação com H₂O₂. Ambos os materiais sintetizados apresentaram estabilidade, uma vez que não foi observada lixiviação de ferro (Fe_{total} < 3,15 µg L⁻¹) ou de cobre (Cu_{total} < 0,2 µmol L⁻¹). Não houve adsorção significativa do contaminante na superfície do catalisador e reator (Figura 1b). Os resultados indicam que o processo aplicado apresenta potencial para degradação de fármacos, com um baixo consumo de H₂O₂ e racionalização de energia elétrica pelo uso de lâmpadas LED.

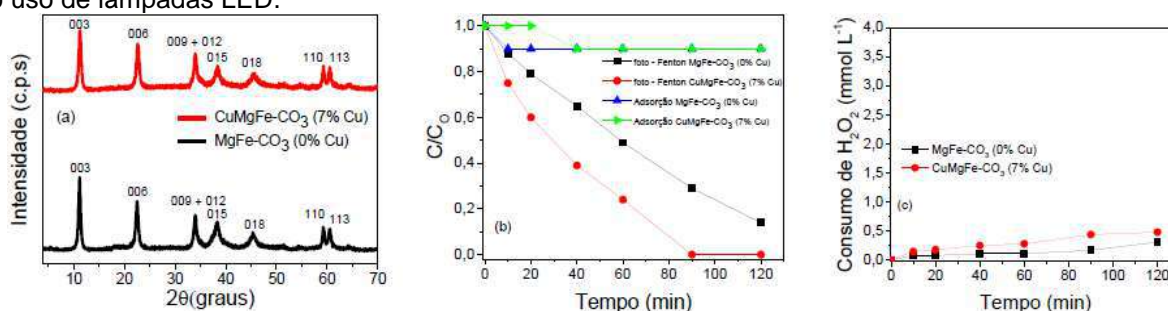


Figura 1: Espectro de difração de raios X (a), experimento de adsorção e fotodegradação (b) e consumo de H₂O₂ (c).

Referências: 1. SERPONE, et al. Current Opinion in Green and Sustainable Chemistry, v. 6, p. 18-33, 2017. 2. WANG, et al. Journal of Hazardous Materials, v. 353, p. 53-61, 2018.

Agradecimentos/Acknowledgments

FAPESP, CAPES e CNPq

42ª Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química: Eixos Mobilizadores em Química

Área: AMB

Nº de Inscrição: 49253

Herbicide resistance in Brazil: status, impacts and future perspectives

Ricardo Alcántara-de la Cruz (PQ),^{1*} Gabriel S. Amaral (PG),¹ Maria Fátima das Graças Fernandes da Silva (PQ),¹

ricardo.cruz@ufscar.br; ricardo.cruz@ufscar.br

¹Departamento de Química, UFSCar

Palavras Chave: *Cross-resistance, Integrated Weed Management, Multiple resistance, Herbicide resistance cost*

Highlights

Herbicide resistance has increased exponentially in Brazil, increasing the cost of weed management by more than 100%. However, the origin, cause and how to prevent the propagation of herbicide resistance has been studied poorly. The trend is for cases of herbicide resistance to increase in the coming years in the country if little effort continues to be devoted to understanding the origin and cause of herbicide resistance.

Resumo/Abstract

Brazil is a large producer and exporter of crops in global terms; however, weeds reduces its productive potential. Chemical control is the main method for control weeds in the country, but the continued use of herbicides has selected for resistant species. Herbicide resistance is the ability of a weed to survive and reproduce after exposure to the field dose of a given herbicide normally lethal to a wild weed population of the same species. According to the Database of *The International Survey of Herbicide Resistant Weeds* (<http://www.weedscience.org/Summary/Country.aspx?CountryID=5>), there are 50 weed species resistant to herbicides confirmed in the country. However, this number is far from reality because only the unique cases (species x site of action) are reported, and in countries like the United States and Australia there are more than 35 reports for the same unique case in different provinces. *Bidens pilosa* was the first case recorded Brazil in 1993, showing cross-resistance to the ALS-inhibiting herbicides. From 1993 to 2010 were reported 26 cases (five with multiple resistances to two sites of action). The introduction of herbicide-tolerant crops has provided several changes related to the cropping system related to the weed management increasing the herbicide resistance cases. Between 2011 and 2018 were reported 24 cases of herbicide resistance (11 with multiple resistance), mainly in glyphosate-resistant (GR) crop fields. The main groups of herbicides with resistance are the inhibitors of the ALS, ACCase, EPSPS with 29, nine and 15 cases, respectively. The increase in herbicide resistance cases (simple, multiple- or cross-resistance) has been due to the lack of studies characterizing the resistance mechanisms, which are important for the proper choice of management methods, and only in few species these mechanisms has been characterized. The Brazilian weed scientists have focused their efforts on evaluating different herbicides as the main alternative for the management of resistant weeds; however, the rotation of herbicides proposed had contributed to the selection of weeds with cross-resistance and/or multiple. Of the 16 cases of multiple or cross-resistance reported in Brazil, 14 occurred in the last 10 years. The most worrying case is *Conyza sumatrensis* which was found as being resistant to the EPSPS, PSI, PSII, PPO inhibitors and synthetic auxins in a GR-soybean field from Assis Chateaubriand-PR. The management of the herbicide resistance may represent an increase ranging from 100 to 350% ha⁻¹ of the costs devoted for weed control in relation to fields with no resistance. For example, the average cost of the herbicide resistance in Brazil, only for the soybean production, is estimated in R\$ ~5 billion year⁻¹. If the possible crop losses due to competition are added, this total may reach R\$ 9 billion year⁻¹. Considering these statistics, the trend is that cases of herbicide resistance, mainly of the multiple resistance, continue increasing in the coming years in Brazil, even with the introduction/adoption of "new management", if little effort continues to be devoted to understanding the origin and cause of herbicide resistance.

Agradecimentos/Acknowledgments



Área: ORG

Nº de Inscrição: 01042

Síntese e avaliação antifúngica de novos derivados de succinimidas policíclicas N-substituídas via reação de Diels-Alder

Hugo S. Braqueroli (IC),¹ Luisa L. Marçal (FM)^{1*}.

hugobraqueroli@gmail.com; luisa.marc@ufrj.edu.br

¹Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia do Rio de Janeiro campus Nilópolis, IFRJ.

Palavras Chave: Imidas Cíclicas, Succinimidas, Diels-Alder.

Highlights

Synthesis and antifungal evaluation of novel N-substitued polycyclic succinimide derivatives using Diels-Alder reaction. Organic synthesis. Cyclic imides. Succinimide synthesis. Diels-Alder reaction. Antifungal molecules. Synthesis of a polycyclic imide using Diels-Alder reaction. Molecules with potential antifungal activity.

Resumo/Abstract

Este trabalho visa à síntese e avaliação antifúngica de novos derivados de succinimidas policíclicas N-substituídas via condensação Diels-Alder. Para a síntese foram propostas duas vertentes: (a) acoplamento inicial entre aminas primárias e anidrido maleico seguido de condensação Diels-Alder entre as maleimidas N-substituídas sintetizadas e cicloexenona/APTS, objetivando moléculas policíclicas de interesse; (b) condensação Diels-alder inicial entre o anidrido maleico e cicloexenona/APTS seguido de acoplamento do anidrido policíclico formado com aminas primárias, gerando as imidas policíclicas desejadas. Todas as reações são acompanhadas por cromatografia de camada fina. A caracterização dos compostos é feita a partir de ponto de fusão, RMN e infravermelho. A avaliação da atividade antifúngica será realizada utilizando o fungo *Candida albicans* comparando com um antifúngico comercial. Explorou-se várias modificações metodológicas nas duas vertentes propostas (Tabela 1 e Tabela 2) com o objetivo de gerar reações limpas e com bons rendimentos. Atualmente estão sendo testadas otimizações em ambas etapas das vertentes, tendo maiores êxitos nas explorações sem solvente, estando as moléculas até então obtidas em processo de caracterização. Todas as substâncias objetivadas são inéditas e com possível atividade antifúngica, o que torna notório o importante potencial da pesquisa que vem sendo desenvolvida.

Tabela 1: Parâmetros reacionais utilizados durante a realização da etapa 1 da vertente a.

| Solvente | Tempo (h) | Temperatura (°C) | mmol | Aditivos |
|-----------------------------|---------------|---------------------|-----------|--------------------------------|
| DEG; DMF; AcOH; s/ solvente | 2; 4-6; 8-10. | TA; 75-80; 145-150. | 1; 5; 10. | H ₂ SO ₄ |

Fonte: Elaboração Própria

Tabela 2: Parâmetros reacionais utilizados durante a realização da etapa 1 da vertente b.

| Solvente | Tempo (h) | Temperatura (°C) | mmol | Aditivos |
|-----------------------|------------------|------------------------|--------------|---|
| DMF; ACN; s/ solvente | 1-2; 4-7; 10-12. | TA; 100; 110; 115; 120 | 1; 5; 10; 11 | H ₂ SO ₄ ; NH ₄ OH alcoólico; Et ₃ N; APTS. |

Fonte: Elaboração Própria

Agradecimentos/Acknowledgments

Agradeço a minha orientadora pela paciência, atenção e dedicação. Ao IFRJ pelo auxílio financeiro juntamente ao CNPq e à central analítica da instituição, por todas as análises efetuadas.

Área: QPN N° de Inscrição: 01043

Seasonality effect on volatile composition of a green propolis type from Caatinga biome at northern Ceara state (Brazil).

Lavosyer da Silva Mendonça (IC),¹ Vanessa Moreira Frota (IC),¹ Yasmim Sabino Nepomuceno Barrozo (IC),² Jorge Alberto Bezerra Fernandes (PQ),² Guilherme Julião Zocolo (PQ),³ Geovany Amorim Gomes (PQ)¹, Jean Parcelli C. do Vale (PQ)¹, Paulo Nogueira Bandeira (PQ),¹ Hécio Silva dos Santos (PQ),¹ Tigressa Helena S. Rodrigues (PQ)^{1*}.

Categorias: Pesquisador (PQ) e Estudante de graduação (IC).

lavosyer.mendonca@gmail.com; thelenasr@yahoo.com.br

¹Curso de Química, Universidade Estadual Vale do Acaraú (UEVA), ²Curso de Irrigação e Drenagem, Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia do Ceará (IFCE) – Campus Sobral, ³Embrapa Agroindústria Tropical.

Palavras Chave: Green propolis, Chemical compounds, Sesquiterpenes, β -Caryophyllene.

Highlights

- Seasonality (rainy and dry season) influence on volatile composition of a green propolis type from Ceara state (Brazil).
- The sesquiterpenes are the predominant volatile compounds in green propolis, among the season evaluated.

Resumo/Abstract

Propolis is a complex mixture collected by bees from plants exudates, mixed with bee enzymes, pollen and wax. In general, the well-known propolis properties (antibacterial, antifungal, antiviral, antioxidant, anti-inflammatory among others) are attributed to phenolic acids and flavonoids compounds. Besides this, the volatile constituents of propolis also play an important role also for human propolis users by contributing to its pleasant aroma and its biological activity. Propolis is a bee product of plant origin, thus at different geographic locations its composition was found to vary within the vegetation area and season. In the Ceara state (Brazil) there are the rainy and dry seasons, which probably influence the volatile composition of propolis and its properties. The aim of this study was to evaluate the influence of seasonality (rainy and dry seasons) on the volatile composition of a green propolis (*Apis mellifera*) type from Caatinga biome at northern Ceara state (Brazil). Aliquots (2g) of green propolis were submitted to headspace-SPME-GCMS analysis, using PDMS fiber for volatiles extraction followed by GCMS desorption and chemical profile acquisition. The results showed that the sesquiterpenes are the predominant volatile compounds in green propolis, among the season evaluated. It were identified the β -Caryophyllene (15.24 ± 0.34 and $15.31\% \pm 0.18$), 7-epi- α -Selinene ($14.92\% \pm 0.98$ and $16.31\% \pm 0.02$), β -Selinene ($7.58\% \pm 0.66$ and $9.09\% \pm 0.12$) as major compounds in rainy and dry season, respectively. It was found there is no expressive difference in the sesquiterpenes composition in both seasons studied and probably the Ceara northern seasonality did not influence the propolis properties.

Agradecimentos/Acknowledgments



UNIVERSIDADE ESTADUAL
VALE DO ACARAÚ



F U N C A P



INSTITUTO
FEDERAL
CEARA
Campus
Sobral



Embrapa
Agroindústria Tropical



Synthesis of banana-shaped molecules derived from 2-methoxy-3-cyanopyridine

Priscila P. Abatti (PG),^{1*} Hugo Gallardo (PQ).¹

pittyabatti@hotmail.com

¹Departamento de Química, UFSC.

Palavras Chave: *Liquid crystal, Banana mesogen, 2-methoxy-3-cyanopyridine.*

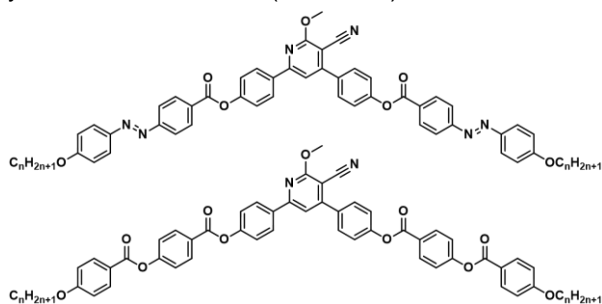
Highlights

- Banana phases formation with large thermal stability range.
- Alkoxy chain length is an important factor for the induction of B1 and B2 phase.
- Altering the linking group favors the formation of B5 phase.

Resumo/Abstract

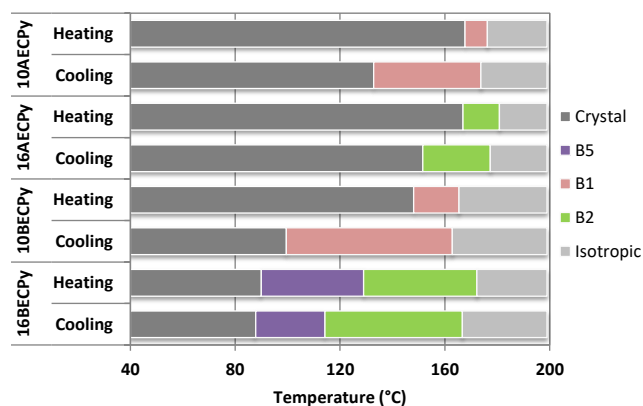
Banana liquid crystals can be used in different types of displays, being able to present a perfect contrast, fast response time, without the need for a precise and uniform alignment. These advantages are possible due to the ferroelectric property exhibited by some class B mesogens.^{1,2} The use of 2-methoxy-3-cyanopyridine-derived building blocks in the design of new banana liquid crystals is quite interesting, because they presenting high chemical and thermal stability, good charge mobility and luminescence.³ In this context we informed here the synthesis, characterization and thermal studies of four novel bent-core mesogens derived from 2-methoxy-3-cyanopyridine were performed, presenting a characteristic anisometry of banana-shaped (Scheme). All the final compounds synthesized were characterized by ¹H and ¹³C NMR, mass spectrometry and IR spectroscopy. The thermal stability and their mesomorphic properties were studied by TGA, POM, DSC and XRD. Of the four molecules synthesized, two exhibited B1 phase and two showed B2 phase, both thermodynamically stable. A very important factor for the induction of mesophase in these materials was the length of the alkoxy chain.⁴ It is possible to observe that for molecules with 10-carbon alkoxy chains (Figure - 10AECyP and 10BECyP) the textures are characteristic of B1 phase and for the compounds with 16 carbons (Figure - 16AECyP and 16BECyP) the textures are characteristic of B2 phase.⁵ In addition, the exchange of the azo linking group with an ester linking group resulted in the amplification of the mesomorphism range, as well as favoring the formation of a more ordered mesophase being related to B5 phase (Figure - 16BECyP).⁴ Thus, 2-methoxy-3-cyanopyridine showed a very promising mesogenic nucleus for application in optoelectronics, where its adequate functionalization can lead to the formation of stable banana-phases.

Scheme - Structural representation of the synthesized molecules (n = 10,16).



1. Jáklí, A. SPIE Newsroom, 2011.
2. Takezoe, H. Mol. Cryst. Liq. Cryst., 2017, 646, 46-65.
3. Ahipa, T. N. & Adhikari, A. V. Tetrahedron Lett., 2014, 55, 495-500.
4. Gimero, N. & Ros, B. Handb. Liq. Cryst.: 8, 2014, vol. 7, 1-75.
5. Taylor, P. et al. Liq. Cryst., 2000, 27, 103-113.

Figure - Bar chart showing phase transitions (DSC) for the synthesized compounds.



Agradecimentos/Acknowledgments

We thank UFSC for the learning, the INCT-catalysis, FAPESC, CAPES/PROCAD, PRONEX for the investments and the CNPq for the financial support.

Flipped Classroom and Project Based Learning: a Great Combination for Organic Chemistry Laboratory

Samuel R. Mendes (PQ), Maitê S. da Silva (PG), Anne G. Meirinho (PG), Vinícius F. Pereira (IC)

samuel.mendes@udesc.br

Chemistry Department, Universidade do Estado de Santa Catarina, Rua Paulo Malschitzki, 200, Joinville, SC, Brazil, 89219-719.

Keywords: Chemistry Education, Organic Chemistry, Laboratory Instruction, Flipped Classroom, Project Based Learning

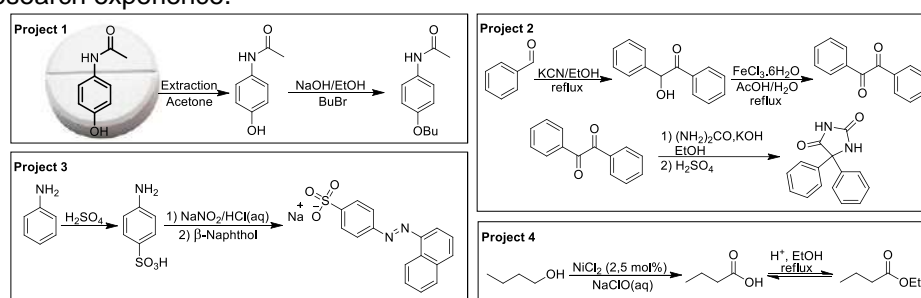
Highlights

Flipped Classroom was applied as a pre-laboratory activity to prepare the students for the lab, and Project Based Learning to provide students an opportunity for an authentic research experience.

Resumo/Abstract

Experimental classes are essential for undergraduate chemistry degree programs.^{1,2} Moreover, studies have showed the importance of the development of projects and independent research experiences in undergraduate chemistry education.^{3,4} In this context, Organic Chemistry Laboratory is one of the most challenging disciplines, because it applies the concepts of Organic Chemistry in experimental activities.^{5,6}

With that in mind, we decided to employ the Flipped Classroom and Project Based Learning in the discipline of Organic Chemistry Laboratory. In this scenario Flipped Classroom was used as a pre-laboratory activity to prepare the students for the lab and Project Based Learning to provide students an opportunity for an authentic research experience.



Scheme 1. Projects performed.

The semester was divided in two parts, the first half was devoted to basic laboratory techniques and Flipped Classroom was employed as a pre-laboratory activity to prepare the students for the lab by providing videos of techniques that students watched before coming to the lab and online exercises about laboratory techniques and generic mechanisms. In the second half of the semester, the Project Based Learning was used to provide students an opportunity to authentic research experience. Once the students have learned the basic laboratory techniques, they were challenged to develop a synthesis project (Figure 1b). Initially, students had to research their own procedures through search tools (Reaxys and SciFinder). After that, they were required to discuss their synthesis plan with the professor and make necessary adjustments. Then, in the second part, students performed the synthesis of their molecules target; each group followed the reactions by TLC and analyzed the intermediaries and products by NMR spectroscopy and GC-MS. Finally, after completing the synthesis, the groups presented their results through an oral section and delivery of a manuscript.

The application of the Flipped Classroom and Project Based Learning in the discipline of Organic Chemistry Laboratory showed a great combination. The success of employment of these methodologies can be seen by the increasing the average score and by the absence of failed students in the semester.

Agradecimentos/Acknowledgments

CNPq, CAPES, FAPESC, UDESC and FITEJ

(1) Elliott, M. J.; Stewart, K. K.; Lagowski, J. J. *J. Chem. Educ.* **2008**, *85*, 145. (2) Blackburn, R. A. R.; Villa-Marcos, B.; Williams, D. P. *J. Chem. Educ.* **2018**, DOI: 10.1021/acs.jchemed.8b00549. (3) Kirchhoff, M. M. *ACS Education Chemistry Education: Experiments Worth Running*, **2007**, *84*, 1090–1091. (4) Dintzner, M. R.; Maresh, J. J.; Kinzie, C. R.; Arena, A. F.; Speltz, T. A. *J. Chem. Educ.* **2012**, *89*, 265–267. (5) Grove, N. P.; Bretzb, S. L. *Chem. Educ. Res. Pract.* **2010**, *11*, 207–211. (6) Mooring, S. R.; Mitchell, C. E.; Burrows, N. L. *J. Chem. Educ.* **2016**, *93*, 1972–1983.

Área: QPN

Nº de Inscrição: 49261

Glyphosate tank-mixtures and alternative herbicides for glyphosate-resistant weed control in Mexican citrus

Gabriel S. Amaral (PG),¹ Ricardo Alcántara-de la Cruz (PQ),^{1*} Maria Fátima das Graças Fernandes da Silva (PQ),¹ José Alfredo Domínguez-Valenzuela (PQ),² Rafael De Prado (PQ),³

amaral91gabriel@gmail.com; ricardo.cruz@ufscar.br

¹Departamento de Química, UFSCar; ²Departamento de Parasitología Agrícola, UACH-México, Departamento de Química y Edafología, UCO-España

Palavras Chave: *Citrus latifolia*, *Hairy beggarticks*, *Integrated weed management*, *Junglerice*, *Tropical sprangletop*

Highlights

Bidens pilosa and *Leptochloa virgata* selected for glyphosate resistance in citrus groves from Mexico. Glufosinate + oxyfluorfen and glyphosate + (bromacil + diuron) controlled efficiently these weeds, but were ~4.7 times more expensive than glyphosate (1080 g/ha⁻¹). The choice of the management methods to control glyphosate resistance weeds must consider other citrus production costs rather than its individual price.

Resumo/Abstract

Glyphosate is a cheap herbicide that has been used to control a wide range of weeds (4-6 times/year) in citrus groves of the Gulf of Mexico. However, its excessive use has selected for glyphosate-resistant weeds such as hairy beggarticks (*Bidens pilosa*) and tropical sprangletop (*Leptochloa virgata*) that were confirmed as being resistant to these herbicides. We evaluated the efficacy and economic viability of 13 herbicide treatments [glyphosate combined with PRE- and/or POST-emergence herbicides and other alternative treatments], applied in tank-mixture or sequence, to control glyphosate-resistant weeds in two Persian lime groves (referred to as SM-I and SM-II) of the municipality of Acateno, Puebla, during two years (2014 and 2015). The SM-I and SM-II fields had 243 and 346 weeds/m², respectively, composed mainly hairy beggarticks and tropical sprangletop. Junglerice (*Echinochloa colona*) was also frequent in SM-II. The treatments of glyphosate alone [1080 (field dose), 1440 or 1800 g acid equivalent (ae) ha⁻¹] presented control levels of the total weed populations ranging from 64 to 85% at 15, 30 and 45 d after application (DAA) in both fields. Mixtures of glyphosate (1080 g ae ha⁻¹) plus grass herbicides such as fluazifop-p-butyl [250 g active ingredient (ai) ha⁻¹], sethoxydim (368 g ai ha⁻¹) and clethodim (236 g ai ha⁻¹) controlled efficiently junglerice and tropical sprangletop, but favored the regrowth of hairy beggarticks. The other treatments, applied in tank-mix or in sequence with glyphosate, had similar or lower control levels (~70%) than glyphosate at 1080 g ae ha⁻¹, except the sequential applications of glyphosate + (bromacil + diuron) [1080 + (1200 + 1200) g ai ha⁻¹] and glufosinate + oxyfluorfen (450 + 480 g ai ha⁻¹), which controlled in more than 85% the total weed community for more than 75 days. However, these treatments were 4.6 and 4.9 times more expensive, respectively, compared to the cheapest treatment (glyphosate 1080 g ae ha⁻¹ = USD \$29.0 ha⁻¹). Glufosinate alone (450 g ai ha⁻¹) and paraquat + diuron (400 + 200 g ai ha⁻¹) controlled weeds in >90% at 15 and 30 DAA, but its efficacy decreased to 77 and 48%, respectively, at the 75 DAA. Glyphosate alone, even at high doses, had difficulty to control the two glyphosate resistant weeds, hairy beggarticks and tropical sprangletop. The choice or not of the most expensive treatments [glufosinate + oxyfluorfen and/or glyphosate + (bromacil + diuron)] must consider other factors associated with production costs and not only its individual price to obtain an integrated weed management in the short and long term.

Agradecimentos/Acknowledgments



Pd@Au nanoparticles applied to electrochemical determination of 4-nitroaniline

Marília Reginato de Barros (PG),¹ João Paulo Winiarski (PG),¹ Welman Curi Elias (PQ),² Cristiane Luisa Jost (PQ)¹

marilia.reginato@gmail.com

¹Departamento de Química, UFSC; ²Department of Chemical and Biomolecular Engineering, Rice University.

Keywords: bimetallic nanoparticles, voltammetry, nitroaromatic compounds

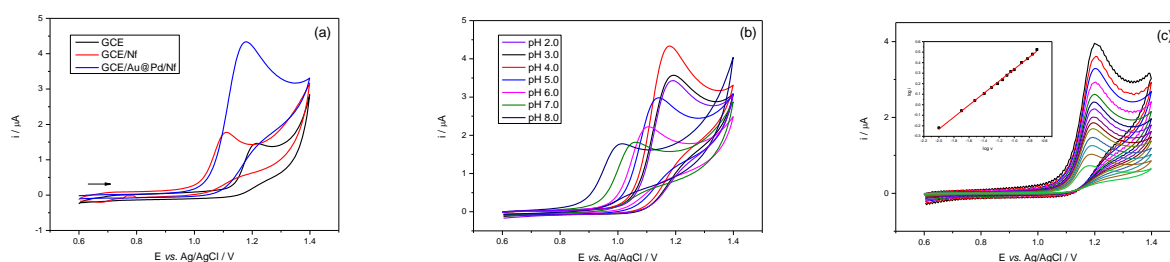
Highlights

Pd@Au nanoparticles were synthesized. A film with Pd@Au nanoparticles and Nafion was immobilized onto glassy carbon electrode. The oxidation of 4-NA was studied by electrochemical techniques.

Abstract

Nitroaromatic compounds are common industrial intermediates to manufacturing textile dyes, pesticides, pharmaceuticals and fuels additives. These substances can reach the environment by irregular industrial wastewater storage or discharge, or by agrotoxic degradation. 4-Nitroaniline (4-NA) has been considered one of the major priority pollutants due to its chemical stability, persistence and toxicological effects to human health and living organisms at low concentrations [1,2]. Considering this environmental issue and the relevance to quantify these compounds in wastewaters, several methods have been developed for its determination using different techniques. Voltammetric techniques have been explored to determine nitroaromatic compounds, although the reports about electrochemical determination of 4-NA are very limited in the literature. In order to explore the potentiality of modified electrodes to quantify this analyte in aqueous medium, this work proposes the development of a novel method using a new modified glassy carbon electrode (GCE) with bimetallic palladium/gold nanoparticles with Nafion polymer film (GCE/Pd@Au/Nf). The bimetallic nanoparticles were synthesized according to a previous report [3]. The modified electrode was also characterized by EDS showing the presence of Pd and Au atoms on the surface of the GCE. Electrochemical studies showed irreversible oxidation process in the electrochemical behaviour of 4-NA onto several modification steps (Figure 1a). The best compromise between analytical signal and peak height intensity was obtained with the modified electrode GCE/Pd@Au/Nf. A maximum peak height value was observed in pH 4.0 on the pH range 2.0–8.0 using Britton-Robinson (B-R) buffer solution (Figure 1b). A slope of 0.57 was obtained by the variation of scan rate and the plot of $\log i$ vs $\log \nu$ (Figure 1c), which characterizes a diffusional process. The proposed GCE/Pd@Au/Nf shows as a promising electrochemical sensor for the determination of 4-NA.

Figure 1. (a) Cyclic voltammograms of different electrode architectures in Britton-Robinson (B-R) buffer solution 0.1 mol L⁻¹ (pH 4) and $\nu = 50$ mV s⁻¹; (b) Cyclic voltammograms for 1.96 $\mu\text{mol L}^{-1}$ of 4-NA at GCE/Pd@Au/Nf with different pH values in 0.1 mol L⁻¹ B-R buffer solution in $\nu = 50$ mV s⁻¹; (c) Cyclic voltammograms for 1.96 $\mu\text{mol L}^{-1}$ of 4-NA using GCE/Pd@Au/Nf applying different scan rates from 10 to 200 mV s⁻¹ in 0.1 mol L⁻¹ B-R buffer solution (pH 4). Inset: Plot of $\log i$ versus $\log \nu$.



[1] F. Laghrib; *et. al* J. Electroanal. Chem. 823, 26–31, 2018.

[2] R. Pfeifer *et. al* Monatshefte für Chemie. 147, 111–118, 2016.

[3] Elias, W. C. Síntese e Caracterização de Nanocubos de Pd e Pd@In: Investigação da Sensibilidade à Estrutura e Composição em Reações de Homoacoplamento C-C do tipo Suzuki e Redução de Nitrato. Doctoral Thesis. UFSC, Florianópolis, Brazil, 2017.

Oxirredução – um desafio sem a experimentação.

Patrícia D. Carvalho (IC),¹ Antônio L. Soares Jr (FM).^{2*}

alsoaresjr@cefetmg.br

¹ Curso de Química, UEMG – Campus Divinópolis; ² Departamento de Formação Geral, CEFET-MG – Campus Araxá.

Palavras Chave: Experimentos, Ensino médio, Desafios na Aprendizagem, Oxidação, Redução, Redox.

Highlights

Oxirreduction – a challenge without experimentation

The relevance of experimentation as a facilitating methodology in the oxirreduction topic in chemistry classes. Results analysis shown that after the experimentation intervention, the students begin to use more appropriate chemical terms. Experimental activity assists in the student learning.

Resumo/Abstract

A química é por fundamento uma ciência experimental, na qual transformações da matéria são investigadas. Suart *et al.* (2010) destacam que o ensino de química aliado a experimentação é considerada por muitos professores uma ferramenta capaz de motivar e obter melhores resultados sobre o conhecimento da ciência química por parte dos alunos.

É investigado neste trabalho a relevância da experimentação como metodologia facilitadora no ensino de química no conteúdo de oxirredução, considerado de difícil ensino e aprendizagem. A oxirredução permite várias abordagens contextualizadas, e para este trabalho foi utilizado o tema corrosão. É um tema que está associado ao cotidiano dos alunos e vários aspectos são discutidos dentro do tópico. Dois questionários foram aplicados para coleta de dados, um no início (MOMENTO 1) e outro no final (MOMENTO 3) da intervenção investigativa. A turma foi dividida em nove grupos, com três ou quatro alunos (MOMENTO 2). Quatro grupos tiveram aula experimental no Laboratório (I-L a IV-L, *conjunto 1*) e cinco tiveram aula teórica de quadro e giz em Sala (I-S a V-S, *conjunto 2*). Como ilustrado no esquema ao lado.

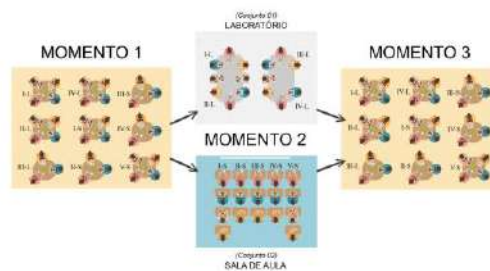


Figura 1: Esquema de divisão da sala de aula e método de investigação adotado.

No laboratório foram propostos dois experimentos simples, experimento 1 e 2, onde, respectivamente, os metais cobre e ferro sofreram corrosão. Baseado no tema corrosão, os processos de oxirredução foram trabalhados com os alunos e foi percebida uma compreensão satisfatória dentro de uma aula de intervenção. Respostas mais coerentes com a linguagem química, principalmente dentro dos grupos do *conjunto 1*, mostraram que uma abordagem que trabalhe experimentos que ajudem o aluno a extrapolar o micro ao macroscópico e vice-versa é importante. Sendo esses alunos capazes de entenderem e explicarem os problemas contextualizados, do dia a dia dentro do tema investigado. As aulas teóricas também são tão importantes quanto as experimentais, visto que em uma das questões apenas um dos grupos do *conjunto 2* conseguiu responder a questão mais conteudista do questionário final.

Desta forma, como auxílio às aulas teóricas, a experimentação é confirmada como uma metodologia de ensino eficaz. Ideias essas enfatizadas por Souza *et al.* (2009) e corroborada por outros autores. Com as experimentação é criado um ambiente no qual os alunos são estimulados a refletirem, criarem hipóteses... levando-os a construir o próprio conhecimento.

SOUZA, F. L.; AKAHOSHI, L. H.; MARCONDES, M. E. R.; CARMO, M. P. **Atividades experimentais investigativas no ensino de química**. GEPEQ-Grupo de Pesquisa em Educação Química. Instituto de Química. Universidade de São Paulo. São Paulo, 2009.
SUART, R. C. *et al.* **A estratégia "Laboratório Aberto" para a construção do conceito de temperatura de ebulição e a manifestação de habilidades cognitivas**. Química Nova na Escola. vol. 32, nº 3, agosto 2010.

Agradecimentos/Acknowledgments

Gratos a Secretaria Estadual da Educação do Município de Divinópolis e aos servidores da escola estadual na qual a pesquisa foi realizada.

Área: EDU

Nº de Inscrição: 01050

O cientista e suas características segundo as representações de estudantes do ensino médio

Iohana S. Santarelli¹ (IC), Catarina D. Pereira¹ (PQ), Karine P. Naidek¹ (PQ), Brenno R. M.¹ (PQ)*iohana_santarelli@hotmail.com; brenno.oliveira@udesc.br¹Departamento de Química, UDESC.

Palavras Chave: Química, Estereótipo, Representação, Imagens.

Highlights

The scientist and his characteristics according to the representations of high school students. Student conceptions about scientists. Representations with drawings.

Resumo/Abstract

A Ciência pode ser entendida como uma atividade humana bastante complexa, construída de forma coletiva e histórica, que pode sofrer influência de (e influenciar) aspectos sociais, tecnológicos e culturais. De um modo geral, as pessoas associam a figura do cientista e o seu ambiente de trabalho a um estereótipo criado pela mídia, que pode distorcer a realidade (REIS E GALVÃO, 2004). O programa de extensão “Cientifi-CIDADE: Popularizando a Ciência e Universidade”, da Universidade do Estado de Santa Catarina, tem como um de seus objetivos desmistificar assuntos cotidianos sob a perspectiva da Química, bem como divulgar o espaço da universidade, seus projetos e demais atividades. Em 2018, o Cientifi-CIDADE participou de um evento que recebeu estudantes de ensino médio de várias instituições. Nesse evento, foi realizada uma intervenção com 10 estudantes (entre 15 e 18 anos), solicitando que representassem com desenhos como imaginavam um cientista da área de Química. Neste trabalho, discutiremos as principais ideias que emergiram dos dados coletados. Algumas das representações podem ser vistas na Figura 1.

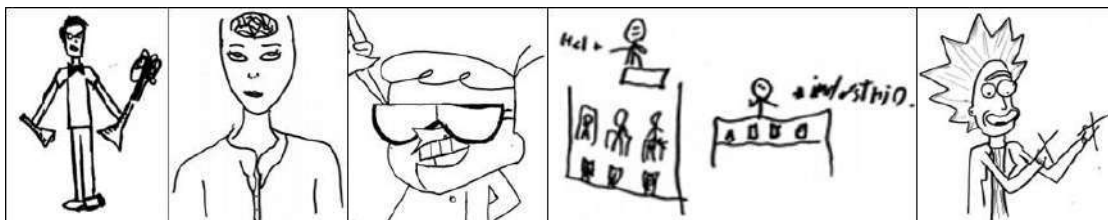


Figura 1: Representações dos estudantes sobre um cientista

Foi verificado que 70% representaram figuras masculinas; 50% também desenharam instrumentos de laboratório (erlenmeyer, balão, etc); 30% representaram alusões à personagens (Rick e Dexter); 30% fizeram relação ao exercício do pensamento ou do surgimento de ideias; 40% representaram o cientista usando óculos; 10% representaram o cientista também em uma sala de aula com alunos. No geral, os desenhos caracterizam uma figura masculina, que atua principalmente nos laboratórios, em companhia apenas de seus instrumentos de trabalho. Alguns aspectos caricatos foram observados, como os cabelos despenteados, ou a relação com personagens de desenhos animados. Diante disso, infere-se que algumas das ideias reforçam um estereótipo que nem sempre condiz com a realidade, pois desconsidera aspectos humanos, sociais, culturais, entre outros. Depois dessa pesquisa, o Cientifi-CIDADE deu início a série de vídeos “Hoje conheci um cientista” (Facebook: @Cientificidade.cct.UDESC) em que por meio de uma entrevista descontraída busca-se divulgar os trabalhos dos professores do Departamento de Química da UDESC, trazendo também um pouco da trajetória e outros aspectos que humanizam a figura do cientista. Futuramente serão realizados novos estudos comparativos para verificar a contribuição dessa iniciativa.

REIS, P.; GALVÃO, C. Socio-Scientific Controversies and Students' Conceptions about Scientists. *International Journal of Science Education*, 26(13), 1621-1633, 2004.

Agradecimentos/Acknowledgments

À Pró-Reitoria de Extensão, Cultura e Comunidade da Universidade do Estado de Santa Catarina.

Área: QVE

Nº de Inscrição: 01051

Um olhar em produções acadêmicas sobre práticas de ensino da Química Verde

Erica Dayane Souza Dias (PG)*¹, Carlos Alberto Marques (PQ)².

ericadqi@hotmail.com

¹ Pós-graduação em Educação Científica e Tecnológica, UFSC; ² Departamento de Metodologia de Ensino, UFSC.

Palavras Chave: Química Verde, Ensino da Química Verde, Sustentabilidade Ambiental.

Highlights

Look at academic productions about Green Chemistry teaching practices. We investigate 21 papers about Green Chemistry education in the Journal of Chemical Education in 2018, highlighting the types of teaching practices known as Green Chemistry.

Resumo/Abstract

No âmbito de uma pesquisa de doutoramento foram mapeadas produções científicas envolvendo o ensino da Química Verde (QV) publicadas em 2018 no principal jornal internacional de educação química, o *Journal of Chemical Education* (JCEd). A análise de conteúdo dos artigos, por meio de categorias a priori, visou evidenciar quais são os tipos de práticas que estão sendo denominadas como QV. Dos 21 trabalhos publicados e analisados, percebeu-se um avanço nas seis propostas dirigidas ao ensino superior, promotoras do ensino da QV. Em um destes trabalhos, os autores¹ apresentam um curso online para alunos de graduação (Quadro 1), onde articulam de modo abrangente diversas dimensões técnicas, metodológicas e relacionais da QV, a exemplo da ligação com a sustentabilidade. Com base nos artigos analisados, foi possível perceber que tem havido um avanço e notáveis mudanças nas propostas de ensino voltadas à QV

que, anteriormente, tinham uma preocupação geral mais dirigidas a conscientizar a comunidade de químicos – sem a devida ênfase em apresentar propostas de como a QV deveria ser ensinada. Nos artigos analisados se relatam e discutem os resultados, erros, acertos e sugestões de como a QV se insere no ensino da química.

Quadro 1: Detalhes do artigo destacado.

| | |
|---------------------|---|
| Foco do artigo | QV e Sustentabilidade |
| Objetivos do artigo | Educação nos fundamentos da QV (história, métricas, metodologias), oportunidade de aplicar o que aprendeu a um público. |
| Público alvo | Estudantes que tenham maior probabilidade de aplicar conceitos de QV em suas futuras carreiras. |

Fonte: Os autores.

Agradecimentos/Acknowledgments

À CAPES, pela bolsa de doutoramento.

Referências

1 Haley, R. A.; et al. *J. Chem. Educ.* 2018, 95, 560–569.

Área: ANA

Nº de Inscrição: 01052

Thermal analysis and quantitative characterization of compatibility between clotrimazole and itraconazole for microemulsion development for a new treatment of sporotrichosis

Patricia G. Ferreira (PG),¹ Carolina G.S. Lima,¹ Letícia L. Noronha (IC),¹ Marcela C. Moraes (PQ),¹ Fernando C. Silva (PQ),¹ Alessandra L. Viçosa (PQ),² Débora O. Futuro (PQ),³ Vitor F. Ferreira (PQ).^{3*}

patricia.pharma@yahoo.com.br; vitorferreira@id.uff.br

¹Departamento de Química, UFF; ²Farmanguinhos, FIOCRUZ; ³Departamento de Tecnologia Farmacêutica, UFF

Keywords: Microemulsion, Antifungals, Compatibility, Validation, Sporotrichosis

Highlights

A microemulsion with clotrimazole and itraconazole was prepared. Compatibility and stability studies were carried out through an HPLC-DAD method. The results evidence some interactions between the drugs in specific conditions.

Resumo/Abstract

Sporotrichosis occurs worldwide and is an importance disease in Brazil caused by the fungus *Sporothrix brasiliensis*. This agent has a high zoonotic potential, which is transmitted mainly by bites and scratch from infected felines. A new association between the drugs clotrimazole and itraconazole proved to be effective against *S. brasiliensis* yeasts. Microemulsion formulation in combination dosage forms of clotrimazole and itraconazole were prepared using a microemulsified system that contains benzyl alcohol as oil, Tween® 60 and propylene glycol as surfactant and cosurfactant respectively and, water. Thermal analysis and quantitative characterization were done to evaluate the compatibility between clotrimazole and itraconazole in a preformulation study. The techniques employed were differential scanning calorimetry (DSC) and thermogravimetric (TG). It was also developed a validate, simple and efficient analytical method able to detect simultaneously clotrimazole and itraconazole in microemulsion. The high-performance liquid chromatography-ultraviolet detection (HPLC-UV) was used for separation and quantification at 200 nm with a Fortis C₁₈ column (150 x 4.6 mm, 5.0 µm), injection volume of 20 µL, and a constant temperature of 25 °C. The mobile phase consisted of acetonitrile: phosphate buffer (60:40, v/v) and pH adjusted to 8.0 with ammonium hydroxide 1 M, at a flow rate of 1.0 mL/min. The extraction and analytical determination were validated by conventional procedures and proved to be efficient, robust and reproducible for both components of the microemulsion. The results evidence some interactions between clotrimazole and itraconazole under influence of high temperatures and, by the contact time between the drugs at lower temperature (40 °C).

References:

- 1- Rozental, S. et al., *J. Med. Microbiol.* **2017**, 66, 1573-1580.
- 2- de Camargo ZP. et al., *PLoS Pathog.* **2016**, 12.

Agradecimentos/Acknowledgments

CAPES, FAPERJ, CNPq and FIOCRUZ

Área: MAT

Nº de Inscrição: 01053

Surface Silanization of Graphene Oxide and Multi-walled Carbon Nanotubes with 3-aminopropyl triethoxysilane

Tiago Serodre^{1*}(PG), Norma A. P. Oliveira¹(IC), Max P. Ferreira¹(PQ), Adelina P. Santos¹(PQ), Valdirene G. Resende²(PQ), Clascídia A. Furtado¹

clas@cdtn.br; tms@cdtn.br

¹Centro de Desenvolvimento da Tecnologia Nuclear – CDTN/CNEN; ²Vale SA

Palavras Chave: *Graphene oxide, Carbon nanotubes, Organosilanes, Surface modification,*

Highlights

Commercial graphene oxide and multi-walled carbon nanotubes were silanized using 3-aminopropyl triethoxysilane in low concentrations yielding covalently surface modified nanomaterials.

Resumo/Abstract

Carbon nanomaterials including graphene oxide and nanotubes have remarkable physical-chemical properties, and have found application in diverse fields, among which is their use as reinforcement in polymeric materials, creating nanocomposites with improved mechanical strength and thermal and electrical properties.[1], [2]

The functionalization of these nanomaterials is a technique commonly used to improve their interaction with the polymeric matrix, and to promote the mechanical reinforcement effect, by modifying and introducing new functional groups to the surface of the nanomaterials. Graphene oxide functionalized with 3-aminopropyl triethoxysilane (APTES), for example, has been shown to improve significantly the mechanical performance of epoxy polymers[3]. However, organosilanes such as APTES may self-condense depending on the reaction conditions, and encapsulate the nanomaterials in a silica-like layer which can impair its properties by hiding its low-dimensionality. In this work we functionalized commercial graphene oxide and carboxyl-containing multi-walled carbon nanotubes with dilute APTES under mild reaction conditions, aiming to preserve the morphology and low dimension characteristics of both the nanomaterials by restricting the modification to their surface, and avoiding the self-condensation of the APTES. The materials obtained were characterized by X-ray photoelectron spectroscopy, infrared spectroscopy and electronic microscopy, and the superficial and covalent nature of the functionalization was evidenced.

- [1] T. Kuilla, S. Bhadra, D. Yao, N. H. Kim, S. Bose, and J. H. Lee, "Recent advances in graphene based polymer composites," *Prog. Polym. Sci.*, vol. 35, no. 11, pp. 1350–1375, Nov. 2010.
- [2] F. V. Ferreira, L. D. S. Cividanes, F. S. Brito, B. R. C. de Menezes, W. Franceschi, E. A. Nunes Simonetti, and G. P. Thim, "Functionalizing Graphene and Carbon Nanotubes," pp. 1–89, 2016.
- [3] S. Z. Haeri, B. Ramezanzadeh, and M. Asghari, "A novel fabrication of a high performance SiO₂-graphene oxide (GO) nanohybrids: Characterization of thermal properties of epoxy nanocomposites filled with SiO₂-GO nanohybrids," *J. Colloid Interface Sci.*, vol. 493, pp. 111–122, 2017.

Agradecimentos/Acknowledgments

This work was supported by the Brazilian Nanocarbon Institute, the SisNano/MCTIC Program, the Brazilian agencies CNPq, CAPES, FAPEMIG and CNEN. The authors would like to thank the UFMG Microscopy Centre team for the electronic microscopy images, the Nanostructured Soft Materials Laboratory at LNNano/CNPEM for XPS measurements, and Dr Pedro Lana from CDTN for valuable XPS discussion.

Área: INO

Nº de Inscrição: 01054

(Inserir o número de inscrição do autor que fez a submissão)

Hydrothermal reactions of alkaline earth metal salts with benzophenone-3,3',4,4'-tetracarboxylic acid

Élvio A. de Campos* (PQ)¹, Sílvia D. de Campos (PQ)¹, Djéssica J. Welzel (IC)¹, Érica F. Poruczinski (PG)¹, Paula Brandão (PQ)².

ericaporuczinski@outlook.com; elvio.campos@unioeste.br.

¹Centro de Engenharias e Ciências Exatas, Universidade Estadual do Oeste do Paraná – Unioeste, Campus Toledo;

²CICECO – Aveiro Institute of Materials, Universidade de Aveiro – UA.

Palavras Chave: Hydrothermal Synthesis, Coordination Polymers, s-Block Metal Organic Framework.

Highlights

Novel coordination polymers of alkaline earth metals.
Similar formulae, but arrangements with greater C. N. as higher the ionic radius.
Conductivity of Sr₄(bptc)₂(H₂O)₄ increased up to 55 °C.

Resumo/Abstract

Synthesis of metalo-organic structures or coordination polymers is considered a challenge due to several parameters that influence them. In order to understand the importance of pH, metal:ligand stoichiometry and metal ion type on formation of solid structures, forty-eight synthetic procedures were performed using hydrothermal method, in which 20 mL of aqueous 1 x 10⁻³ mol L⁻¹ 3,3',4,4'-Benzophenone-tetracarboxylic acid (bptc) was used as ligand at 170 °C. The metal:ligand ratios were 1:1, 1:2 and 2:1 and the metal ions Mg²⁺, Ca²⁺ and Sr²⁺ in pH 3, 4 and 5. Despite the various procedures performed, none of those using Mg²⁺ ion resulted in crystalline compounds. For the Ca²⁺ ions, a crystalline compound was obtained using the molar ratio 1:1 at pH 4 after two weeks of slowly solvent evaporation. The Sr²⁺ and Ba²⁺ form crystalline compounds during the hydrothermal reaction at all pH range and molar ratios evaluated, but the best one was at pH 5 and 2:1 molar ratio. The information about the solved structures of the solids is presented in Table 1.

Table1: Crystalline solids from hydrothermal synthesis at 170 °C.

| Molecular formula | System | Space group | C. N. | Unit cell volume (Å ³) | Ion radii (Å) ¹ |
|---|------------|---------------------|---------|------------------------------------|----------------------------|
| Ca(bptc)(H ₂ O) ₃ .H ₂ O | triclinic | P-1 | 8 | 938.3 | 1.12 - 1.26 |
| Sr ₄ (bptc) ₂ (H ₂ O) ₄ | monoclinic | P 2 ₁ /c | 8 and 9 | 3475.3 | 1.26 - 1.45 |
| Ba ₄ (bptc) ₂ (H ₂ O) ₄ | triclinic | P-1 | 10 | 798.7 | 1.52 - 1.66 |

The ionic radius of magnesium is less than 0.86 Å, which is likely hindering stabilization of any crystalline solid with the ligand bptc. The calcium compound is formed by one-dimensional layer that extend in the three dimensions by means of hydrogen bonds with free water molecules located between the layers. The structure of the product with Sr²⁺ is a three-dimensional arrangement, which extends into two distinct layers of strontium interconnected by the ligand, with one layer having strontium in coordination number 8 and, the other 9. In addition, the different coordination environments imply the existence of four distinct sites occupied by Sr²⁺. This arrangement contributes to the lower density of these compounds compared to the others synthesized. The barium compound crystallizes with a three-dimensional arrangement with only one type of coordination number, and carboxylates can act as a bridge to two metal ions that contributes to form a more compact structure. The calcium compound loses water molecules below 100 °C and then stays thermally stable until 290 °C when it decomposes successively to calcium oxalate, carbonate and oxide². The strontium compound loses reversely all water molecules at 138 °C and remains thermally stable until 450 °C to decompose to the respective oxalate (500 °C), carbonate (650 °C) and oxide (above 800 °C)³. The thermal stability of the barium compound is similar to that of the strontium compound. Measurements of electrochemical impedance spectroscopy showed that the strontium compound conducts when in moisture greater than 90% and the conductivity increased up to 55 °C, with the activation energy of the conduction process of 0.192 eV.

1 - R. D. Shannon, *Acta Crystallographica* (1976) A32, pp. 751-767.

2 –D. Bahloul-Hourlier, *Journal of Thermal Analysis and Calorimetry* (2018), doi.org/10.1007/s10973-018-7888-1.

3 - F. A. Al-Newaiser, A. Al-Thabaiti, A. O. Al-Youbi, A. Y. Obaid, M. A. Gabal, *Chem. Pap.* (2007) 61, pp. 370-375.

Estudo das propriedades ópticas de Hidróxidos Duplos Lamelares dopados com íon európio e intercalados com ânion tungstato

Víctor Eduardo Barbosa (IC),¹ Marian Rosaly Davolos (PQ),² João Henrique S. Romero (PQ),¹.

victoreduprof@hotmail.com

¹IFSP – Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia – Catanduva – SP, Brasil - Av. Pastor José Dutra de Moraes, 239 – Distrito Industrial Antônio Zúcaro, ²Unesp – Univ Estadual Paulista, Campus de Araraquara, Instituto de Química, Laboratório de Materiais Luminescentes – SP, Brasil.

Palavras Chave: *Luminescence, Europium, Doping, LDH.*

Highlights

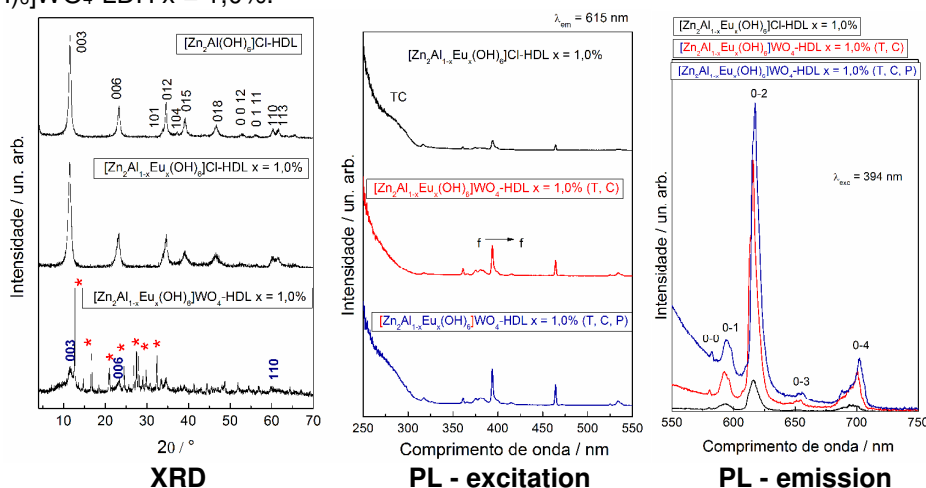
Title: Study of Layered Double Hydroxides' optical properties doped to Eu^{3+} and intercalated into tungstate anion.

- ✓ Synthesis of luminescent Layered Double Hydroxides (LDH) by doping to Europium;
- ✓ Increase of the luminescence by intercalating tungstate anion, which can transfer energy.

Abstract

Layered Double Hydroxides (LDH) are solid and synthetic compounds that can be doped to other ions, such as, for example, the Eu^{3+} . It's also possible to intercalate anionic species into the interlayer domain, leading to the electroneutrality of the compound. The generic formula of a LDH can be represented as M(II)/M(III)-A , being M(II) a divalent cation, M(III) a trivalent cation and A^n being the intercalated anion¹. The aim of this research was to synthesize three different systems by co-precipitation method and compare the structural and luminescent properties. The results indicate the anion tungstate is not intercalated according to diffraction patterns (Figure 1 – XRD), even though there was an emission increase from the presence of WO_4^{2-} , because this anion is a sensitizer and transfers energy to the activator ion, Eu^{3+} (Figure 1 – PL). The WO_4^{2-} intercalation/coordination increases the luminescence intensity of the doped LDH because it decreases the -OH groups, luminescence suppressors by multi-phonon process.

Figure 1 – XRD patterns and PL spectra of $[\text{Zn}_2\text{Al}(\text{OH})_6]\text{Cl-LDH}$, $[\text{Zn}_2\text{Al}_{1-x}\text{Eu}_x(\text{OH})_6]\text{Cl-LDH}$ $x = 1,0\%$ and $[\text{Zn}_2\text{Al}_{1-x}\text{Eu}_x(\text{OH})_6]\text{WO}_4\text{-LDH}$ $x = 1,0\%$.



¹ DJEBBI, M. A.; BRAIEK, M.; NAMOUR, P.; AMARA, A. B. H.; JAFFREZIC-RENAULT, N. Layered double hydroxide materials coated carbon electrode: New challenge to future electrochemical power devices, **Applied Surface Science**, v. 386, p. 352-363, 2016.

Acknowledgments

This research was supported by PIBIFSP. JHSR would like to thank the IQ-UNESP for XRD and PL facilities.

Área: EDU

Nº de Inscrição: 01056

Um dia no IFSP Catanduva: projeto de extensão articulado a formação inicial de licenciandos em Química

Paulo Gabriel de Lima (IC),^{1*} Víctor Eduardo Barbosa (IC),¹ João Henrique S. Romero (PQ),¹joahsromero@ifsp.edu.br; paulogabrielgood@outlook.com¹IFSP – Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia – Catanduva – SP, Brasil - Av. Pastor José Dutra de Moraes, 239 – Distrito Industrial Antônio Zácara.Palavras Chave: *Extension Project, Chemistry, High School.*

Highlights

Title: A day at IFSP Catanduva: extension project articulated the initial training for teachers of Chemistry.

- ✓ Extension project - A day at IFSP Catanduva; Extension project corroborates with the initial training of the students;
- ✓ Extension project as the first teaching experience in a classroom.

Abstract

A articulação entre ensino, pesquisa e extensão é um desafio, mas importante para se atingir a práxis e uma aprendizagem significativa. O projeto de extensão (PEX) “Um dia no IFSP Catanduva”, teve início a partir de um entrave, ou seja, aumentar o número de matriculados no curso de Licenciatura em Química e também diminuir o número de evasão do curso. Participaram da equipe 12 discentes (1 bolsista e 11 voluntários) do referido curso e um professor. Os envolvidos escolheram a divulgação científica como estratégia na divulgação das atividades do curso e durante o ano letivo de 2018 foram atendidos 420 alunos de ensino médio das escolas públicas. Inicialmente foram preparados vários experimentos relacionados ao currículo das escolas estaduais de São Paulo. Dentre todos os experimentos realizados foram escolhidos e desenvolvidos 6 experimentos com base nas sugestões dos professores das escolas estaduais participantes. Também se elaborou uma palestra com informações do curso de Química e do IFSP. Ao final de cada visita aplicou-se um questionário com o objetivo de investigar se os visitantes interessam por Química, se pretendem prosseguir os estudos no nível superior e se já conheciam o IFSP. Além disso, foi realizada uma entrevista com os 11 licenciandos voluntários do projeto, afim de considerar o impacto do projeto de extensão na formação inicial de professores durante o processo. As entrevistas foram conduzidas pelo licenciando bolsista. Tendo em vista os questionários respondidos pelos 11 licenciandos voluntários através da entrevista, notou-se elementos importantes do impacto do PEX na formação dos mesmos. Sobre a contribuição do PEX na formação inicial de professores e, as habilidades que os mesmos poderiam adquirir atuando no projeto, os discentes relataram a vivência em âmbito da sala de aula e a práxis, neste sentido, entendida como a materialização do conhecimento capaz de promover a transformação social¹ e disseram que puderem desenvolver habilidades importantes como, a reflexão sobre a própria prática do professor e a aproximação entre os próprios licenciandos. Com relação ao que motivou os mesmos a participarem do PEX, os discentes ponderaram o cuidado em adequar os conhecimentos para a melhor compreensão dos alunos e promoção da alfabetização científica em química, a promoção do primeiro contato com um projeto e a sala de aula, assim como o aprofundamento dos conhecimentos e horas de atividades teórico e prática (ATP). A divulgação como estratégia por meio da experimentação entre os discentes gerou um estudo interessante, pois, os mesmos destacam a ação nucleadora na formação inicial², que promove articulação entre os conhecimentos teóricos e práticos afim de benefícios da aprendizagem, assim fixando-a como a materialização do conhecimento capaz de induzir transformações sociais no âmbito da educação atual e em sala de aula.

1 SILVA, K. C. M. O.; MESQUITA, N. A. S. Práxis e Identidade Docente: Entrelaces no Contexto da Formação pela Pesquisa na Licenciatura em Química. **Química Nova na Escola**, v. 40, n. 1, p. 44-52, 2018.
2 LÔBO, S. F. O trabalho experimental no ensino de química. **Química Nova**, v. 35, n. 2, p. 430-434, 2012.

Acknowledgments

The authors would like to thank the IFSP Catanduva.

Degradação eletroquímica do corante amarantho utilizando um anodo de diamante dopado com boro em reator em fluxo

Gabriel A. Pinto (IC), Naihara Wachter (PG), Romeu C. Rocha-Filho (PQ).*

gabriel.antoniopinto@hotmail.com; romeu@ufscar.br

Departamento de Química, Universidade Federal de São Carlos, C.P. 676, 13560-970 São Carlos – SP, Brasil

Palavras Chave: Degradação eletroquímica, Corante sintético, Amarantho, Diamante dopado com boro, Radicais hidroxila.

Highlights

Electrochemical degradation of the amaranth dye using a boron-doped diamond anode in a flow reactor. The oxidation of the dye is mediated by electrogenerated hydroxyl radicals. The optimized experimental conditions (pH = 10, 25 °C, 8 mA cm⁻², 7 L min⁻¹) led to high removal levels of the organic load.

Resumo

O amarantho é um corante sintético, utilizado principalmente pela indústria alimentícia, que, de acordo com alguns estudos, possui potencial carcinogênico e mutagênico. Corantes, bem como fármacos, pesticidas e perturbadores endócrinos, não são completamente removidos pelos métodos convencionais das estações de tratamento de esgoto. A oxidação eletroquímica é um método alternativo bastante promissor, que permite a completa mineralização de compostos orgânicos, convertendo-os a CO₂, H₂O e sais inorgânicos¹. Para anodos de alto poder oxidante, como o diamante dopado com boro (DDB), baseia-se na oxidação da molécula por radicais hidroxila eletrogerados na superfície do anodo. Neste sentido, o objetivo deste trabalho foi estudar a degradação eletroquímica de amarantho utilizando um anodo de DDB (100 ppm de boro), avaliando-se a influência das variáveis pH, vazão (q_v) e densidade de corrente (j), enquanto que a temperatura ($\theta = 25$ °C) e o volume de solução ($V = 0,5$ L) foram mantidos constantes.

Os experimentos foram realizados utilizando solução de amarantho 100 mg L⁻¹ em Na₂SO₄ 0,1 mol L⁻¹, em um sistema em fluxo, com um reator tipo filtro-prensa. A eficiência do processo foi acompanhada usando-se um espectrofotômetro UV/Vis ($\lambda = 520$ nm) e um analisador de carbono orgânico total (COT). Antes de cada experimento foi realizado um pré-tratamento anódico para limpeza superficial do anodo de DDB, utilizando solução de Na₂SO₄ 0,1 mol L⁻¹ e $j = 20$ mA cm⁻², durante 20 min. Inicialmente foi estudada a influência do pH (3, 7, 10, e sem controle), mantendo-se q_v (7 L min⁻¹) e j (20 mA cm⁻²) constantes. Observou-se que o decaimento da absorbância relativa ($A_{rel} = A_t / A_{t=0}$) e do COT relativo ($COT_{rel} = COT_t / COT_{t=0}$) em função do tempo de eletrólise foi

mais acentuado para pH = 10, sendo obtida remoção completa do amarantho em 180 min e de 80% do COT em 300 min. Este valor de pH foi mantido para os experimentos subsequentes. A seguir, estudou-se três vazões diferentes (3, 5 e 7 L min⁻¹) mantendo-se constantes o pH e j (20 mA cm⁻²). Neste caso, observou-se que as diferentes vazões não afetaram as taxas de remoção do amarantho, embora a maior vazão promovesse uma redução mais rápida do COT ($\approx 80\%$, após 300 min); provavelmente isso ocorreu porque em condições de maior vazão o transporte das moléculas do amarantho e seus intermediários de oxidação à superfície do eletrodo é maximizado (maior transporte de massa) – essa vazão foi utilizada nos demais experimentos. Em seguida, estudou-se o efeito de j (8, 20, 50 e 80 mA cm⁻²), mantendo-se constantes o pH e q_v . Como pode ser depreendido da Fig. 1, para a remoção de 75% do COT, foram necessários 1,7 A h L⁻¹ e 10,6 A h L⁻¹ quando se aplicou j de 8 mA cm⁻² e 80 mA cm⁻², respectivamente. Portanto, o tratamento realizado utilizando o menor valor de j é menos custoso em termos energéticos, embora demande 90 min extras para se obter a mesma remoção de COT.

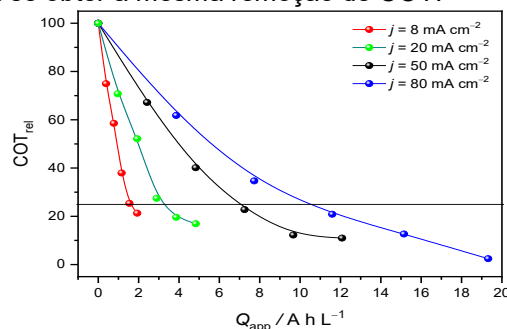


Figura 1 – Curvas de decaimento do COT relativo em função da carga elétrica aplicada por unidade de volume de solução obtidas para diferentes densidades de corrente (indicadas na figura). Condições experimentais: $\theta = 25$ °C, pH = 10 e $q_v = 7$ L min⁻¹.

Agradecimentos

Ao Laboratório de Pesquisas em Eletroquímica (LaPE), e ao Programa de Educação Tutorial (PET) de Química da UFSCar pela bolsa concedida.

¹ H. Särkkä, A. Bhatnagar e M. Sillanpää. *J. Electroanal. Chem.* 754 (2015,) 46–56.

Mechanochemical synthesis of 2-amino-1,4-naphthoquinones

Igor Sande de Santana (IC),¹ Talita Santana Nascimento (IC),¹ Sabrina Martinez (PQ),² Silvio Cunha (PQ).^{1,2}

igorsande@gmail.com; silviodd@gmail.com

¹Instituto de Química, Universidade Federal da Bahia, Campus de Ondina, 40170-115, Salvador – BA.

²INCT de Energia e Ambiente, UFBA, 40170-290 Salvador, BA, Brazil.

Key words: 1,4-Naphthoquinones, mechanochemistry, green chemistry.

Highlights

2-Amino-1,4-naphthoquinones were synthesized in reasonable yields under solvent-free mechanochemical conditions from anilines, 1,4-naphthoquinone using sodium acetate and SiO₂ as grinding auxiliary.

Resumo/Abstract

The synthesis of 2-amino-1,4-naphthoquinones is well-known under Bronsted³ or Lewis² catalysis, however, practical solvent-free synthesis is not described. In this work we developed the mechanochemical synthesis of such compounds under solvent-free condition and using traditional inorganic bases. To this end, 0.5 equiv of K₂CO₃, NaHCO₃ and NaOAc were evaluated in the presence of silica as solid grinding auxiliary in the reaction of 1,4-naphthoquinone and aniline, Table 1. NaOAc afforded the better yield with aniline, and was used with other aromatic amines also, but now using twice the amount of base, and yields were improved.

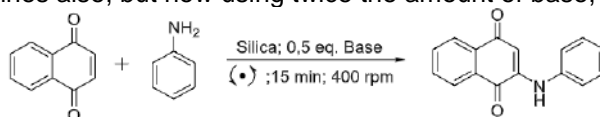
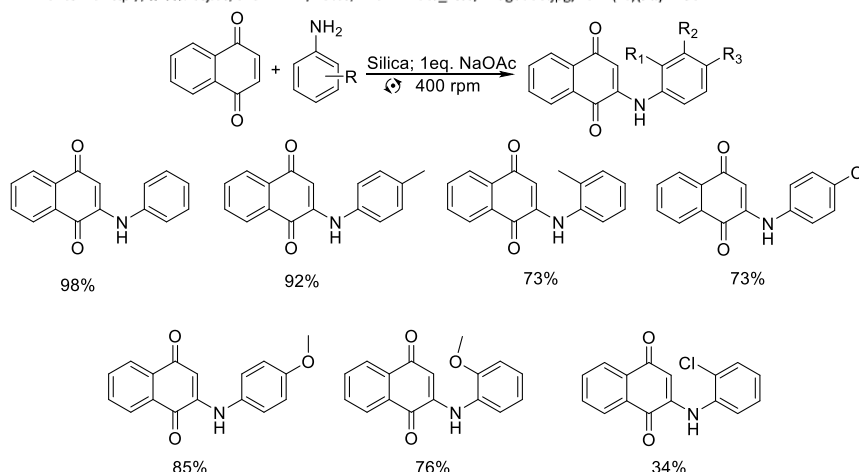


Table 1. Effect of different bases in the reaction of 1,4-naphthoquinone and aniline.

| | K ₂ CO ₃ | NaHCO ₃ | NaOAc.3H ₂ O | Without Base |
|------------------------------|--------------------------------|--------------------|-------------------------|--------------|
| pK _b ¹ | 3.678 | 7.619 | 9.252 | – |
| PF(°C) ² | 192.3-193.5 | 190.1-191.5 | 192.1-192.9 | 186.7-187.7 |
| Yield (%) | 73 | 76 | 84 | 77 |

Fonte: 1. http://www.fccj.us/chem1212/notes/12Ch17FCCJ_files/image006.jpg; 2. PF(°C)(lit.) : 190-1



Agradecimentos/Acknowledgments

FAPESB, CNPQ.

Referências:

- http://www.fccj.us/chem1212/notes/12Ch17FCCJ_files/image006.jpg. Acessado em 08/11/18.
 - Lisboa, C. S.; Santos, V. G.; Vaz, B. G.; de Lucas, N. C.; Eberlin, M. N.; Garden, S. J.; *J. Org. Chem.* **2011**, 76, 5264.
 - Couladouros, E. A.; Plyta, Z. F.; Haroutounian, S. A.; Papageorgiou, V. P.; *J. Org. Chem.* **1997**, 62, 6.
- 42ª Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química: Eixos Mobilizadores em Química

Área: EDU

Nº de Inscrição: 01060

Análise de softwares de edição para a produção de videoaulas no projeto “Química na Palma da Mão”

Marcos J. C. Silva (IC),² João B. de Medeiros (PQ),² Edson A. Duarte (PQ),¹ Larissa Q. Martins (IC),² Daltamir J. Maia (PQ).^{1*}

marcos.costa98@ifspcapivari.com.br, daltamir.maia@gmail.com

¹Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia de São Paulo Campus Campinas; ²Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia de São Paulo Campus Capivari

Palavras Chave: Ferramentas digitais, Editores de vídeo gratuitos, Ensino de Química, Produção de videoaulas.

Highlights

Analysis of softwares of editing for the production of vídeo-lessons in the project "Química na Palma da Mão". Study of the free alternatives for the video edition for the teaching of Chemistry. Analysis of the tools that can be used by high school teachers to produce vídeo lessons.

Resumo/Abstract

É crescente o interesse de pesquisadores em desenvolver e adaptar ferramentas pedagógicas que potencializem o aprendizado. No contexto de que os jovens possuem afinidade pelas novas tecnologias (SALVA, 2016), os autores do presente trabalho têm estudado, no âmbito do projeto de Iniciação Científica “Química na Palma da Mão”, recursos digitais com o objetivo de expandir o ambiente escolar e permitir que estudantes aprendam a partir do uso de Smartphones e em diferentes espaços. Um dos recursos utilizados no projeto é a produção de videoaulas de química. Buscando-se alternativas gratuitas para a edição dos vídeos, identificou-se e estudou-se as potencialidades de três softwares, que podem ser aplicados na produção de material digital de ensino de Química e de outras disciplinas. Estudou-se os editores gratuitos Videopad Free Video Editor (básico), Shotcut (intermediário) e Davinci Resolve (avançado). Os critérios analisados foram: interface, idioma de execução, função corte, manipulação da pista de áudio e plataformas suportadas. A metodologia de pesquisa seguiu os passos: seleção de editores gratuitos disponíveis, escolha de três amostras de editores (básico, intermediário e avançado) e análise das funcionalidades e aplicabilidade à produção de videoaulas. O editor Videopad Free Video Editor, possui interface relativamente simples, permite a manipulação ou substituição de faixa de áudio, possui a função de corte e é multiplataformas (Windows, Mac OS, Iphone, Ipad, Android e Kindle). No entanto, a ferramenta não está disponível em português. Com um pouco mais de recursos (exportação em ultra HD, chroma-key, desfoque, correção etc.), a ferramenta Shotcut pode ser apresentada como uma ferramenta intermediária. Notou-se que, embora esteja em português, a interface é pouco intuitiva. Permite a manipulação/edição do áudio, permite o corte do vídeo e manipulação da faixa cortada pela linha do tempo, funciona nas plataformas Windows, Mac OS e Linux. Por último, analisou-se a ferramenta Davinci Resolve. Ela pode ser considerada um editor profissional de vídeo, possuindo todos os recursos observados nos outros softwares analisados e outros recursos de edição profissional superando, em alguns aspectos de funcionalidades, editores pagos como o Sony Vegas. Concluiu-se que existem diversas alternativas gratuitas e de qualidade para edição de vídeos, sendo que, dentre as analisadas, destaca-se o VideoPad Free Video Editor, pelo fato de ser intuitivo, apresentar bons recursos e, principalmente, pela diversidade de plataformas aceitas. Com o estudo desenvolvido, busca-se indicar possibilidades a professores e estudantes que objetivam produzir materiais didáticos digitais e, assim, fortalecer a educação.

Referência: SALVA, Sueli. Culturas Juvenis, culturas digitais e Ensino Médio: quando o diálogo é necessário. **Revista Latino-Americana de Estudos em Cultura e Sociedade**. V. 02, Ed. especial p. 107-115.

Agradecimentos/Acknowledgments

Especial agradecimento ao CNPq pela bolsa de iniciação científica e ao IFSP pelo suporte infraestrutural.

Imidoyl-substituted sulfoxonium ylides as metal-carbene precursors in C-H functionalization reactions for the synthesis of indoles

Clarice Alves Dale Caiuby (PG),¹ Antonio Carlos Bender Burtoloso (PQ)^{1*}

clarice.caiuby@usp.br; antonio@iqsc.usp.br

¹ Department of Physical Chemistry, Chemistry Institute of São Carlos, USP, CEP 13563-120

Key words: Sulfoxonium ylides, Metal-carbene reactions, C-H functionalization, Azavinyl carbenes, *N*-Heterocycle synthesis.

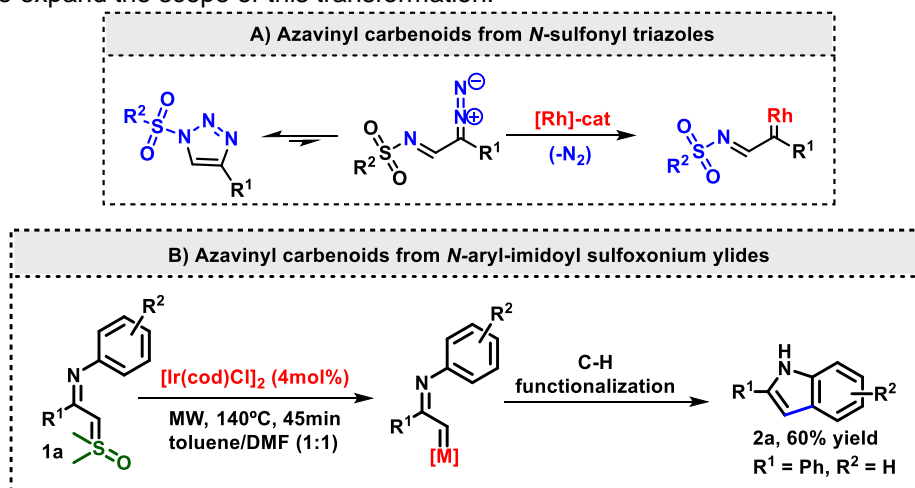
Highlights

A simple method for intramolecular C-H functionalization reactions was developed by employing *N*-aryl-imidoyl sulfoxonium ylides as precursors of azavinyl carbenoids to provide substituted indoles.

Abstract

Recently, transformations involving α -imino-carbenoids have been receiving significant attention in organic synthesis. This class of metal-carbene species can be accessed *in situ* from diazo imine compounds by means of the ring-chain tautomerization of 1-*N*-sulfonyl-1,2,3-triazoles (Scheme 1A). Once formed, these diazo imine compounds can be intercepted by rhodium complexes to generate highly reactive azavinyl metal-carbenes which can act as versatile intermediates for *N*-heterocycles synthesis.¹

Since sulfoxonium ylides can be efficiently employed as synthetic substitutes for diazo compounds as precursors of carbenoids, we visualize the possibility of employing *N*-aryl-imidoyl sulfoxonium ylides to generate azavinyl carbenes as an alternative to the use of *N*-sulfonyl triazoles (diazo precursor) (Scheme 1B).² In this first moment, this approach was applied in intramolecular C-H functionalization reactions catalyzed by transition metal complexes to provide substituted indoles. After a brief evaluation of reaction conditions and screening of catalysts and solvents, we accessed the desired product in 60% yield when the reaction was performed in the presence of [Ir(cod)Cl]₂ (4mol%) under microwave (MW) irradiation, 140°C for 45min in a mixture of solvents (toluene/DMF, 1:1). Further studies are in progress to improve the efficiency of this methodology and to expand the scope of this transformation.



Scheme 1. A) Azavinyl carbenes from diazoimine - *N*-sulfonyl triazoles.
 B) *N*-aryl-imidoyl sulfoxonium ylides as precursors of azavinyl carbenes to provide substituted indoles.

References: ¹ (a) Hockey, S. C.; Henderson, L. C. *Aust. J. Chem.* 68, 1796, 2015. (b) Chuprakov, S.; Kwok, S. W.; Fokin, V. V. *Aust. J. Chem.* 2015, 68, 1796–1800. (c) Hooneff, T.; Chuprakov, S.; Chernyak, N.; Gevorgyan, V.; Fokin, V. V. *J. Am. Chem. Soc.* 2008, 130, 14972–14974. (d) Grimster, N.; Zhang, L.; Fokin, V. V. *J. Am. Chem. Soc.* 2010, 132, 2510–2511. (e) Selander, N.; Worrell, B. T.; Chuprakov, S.; Velaparthi, S.; Fokin, V. V. *J. Am. Chem. Soc.* 2012, 134, 14670–14673. (f) Chuprakov, S.; Malik, J. A.; Zibinsky, M.; Fokin, V. V. *J. Am. Chem. Soc.* 2011, 133, 10352–10355. ² (a) Burtoloso, A. C. B.; Dias, R. M. P.; Leonarczyk, I. A. *Eur. J. Org. Chem.* 2013, 5005–5016. (b) Wu, X.; Sun, S.; Yu, J.-T.; Cheng, J. *Synlett*, 2018, 29, A-1. (c) Vaitla, J.; Bayer, A. *Synthesis*, 2018, 50, A - Q. (c) Hu, F.; Xia, Y.; Ma, C.; Zhang, Y.; Wang, J. *Chem. Commun.*, 2015, 51, 7986–7995.

Acknowledgments

We acknowledge FAPESP (2017/23837-4), CNPq and CAPES for financial support.

Área: MAT*(Inserir a sigla da seção científica para qual o resumo será submetido. Ex: ORG, BEA, CAT)***Nº de Inscrição: 01062***(Inserir o número de inscrição do autor que fez a submissão)*

Different Electrolyte Additives in the Efficiency Improvement of Dye-Sensitized Solar Cells

Larissa A. Santa-Cruz (PG)^{1,2}, Maria Zilda Oliveira (IC)¹, Thiago André Salgueiro Soares (PG)^{1,2}, Giovanna Machado (PQ)¹.

zilda_ma@hotmail.com; larissasantacruz@gmail.com

¹ Centro de Tecnologias Estratégicas do Nordeste (CETENE); ² Departamento de Ciência dos Materiais, CCEN/UFPE.

Key Words: DSSC, back reaction, electrolyte, IMPS/VS, Charge Extraction.

Highlights

Study about electrolyte additives that avoid the back reaction in the DSSC;
Fluorescence Additive;
Electrochemical measurements by JxV curve, EIS, IMPS/VS and Charge Extraction.

Resumo/Abstract

The Dye-Sensitized Solar Cells (DSSC), known by Gratzel solar cells, is a photoelectrochemical system that allows the conversion of solar energy into electrical energy, with low cost when they are compared to the silicon cells. Currently, the efficiency improvement of this type of solar cells depends on the back reaction rate, that is, the recombination of the electrons photogenerated by the dye sensitizer with the electrolyte. This study could characterized the effect of different types of electrolyte additives in the solar cells performance by electrochemical measurements of JxV curve, electrochemical impedance spectroscopy (EIS), IMPS/IMVS curves and Charge Extraction (CE) method. The both additives that were used showed interaction with the semiconductor film, which it could be associated to the observed changes in the V_{oc} . Furthermore, one of the additives used, named by BTDCVI and with fluorescence activity (IL2), increased photogenerated current, which can be the result of the increasing in the electron time transport and of the decreasing in the back reaction rate. The second additive studied, IL1, decreased the recombination due to the chain length of the additive that avoided the I_3^- from reaching the semiconductor surface and hence decreased the back reaction rate. Thus, our study concerns to improve the performance of the solar cells by the adaption of the electrolyte.

Referências

- [1] Michael Grätzel, Journal of Photochemistry and Photobiology C: Photochemistry Reviews, 4 (2003) 145–153.
- [2] Md. K. Nazeeruddin, Etienne Baranoff, Michael Gratzel, Solar Energy, 85 (2011) 1172–1178.
- [3] L.M. Peter, N.W. Duffy, R.L. Wang 1, K.G.U. Wijayantha, Journal of Electroanalytical Chemistry, 524–525 (2002) 127–136.

DEREPLICATION STUDY OF *Campuloclinium macrocephalum* BY UHPLC-HRMS AND MOLECULAR NETWORKING

Márcia Regina Pereira Cabral (PG),*¹ Carla Porto da Silva (PQ),² Maria Gabriele de M. Gonçalves (IC),¹ Marta Regina B. do Carmo (PQ),² Debora Cristina Baldoqui (PQ),¹ Maria Helena Sarragiotto (PQ)¹

marciaacabral@hotmail.com

¹Departamento de Química, UEM; ²Centro Universitário de Maringá, UNICESUMAR. ³Departamento de biologia UEPG
Palavras Chave: Molecular networking, sesquiterpene lactone, germacranolide

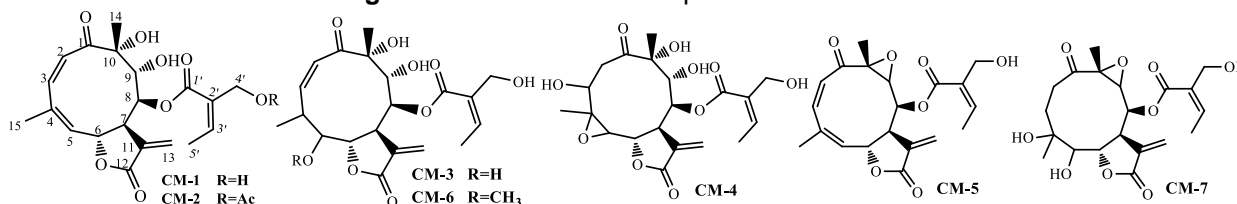
Highlights

Molecular network-driven fragmentation evaluation allowed a putative identification of five novel germacranolide-type sesquiterpene lactones (**CM-3** to **CM-7**) from dichloromethane fraction of *C. macrocephalum*.

Abstract

Campuloclinium macrocephalum (Less.) DC (synonymy *Eupatorium macrocephalum* Less.) belongs to the Asteraceae family, and is a perennial herb widely distributed in the New World, from Mexico to Argentina (Cabrera, A. L. 1974). This species is reported to be used in folk medicine as anti-inflammatory, sedative and in treatment of cardiac disease. The literature reports few studies concerning biological activity and chemical composition of *C. macrocephalum*. In our previous work, we isolated two novel sesquiterpene lactones (STLs) of germacranolide-type, named macrocephalide A and B (**CM-1** and **CM-2**) from *C. macrocephalum* aerial parts (Cabral et al., 2017). Due the chemical and biological importance of STLs, in the present work a dereplication study, using UHPLC-HRMS and molecular networking (MN), was carried out aiming to identify new STLs from *C. macrocephalum* fractions. For this, the dichloromethane fraction obtained from *C. macrocephalum* crude extract partition, and isolated compounds were analyzed using UHPLC-HRMS/MS (positive ion mode). The fragmentation data obtained were organized by molecular networking and subsequently dereplicated against mass spectra of the compounds **CM-1** and **CM-2** and natural products from Global Natural Products Social (GNPS) database (Bouslimani et al., 2014; Wang et al., 2016). Using the GNPS platform, the molecular network was generated from 891 parent ions visualized as nodes. Based on cosine similarity, the forming 28 clusters, among which one of them showed the presence of matches with the compounds **CM-1** and **CM-2**. In order to identify other STLs, the molecular network was visually inspected, showing that germacranolide skeleton compounds clustered in agreement with their fragment pattern similarities. The analysis of mass difference and MS/MS spectra allowed the identification of five new putative macrocephalide-like germacranolides (**CM-3** to **CM-7**) at m/z 453.1754 [$C_{22}H_{29}O_{10}$]⁺, m/z 469.1700 [$C_{22}H_{29}O_{11}$]⁺, m/z 375.1434 [$C_{20}H_{23}O_7$]⁺, m/z 425.1796 [$C_{21}H_{28}O_9$]⁺, and m/z 411.1646 [$C_{20}H_{24}O_8$]⁺. In summary, from the molecular network-driven fragmentation evaluation it was possible a putative identification of five novel germacranolide-type STLs (**CM-3** to **CM-7**) from dichloromethane fraction of *C. macrocephalum*.

Figure 01. Structures of compounds **CM-3** to **CM-7**.



Acknowledgments

The authors thank CAPES and CNPq for financial support.

References

- Cabrera, A. L. *Flora Ilustrada de Entre Rios*, 1974, 6, 106–540
 Cabral, M.R.P, Baldoqui, D. C, Costa, W. F, Carmo, M. R. B, Sarragiotto, M. H. Novel Sesquiterpene Lactones from *Eupatorium macrocephalum* Less (Asteraceae). 6 TH BCNP, Brazilian Conference on Natural Products, 2017
 Wang, M., Carver, J. J., Phelan, V. V., Sanchez, L. M., Garg, N., Peng, Y., Nguyen, D. D., Watrous, J., Kaponov, C. A., Luzzatto-Knaan, T. Sharing and community curation of mass spectrometry data with global natural products social molecular networking. *Nature Biotechnology*. 34: 828–837, 2016
 Bouslimani, A.; Sanchez, L. M.; Garg, N.; Dorrestein, P. C. *Nat. Prod. Rep.* 2014, 31, 718–729.

Genotypes evaluation of *C. sinensis* e *C. limonia* for micropropagation of resistant strains

Jéssica C. Amaral (PG)*,¹ Maria Fátima das G. F. da Silva (PQ),¹ João B. Fernandes (PQ),¹ Edieidia S. Pina,² Adriana A. Lopes,² Ana Maria S. Pereira².

jessica.camaral@yahoo.com.br

¹Departamento de Química, Universidade Federal de São Carlos, 13565-905 São Carlos - SP, Brazil; ²Departamento de Biotecnologia, Universidade de Ribeirão Preto, Av. Costábile Romano, 2201 - Ribeirânia, Ribeirão Preto – SP.

Palavras Chave: *C. sinensis*, *C. limonia*, xanthyletin, seselin, HPLC-UV, micropopagation.

Highlights

HPLC-UV method was developed for quantifying pyranocoumarins in *C. sinensis* and *C. limonia*. The genotypes LP144 and LC214 showed as a potential resistant strains for micropopagation.

Abstract

Citrus is a culture widespread throughout the Brazil, having great economic and social importance for several Brazilian states. For phytosanitary control, the use of pesticides contributes to increasing agricultural yield, but has also been responsible for adverse effects on the environment and human health. Today, with the advancement of the agroecological agriculture, new means to control pests and diseases presented highlight, as the search for plants and rootstocks resistant and therefore less susceptible to pathogen attack. Pyranocoumarins are a sub-group of 1500 natural coumarins mainly found in four families of higher plants: Apiaceae, Rutaceae, Fabaceae and Moraceae and appear as major compounds in citrus roots. They are compounds used by the citrus as a defense mechanism against *Xylella fastidiosa* and *Candidatus liberibacter*. The objective of this study was the quantification of pyranocoumarins: xanthyletin and seselin in Pêra orange and Cravo lemon roots by HPLC-UV, for determining a genotype with higher production of these compounds. Among the evaluated plants, the genotype of Pêra orange LP 144 and Cravo lemon LC 214 presented piranocoumarins as major substances, producing 21.49 and 55.52 $\mu\text{g}\cdot\text{mL}^{-1}$ respectively, while the genotypes of lower production LP 107 and LC 217 have 6.80 and 14.72 $\mu\text{g}\cdot\text{mL}^{-1}$ of these substances in the roots. Therefore, a significant decrease in the production of pyranocoumarins between genotypes of both species was observed, with production being 216.03% lower in LP 107 compared to LP 144 and 277.17% lower in LC 217 compared to LC 214. Thus the genotypes LP 144 and LC 214 were selected as more resistant strains for micropropagation. It was also possible to verify a difference in the production of pyranocoumarins between the two species evaluated. In Cravo lemon (*C. limonia*) the production of these compounds was 158.35% greater than in Pêra orange.

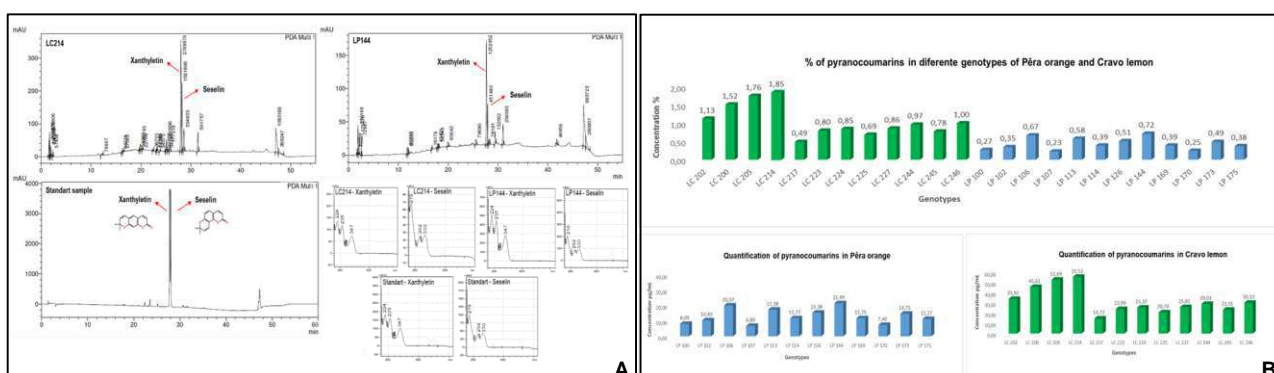


Figure 1: A) Pyranocoumarins quantification in different genotypes of Pêra orange and Cravo lemon by HPLC-UV. **B)** Graph representing the concentration of pyranocoumarins in citrus roots.

Acknowledgments

CNPq (465357/2014-8), FAPESP (2014/509187; 2012/25299-6), FAPESP-GlaxoSmithKline (2014/50249-8), CAPES (88887.136357/2017-00).

Synergistic effect of ruthenium complexes on the hydrogenation of 4-nitrophenol catalyzed by gold nanoparticles

Matheus H. O. Pessoa (IC),^{1*} Luís R. Dinelli (PQ),¹ André L. Bogado (PQ).¹

bogado@ufu.br; matheushenriqueop@gmail.com

¹Universidade Federal de Uberlândia – Instituto de Ciências Exatas e Naturais do Pontal – ICENP/UFU

Key words: Gold Nanoparticles, Ruthenium complexes, Hydrogenation, Homogeneous catalysis, Kinetic, Nitrophenol.

Highlights

The kinetic parameters of the hydrogenation reaction of the 4-nitrophenol catalyzed by AuNPsⁿ⁻ was determined. The k_{obs} (s^{-1}) increased 50% when the complex $[\text{RuCl}(\text{dppb})(\text{bipy})(\text{py})]^+$ was added.

Resumo/Abstract

Herein was studied the influence of cationic ruthenium complexes (Ru^+) on the reduction reaction of 4-nitrophenol (4-NP) by sodium borohydride (NaBH_4) catalyzed by gold nanoparticles (AuNPs^{n-}) to produce 4-aminophenol (4-AP). The values of observed rate constant (k_{obs}) and the half-life time ($t_{1/2}$) of the reduction reaction were determined using a pseudo-first order rate law in relation to the 4-nitrophenolate concentration. The influence of the temperature on the rate constant was determined using the Arrhenius equation, which provided the activation energy $E_a = 172 \text{ kJ mol}^{-1}$ and the pre-exponential factor $A = 6.6 \times 10^{26} \text{ s}^{-1}$ without Ru^+ . The Eyring equation was used to provide the activation enthalpy variation $\Delta H^\ddagger = 170 \text{ kJ mol}^{-1}$ and activation entropy variation $\Delta S^\ddagger = 260 \text{ J K}^{-1} \text{ mol}^{-1}$, showing that the reduction reaction of the 4-NP is highly entropic process in the presence of NaBH_4 as reducing agent and AuNPs^{n-} as catalytic species. Additionally, the interaction process of Ru^+ with AuNPs^{n-} to produce aggregates, which was labeled herein such as $n\text{Ru}^+/\text{AuNPs}^{n-}$, was investigated using three different models: the Langmuir isotherm (direct plot); Scatchard model and Benesi-Hildebrand model. These models provide thermodynamic parameters such as the dissociation constant (K_d), formation constant (K_f) and Hill coefficient (n). These $n\text{Ru}^+/\text{AuNPs}^{n-}$ specimen were then applied as catalysts in the 4-NP reduction reaction, where the k_{obs} were determined and compared to the values found in the catalytic reaction for AuNPs^{n-} without ruthenium complexes. A synergistic effect was observed when the complex $[\text{RuCl}(\text{dppb})(\text{bipy})(\text{py})]^+$ was added after 400 s of the started reaction, increasing 50 % the k_{obs} , from $2.4 \times 10^{-3} \text{ s}^{-1}$ to $3.6 \times 10^{-3} \text{ s}^{-1}$.

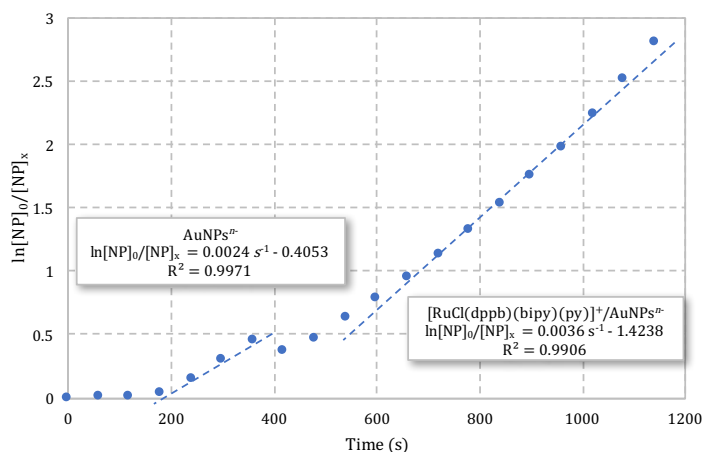


Fig 1: Rate law for the reduction of 4-NP by NaBH_4 in the presence of AuNPs^{n-} and $[\text{RuCl}(\text{dppb})(\text{bipy})(\text{py})]^+$ added after 400 s of the started reaction.

Agradecimentos/Acknowledgments



Hydrothermal synthesis of reduced graphene oxide aerogel for energy storage applications.

Thiago Cipriano (PQ), Susana Chauque (PQ), Vitor L. Martins(PQ), Marcelo A. de Andrade (IC), Gabriel A. Candido (IC), Roberto M. Torresi (PQ)*

thiagoc@iq.usp.br; rtorresi@iq.usp.br

Departamento de Química Fundamental, Instituto de Química, Universidade de São Paulo, Brazil

Keywords: batteries, reduced graphene oxide, physical and chemical confinement.

Highlights

This work intends to develop a free-standing and binder-free graphene aerogel/sponge, a promising candidate anode material for ion batteries with high energy storage.

Abstract

In order to improve the energy density and specific capacitance of graphene materials a graphene aerogel was prepared via hydrothermal synthesis. The graphene aerogel are considered an attractive anode candidates for ion batteries because of their good electrical conductivity (7.4 S m^{-1}), environmental friendly, low cost, and stable chemical and physical properties¹. This material can be easily fabricated by heating a uniform aqueous dispersion (fig.1 A) of graphene oxide (2 mg mL^{-1}) sealed in Teflon-lined autoclaves at 180 C for 12 h. The formation of 3D porous (fig.1 B) structures is mainly due to the partial overlapping or coalescing of flexible graphene sheets through $\pi-\pi$ stacking. During the hydrothermal process, many of interest ions can be used in battery applications could interact with reduced GO through noncovalent bonds, such as $\pi-\pi$ interactions formed in an aromatic structure and between the ions and residual oxygen groups of reduced GO. The next step will be the development of a methodology to introduce the ions of interest into the pores of the material. Three-dimensional structured graphene with open channels allows free and fast sodium ion intercalation/de-intercalation, nitrogen (nitrogen doping is believed to increase the electric conductivity by lowering the semiconducting gap, increase the electroactive property of material²) and as an effective host of sulfur in lithium-sulfur batteries. Preliminary results obtained using the BET technique indicate that the sponge material of graphene has an approximate area of $285 \text{ m}^2 \text{ g}^{-1}$. By employing a self-supported graphene electrode without binders, the preliminary results as-prepared symmetric capacitor achieved a high specific capacitance approx 400 F g^{-1} , 1 A g^{-1} , we estimate a rate capability in order to 70% retention at 20 A g^{-1} and a cycling stability order to 80%, 10 000 cycles, 10 A g^{-1} . This strategy provides a promising route to cheap and renewable capacitors and batteries there is still huge room for further developments to improve the energy storage capability.

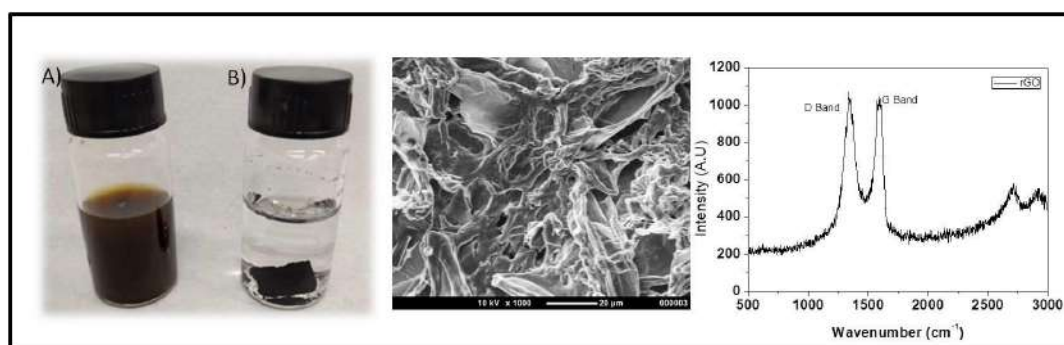


Figure 1: left A-graphene oxide solution, B – Graphene oxide sponge/aerogel, central – S.E.M for graphene aerogel, Right – RAMAN spectrum of graphene aerogel.

Acknowledgments

FAPESP grant nos. 2015/26308-7 - 2017/11784-3, CNPq and CAPES.

- 1- *J. Mater. Chem. A*, 2017, 5, 20643–20650.
- 2- *Nature SCIENTIFIC Reports*, 2017, 7, 4886.

Determination of midazolam in beverages samples: comparison between electrochemical oxidation and reduction processes.

Raquel G. Rocha* (PG),¹ Weberson Pereira da Silva (PG),¹ Mario H. P. Santana (PQ),² Rodrigo A. A. Muñoz (PQ),¹ Eduardo M. Richter (PQ),¹

raquel_rocha1793@hotmail.com;

¹Federal University of Uberlândia, UFU; ² Technical and Scientific Unit - Regional Superintendence of Brazilian Federal Police in Minas Gerais

Palavras Chave: electrochemical mechanism; forensic chemistry; BDD electrode; on-site analysis.

Highlights

Determination of midazolam in beverages samples: comparison between electrochemical oxidation and reduction processes. The electrochemical oxidation of midazolam was studied for the first time. An oxidation mechanism was proposed using theoretical and experimental studies. The analytical characteristics obtained by both reduction and oxidation processes were compared.

Resumo/Abstract

Midazolam (MID) is a benzodiazepine used as a sedative drug which can be added in beverage samples as drug-facilitated-sexual assault. In this work, we described a simple, portable and low-cost method for fast screening and selective determination of MID in beverages samples (vodka, whiskey and red wine). The use of electrochemical reduction for the determination of MID has been shown previously. In this work, the electrochemical oxidation of MID was used for this purpose for the first time and an electrochemical mechanism was proposed using experimental results and theoretical calculations. According to the obtained results, the oxidation process involves the transfer of one-electron and one-proton. Differential-pulse voltammetry (DPV), boron-doped diamond electrode (BDD), and Britton-Robinson (BR) buffer (pH = 2) were selected as electrochemical analysis technique, working electrode and supporting electrolyte, respectively. The performance (linear response range, LOD, LOQ) of the oxidation process for determination of MID was compared with the results obtained using the reduction peak. Table 1 shows the analytical characteristics obtained with both electrochemical processes.

Table 1 – Comparison between analytical characteristics using DPV for the MID oxidation and reduction process.

| Analytical characteristics | Oxidation peak | Reduction peak |
|---|----------------|-----------------|
| R | 0.998/0.999 | 0.994/0.992 |
| Slope / $\mu\text{A L } \mu\text{mol}^{-1}$ | 0.1941/0.066 | -7.76/-3.64 |
| Linear response / $\mu\text{mol L}^{-1}$ | 1-11/15-50 | 0.05-1/1.25-3.0 |
| LOD / $\mu\text{mol L}^{-1}$ | 0.07 | 0.01 |
| LOQ / $\mu\text{mol L}^{-1}$ | 0.24 | 0.03 |
| Repeatability (n=10) / % | 3.5* | 8.0†/6.6‡ |

*10 $\mu\text{mol L}^{-1}$, †0.05 $\mu\text{mol L}^{-1}$ e ‡1 $\mu\text{mol L}^{-1}$ of MID.

The selectivity for the detection of MID was available in the presence of different benzodiazepines also commonly used as date-rape drugs (clonazepam (CLO), diazepam (DIA), and flunitrazepam (FLU)). As can be observed in Figure 1a, these molecules are also reduced in the same potential region of MID. However, none of these molecules present an oxidation peak in the anodic region (Fig. 1b). Therefore, MID can be selectively detected in the presence of the other tested benzodiazepine molecules if the oxidation process is used

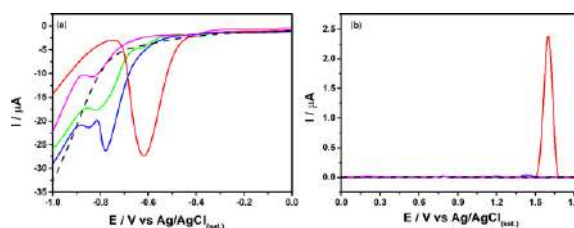


Figure 1 – (a) DPVs of 10 $\mu\text{mol L}^{-1}$ of CLO (—), MID (—) and FLU (—) and 100 $\mu\text{mol L}^{-1}$ of DIA (—) in the cathodic region. (b) DPVs of 100 $\mu\text{mol L}^{-1}$ of all compounds (FLU, CLO, DIA and MID) in the anodic region. DPV parameters: a = 70 mV ΔE_s = 5 mV and t_m = 25 ms.

Agradecimentos/Acknowledgments

Fapemig, Capes, CNPQ and IQ-UFU.

Classification of omega-3 supplements using near infrared spectroscopy (NIRS) and principal components analysis

Jamille Carvalho de Souza (IC),¹ Maria do Carmo Hespanhol (PQ),^{1*} Celio Pasquini (PQ).²

souza.jamillecarvalho@gmail.com; [*mcarmohespanhol@gmail.com](mailto:mcarmohespanhol@gmail.com)

¹Departamento de Química, UFV; ²Departamento de Química Analítica, Instituto de Química, UNICAMP

Omega-3 supplements, Near-infrared Spectroscopy, Quality control, Principal Component Analysis (PCA)

Highlights

- Commercial omega-3 supplements are classified using multivariate analysis of NIR spectra.
- PCA of NIR spectra of omega-3 supplements revealed quality control problems.

Resumo/Abstract

Omega-3 supplements are specified according with the amount of eicosapentaenoic acid, EPA, 20 carbons long, with 5 double bonds, and docosahexaenoic acid, DHA, 22 carbons long, with 6 double bonds. The principal raw material used in supplements is fish oil. A number of trading brands is commercially available due to the benefic effects to health associated with the protection against all sorts of diseases, including breast cancer, depression, attention deficit hyperactivity disorder (ADHD), as well as various inflammatory diseases. Therefore, fast, acting at the point-of-interest, analytical control of the quality of these supplements is necessary.

This work evaluates the near infrared spectroscopy (NIRS) as a source of analytical information to help monitoring commercial omega-3 supplements qualitatively.

A low cost (~US\$ 1.000,00) portable NIR instrument (Texas – NanoNIR) operating in the 900 – 1700 nm spectral range was employed to obtain the absorption spectra of 51 commercial supplements acquired in local pharmacies. The contents of the soft-gel capsules were removed and transferred to a transfectance cell. In addition, 18 samples of vegetable oils were measured. The spectral data set was treated using the second derivative (Savitzky-Golay, 11 points, 2nd degree polynomial) and submitted to a principal component analysis (PCA), using the chemometric software Unscrambler v.10.5. Examples of the raw spectra are shown in Fig. 1. The arrows point to the main wavelengths associated with the ratio of double/single bond in the acid molecule.

The distribution of the samples scores is shown in Fig. 2. Two main groups of samples are observed and associated to purified/concentrated fish oil (a), usually containing higher amounts of EPA+DHA, and raw fish oil (b). Class (b) could be further divided in two other subclasses. However, the cause for this subdivision could not be surely identified yet. A sample of brown linseed oil, knowing to contain a high content of unsaturated acids, was detected close to the subgroup in (b). Three commercial supplements were grouped among pure vegetable oils samples (c). This is a worrying fact as these products have a high probability of being faked.

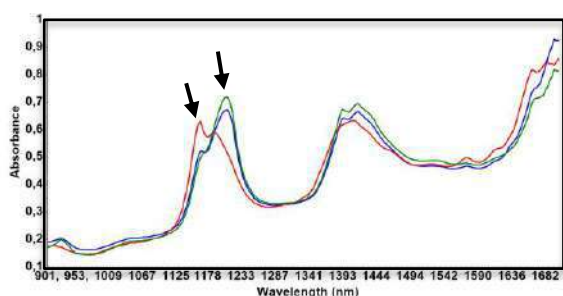


Fig. 1. Representative raw NIR spectra. Red, purified fish oil; blue, fish oil; green, sunflower vegetable oil.

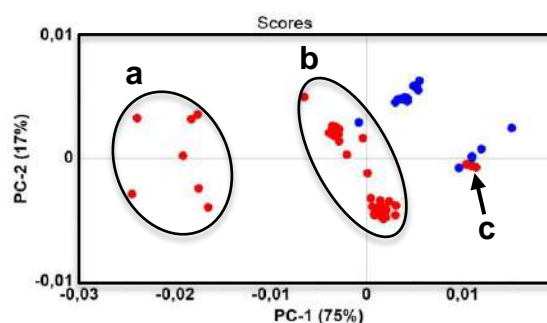


Fig. 2. Scores of PCA distribution for the NIR spectra set. Red, omega-3 supplements. blue, vegetable oils.

In conclusion, the use of a low cost NIR instrument and simple chemometric treatment of the spectra of omega-3 supplements show great potential to screening the quality of commercial products, including in field, at the point of commercialization.

Agradecimentos/Acknowledgments

National Institute of Advanced Analytical Science and Technology (INCTAA), CNPq proc. 465768/2014-8, FAPESP 2014/50951-4. JCS is grateful to CNPq for the scientific initiation fellowship (proc. 103448/2018-7).

A new strategy for the synthesis of non-symmetrical naphthoquinones and their cytotoxic effect over PC3 prostate cancer cells

Ruan Carlos B. Ribeiro (PG),¹ Paula P. de Freitas (PG),³ Caroline S. Moreira (PG),¹ Matheus G. de Moraes (IC),¹ Fernando de C. da Silva (PQ),¹ David R. Rocha (PQ),¹ Etel R.P. Gimba (PQ),^{2,3} Vitor F. Ferreira (PQ).¹

ruancarlos@id.uff.br; ruancarlos@id.uff.br

¹Instituto de Química, UFF; ²Instituto Nacional de Câncer, INCA, ³Departamento de Ciências da Natureza, Instituto de Humanidades e Saúde, UFF

Palavras Chave: 3,3'-alkylmethylenes, Non-Symmetrical Bis(2-hydroxynaphthalene-1,4-dione), Lawsone, Mannich Adduct, Quinone Methide.

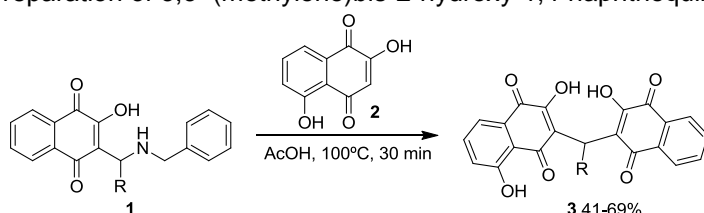
Highlights

A novel method of synthesis of non-symmetrical 3,3'-(aryl/alkyl-methylene)bis-2-hydroxy-1,4-naphthoquinones was developed using Mannich adduct of naphthoquinone and their reaction with another moiety of 2-hydroxy-1,4-naphthoquinone. This new method produces for the first time non-symmetrical 3,3'-(aryl/alkyl-methylene)bis-2-hydroxy-1,4-naphthoquinones. In a preliminary study, these compounds were evaluated regarding their effect over on the viability of PC3 metastatic prostate cancer cells using MTT assays at 100 μ M. Three out of these compounds presented relevant cytotoxic effect at 72 h post-treatment.

Resumo/Abstract

The current literature has pointed that the usual method for the synthesis of these bis-2,5-diene-2,6-diol compounds is the domino Knoevenagel condensation of an enol with aldehydes, followed by a Michael reaction conducted with different acid catalysts.¹ Up to now, there are no efficient methods for the preparation of 3,3'-(methylene)bis-2-hydroxy-1,4-naphthoquinones with different naphthoquinones.^{2,3} A novel

method for the synthesis of non-symmetrical 3,3'-(aryl/alkyl-methylene) bis-2-hydroxy-1,4-naphthoquinones was developed, which was used to prepare the compounds 3a-i in moderate to good yields (Scheme 1).



Scheme 1. Synthetic route used for the preparations of naphthoquinone 3a-i derivatives

Preliminary screening of these compounds regarding their effects over PC3 metastatic prostate cancer cell viability by MTT assays at 100 μ M revealed that three compounds present promising activities over this cancer

cell line.

1. Luana da Silva M. Forezi, Roberta K.F. Marra, Fernando de Carvalho da Silva, Vitor F. Ferreira; Synthetic Strategies for Obtaining Xanthenes; *Current Organic Synthesis*, 2017, 14, 929-951.
2. Tisseh, Z.N.; Bazgir, A. An efficient, clean synthesis of 3,3'-(arylmethylene)bis(2-hydroxynaphthalene-1,4-dione) derivatives. *Dyes Pigm.* 2009, 83, 258-261.
3. Goutam Brahmachari; Sulfamic Acid-Catalyzed One-Pot Room Temperature Synthesis of Biologically Relevant Bis-Lawsone Derivatives; *ACS Sustainable Chem. Eng.* 2015, 3, 2058-2066.

Agradecimentos/Acknowledgments

CAPES, CNPq, FAPERJ and FIOCRUZ.

Área: ANA*(Inserir a sigla da seção científica para qual o resumo será submetido. Ex: ORG, BEA, CAT)***Nº de Inscrição: 01070***(Inserir o número de inscrição do autor que fez a submissão)*

Especação química de bio-óleos de pirólise branda da torta das sementes de frutas tropicais brasileiras

***Vanessa O. Nunes (PG)¹, Raquel V. S. Silva (PQ)¹, *Débora A. Azevedo (PQ)¹**

vanessaonunes90@gmail.com; debora@iq.ufrj.br

¹Universidade Federal do Rio de Janeiro, Instituto de Química, Ilha do Fundão, Rio de Janeiro, RJ

Palavras Chave: Bio-óleo, Pirólise branda, GC×GC-TOFMS, Orbitrap MS, Frutas tropicais brasileiras.

Highlights

Chemical speciation of slow pyrolysis bio-oils from Brazilian tropical seed cake fruits.

Bio-oil as a feedstock for the future of biofuels.

Comprehensive chemical characterization using HRMS.

Hydrocarbons, phenols, carboxylic acids and amides as the major classes in the bio-oils.

Resumo/Abstract

A biomassa tem sido considerada uma fonte renovável de energia com grande potencial devido ao aumento das necessidades energéticas da sociedade moderna e o desejo de substituir as fontes de energia atuais por fontes de energia limpa e sustentável [1]. Bio-óleos podem substituir o óleo combustível em muitas aplicações e atuar como fonte alternativa de insumos químicos [2]. A caracterização química detalhada dos bio-óleos de pirólise branda foi realizada por cromatografia gasosa bidimensional abrangente acoplada à espectrometria de massas por tempo de voo (GC×GC-TOFMS) e por espectrometria de massas de alta resolução do tipo Orbitrap com fonte de ionização por eletrospray nos modos positivo e negativo (ESI(±)-Orbitrap MS), visando a identificação tentativa das substâncias presentes nas amostras, estudando as estruturas das classes químicas principais e mais abundantes. Para os bio-óleos da torta das sementes de graviola (TSG) e bocaiuva (TSB), foram detectados e identificados 414 e 222 analitos, respectivamente. Na análise semi-quantitativa, os valores de área relativa destacaram as classes dos fenóis, derivados fenólicos e hidrocarbonetos para o bio-óleo da TSG, e a classe de ácidos carboxílicos e amidas para o bio-óleo da TSB. A ESI(±)-Orbitrap MS possibilitou a identificação das substâncias mais polares. Compostos nitrogenados foram detectados em maior número nos bio-óleos, no modo positivo e a classe dos ácidos carboxílicos foi identificada em ambas as amostras no modo negativo. A integração das técnicas de alta resolução se mostrou fundamental para uma elucidação abrangente e complementar da composição química dos bio-óleos.

[1] Tessarolo, N.S. *et al.*, J. Anal. Appl. Pyrol., 2016, 117, 257–267.

[2] Silva, R. V. S. *et al.*, Talanta, 2017, 164, 626 - 635.

Agradecimentos/Acknowledgments

Os autores agradecem a Capes, CNPq e FAPERJ pelo financiamento do projeto e as empresas Biodivér e Extrair Óleos Naturais pelas biomassas cedidas.

Vinyl-1,2,4-oxadiazoles Behave as Nucleophilic Partners in Morita-Baylis-Hillman Reactions

Fábio S. Fernandes (PQ)^{*,1}, Manoel T. Rodrigues Jr. (PQ)¹, Lucas A. Zeoly (PG)¹, Caroline Conti (IC)¹, Célio F.F. Angolinie (PQ)², Marcos Nogueira Eberlin (PQ), Fernando Coelho (PQ)¹

fernandes.fabiodesouza@gmail.com;

Institute of Chemistry, Laboratorio de Síntese de Produtos Naturais e Fármacos;² Institute of Chemistry, Laboratório ThoMson de Espectrometria de Massas, University of Campinas, P.O. Box 6154, Campinas, Sao Paulo 13083-970, Brazil

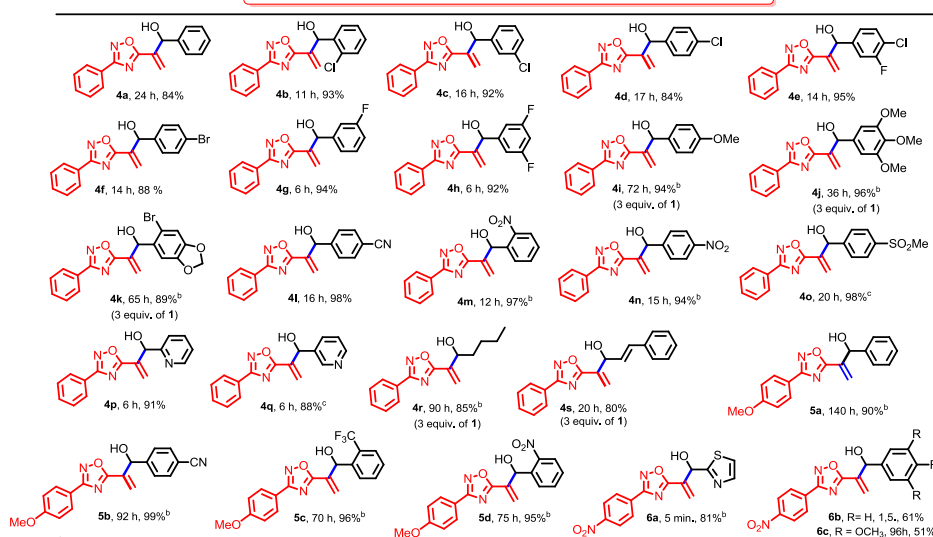
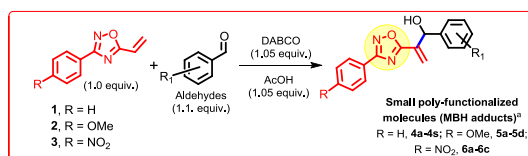
Key words: Vinyl-1,2,4-oxadiazoles, New nucleophilic partner, Morita-Baylis-Hillman reaction.

Highlights

We describe the performance of vinyl-oxadiazoles as a new and efficient nucleophilic partner for the MBH reaction creating a new class of heterocyclic MBH adducts with potential biological activity.

Resumo/Abstract

The MBH reaction is a sustainable transformation which provides polyfunctionalized molecules.¹ To add a heterocyclic scaffold that would act as a new nucleophilic MBH partner instead of acrylates open the possibility of new class of MBH adducts still unexplored. Because of behavior as Michael acceptor of 5-vinyl-1,2,4-oxadiazole,² we were encourage to use it in MBH reaction. Like this, we started our study with optimization of reaction where the system vinyl-1,2,4-oxadiazole/aldehyde/DABCO/AcOH (1:1.1:1.05:1.05) in absence of solvent at r.t showed more efficient. With this protocol in hands we investigated the scope of this new transformation using a wide range of aldehydes and vinyl-1,2,4-oxadiazoles. See our publication to more details.³



^b The reaction was made in ultrasound bath.

¹ Shi, M.; Wang, F. -J.; Zhao, M. -X.; Wei, Y. *RSC Publishing, Cambridge, UK*, **2011**. ² Burns, A. R.; Kerr, J. H.; Kerr, W. J.; Passmore, J.; Paterson, L. C.; Watson, A. J. B. *Org. Biomol. Chem.* **2010**, *8*, 2777–2783. ³ Fernandes, F. S.; Jr Trindade, M. J.; Zeoly, L. A.; Conti, C.; Angolinie, C. F. F.; Eberlin, M. N.; Coelho, F. *J. Org. Chem.* **2018**, *83*, 15118-15127.

Agradecimentos/Acknowledgments

We thank FAPESP (grant 2016/23005-6), for scholarships and financial support.

Two Novel Bioinspired Zinc(2+) Complexes With a Long-Chain Polypyridine Ligand And Their DNA Interactions Studies

Gustavo Wander Streit (IC),^{1*} Marcelo Melotti (PG),¹ Fernando Roberto Xavier (PQ),¹

gustavo_wander1@hotmail.com;

¹Laboratório de Síntese e Catálise -SINCA, Departamento de Química, Centro de Ciências Tecnológicas, Universidade do Estado de Santa Catarina – UDESC, Rua Paulo Malschitzky, s/n. Joinville-SC, Brazil

Keywords: Nucleic acids; Zinc(2+) metal complexes; Binding constants (K_b).

Highlights

A novel polypyridyl ligand containing a long alkyl-chain was prepared and characterized as well as their two zinc(2+) coordination compounds. DNA interaction tests between them and salmon DNA samples were carried out and binding constants (K_b) were calculated.

Resumo/Abstract

The synthesis of coordination compounds that can selectively interact with specific sites of the structure of DNA are already known.[1] In this sense, metal complexes containing aromatic groups and electronic delocalization may exhibit improvements in these interactions.[2] Zinc can be considered an excellent candidate to improve the efficiency in medical treatment as it is an essential element for growth and development in all life forms. [3] Thus, we present in this work a novel bioinspired ligand and their two zinc(2+) complexes as a viable option for DNA interaction studies. Ligand L^{C10} was synthesized and characterized by NMR, IR and ESI-MS. Both complexes were prepared in methanol by mixing L^{C10} ligand and zinc chloride/perchlorate with a proper stoichiometry in order to obtain **1** and **2**, respectively (Figure 1).

These complexes were characterized by molar conductometry, ESI-MS, IR, and UV-Visible spectroscopy. Preliminary spectrophotometric studies of them towards salmon sperm DNA (ssDNA) were carried out at pH 7.0 (HEPES/ACN 50% v/v) and the intrinsic binding constant K_b (**1**) $5,804 \times 10^3$ (**2**) $2,308 \times 10^3$ were determined for both compounds. Upon the incremental addition of ssDNA, the ILCT-bands (π - π^* transitions) into **1** and **2**, both complexes exhibited significant hypochromism around 260 nm suggesting both complexes could interact with DNA via partial intercalation and groove binding through the strong stacking between the aromatic chromophores (pyridine rings) and the base pairs of salmon sperm DNA.

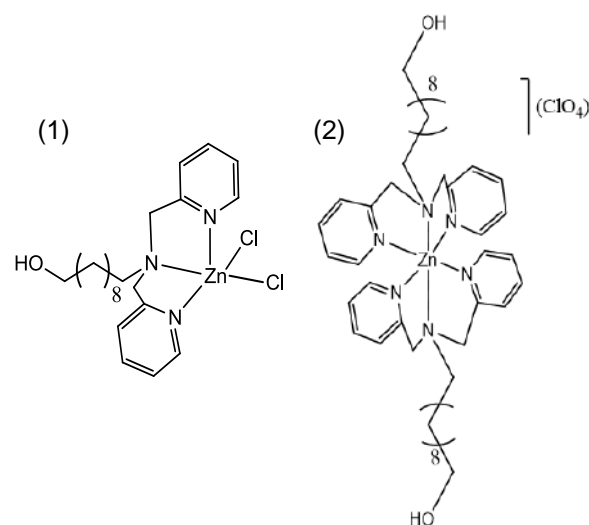


Figure 1. Proposed chemical structures of **1** and **2**, respectively.

Acknowledgements

UDESC, UFSC, UNIEDU, FAPESC, CAPES and CNPq

References: [1] Liu, H.; Sadler, P. J. *Acc. Chem. Res.* 2011, 44(5), 349. [2] GARCÍA-RAMOS, J. C. et al. Metal-based drug-DNA interactions. *Journal of the Mexican Chemical Society*, v. 57, n. 3, p. 245–259, 2013. [3] Zianna, A.; Psomas, G.; Hatzidimitriou, A.; Coutouli-Argyropoulou, E.; Lalia-Kantouri, M. J. *Inorg. Biochem.* 2013.

Área: INO

(Inserir a sigla da seção científica para qual o resumo será submetido. Ex: ORG, BEA, CAT)

Nº de Inscrição: 01073

(Inserir o número de inscrição do autor que fez a submissão)

Synthesis and photophysical characterization of the excited states of *meso*-mono-substituted(amino-ferrocenyl)porphyrins: Experimental and theoretical approaches

Leandro H. Z. Cocca (PG)^a, Lucas F. Sciuti (PG)^{a,b}, Lucas B. Menezes (PG)^c, Mateus H. Köhler (PG)^d, Andressa C. Bevilacqua (PG)^d, Paulo C. Piquini (PQ)^d, Leonardo de Boni (PQ)^{a,b} and Bernardo A. Iglesias (PQ)^c

bernardopgg@gmail.com

^aInstituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos-SP, Brazil;

^bEscola de Engenharia de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos-SP, Brazil;

^cLaboratório de Bioinorgânica e Materiais Porfirínicos, Departamento de Química, Universidade Federal de Santa Maria - UFSM, 97105-900, Santa Maria – RS, Brazil;

^dDepartamento de Física, Universidade Federal de Santa Maria – UFSM, 97105-900, Santa Maria – RS, Brazil;

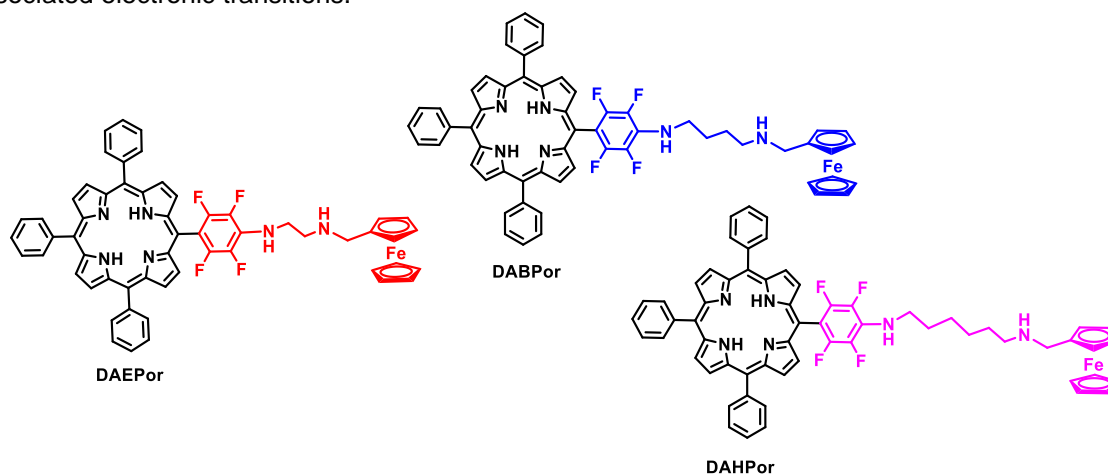
Keywords: Porphyrins, ferrocenyl-porphyrins, photophysics, NLO, Z-Scan.

Highlights

Excited state and intersystem crossing mechanism for amino-ferrocenyl porphyrins were investigated; NLO properties of amino-ferrocenyl substituted porphyrins were investigated; Z-Scan technique was explored in the amino-ferrocenyl porphyrins derivatives;

Resumo/Abstract

The study and spectroscopic characterization of *meso*-mono-(amino-ferrocenyl)porphyrins has increased during the last years due to the fact that the porphyrins present considerable applicability in several areas, in addition, such molecules can be synthesized in such a way that their linear and nonlinear optical parameters are modulated, or in other words, improved for the use in certain applications. As an example of this, we can mention the insertion of different peripheral amino-ferrocenyl units to the porphyrin macrocycle at *meso*-aryl position. In this work, we characterize spectroscopically a group of five free-base porphyrins, three of them having a C₆F₄ group attached to an amino-ferrocene moiety through a -NH(CH₂)_nNH- spacer, in which n = 2, 4 or 6. For this study, we employ nonlinear and linear optical spectroscopy techniques, such as the Z-Scan and time resolved fluorescence. Also, TD-DFT calculations further confirmed that the optical response and the associated electronic transitions.



Agradecimentos/Acknowledgments

The authors thanks to CNPq, CAPES, FAPERGS and FAPESPS for financial supporting.

42ª Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química: Eixos Mobilizadores em Química

Eletrossíntese de selenetos de diorganoíla

Anne Gabrielle Meirinho (PG)¹, Vinicius Felipe Pereira (IC)¹, Guilherme M. Martins (PG)², Samuel Rodrigues Mendes (PQ)^{1*}

annemeirinho@hotmail.com; vini.felpe@gmail.com; samuel.mendes@udesc.br

¹ Laboratório de Síntese e Catálise (SinCa) - Departamento de Química, Centro de Ciências Tecnológicas, Universidade do Estado de Santa Catarina – UDESC; ² Departamento de Química, Universidade Federal de Santa Maria – UFSM;

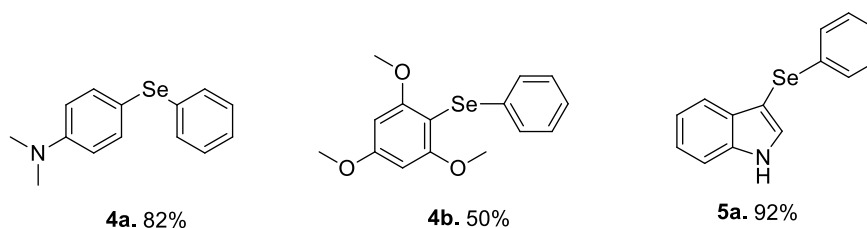
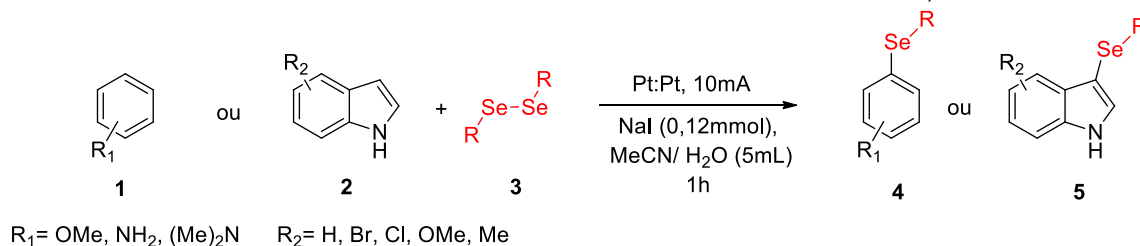
Palavras Chave: Eletrossíntese, Eletroquímica, Síntese Orgânica.

Highlights

Electrosynthesis of diorganoil selenides. Considering the increasing importance of biological application of organoselenium and heterocycles/cycles compounds this electrochemical synthesis reported herein stands out for having mild reactional conditions and high yields.

Resumo/Abstract

A síntese de heterocíclicos/ciclos com um grupo organocalcogênio permite a formação de compostos com uma vasta aplicação biológica e farmacológica.¹ Além disso, a presença do selênio nessas moléculas é essencial devido a sua atividade antioxidante.² Considerando isso, neste trabalho foi desenvolvida a síntese de selenetos de diorganoíla **4** e **5** e seus derivados por meio da eletroquímica (Esquema 1), provenientes da reação de diferentes disselenetos **3** (0.5 eq.) com os compostos **1** e **2** (1eq.). Para identificar a condição reacional ótima, foram realizados testes variando o eletrólito, solvente e corrente elétrica aplicada. Destacou-se o uso do iodeto de sódio como eletrólito e a mistura 1:1 de MeCN/H₂O, com corrente de 10mA.



Esquema 1. Eletrossíntese de selenetos de diorganoíla

Percebeu-se também que mesmo ao diminuir a quantidade de corrente aplicada e a quantidade molar do eletrólito o rendimento para esta reação se mantém próximo. De forma semelhante ao trabalho recentemente publicado por Zhang e colaboradores (2018), foram feitos estudos ao adicionar grupos doadores e receptores de elétrons por meio de diferentes disselenetos (Esquema 1), caracterizando as moléculas sintetizadas via RMN e CG-EM.³ Além disso, também foram propostos possíveis mecanismos diante dos resultados obtidos. Sendo, desta forma possível, ter como satisfatório o uso da metodologia empregada para a síntese eletroquímica de selenetos de diorganoíla.

Agradecimentos/Acknowledgments

UDESC, FAPESC, FITEJ, FINEP, CAPES e CNPq

¹ M. Ninomiya, D. R. Garud, M. Koketsu, Coord. Chem. Rev. 2011, 255, 2968–2990 ² D. Bhowmick, G. Mugesh, Org. Biomol.Chem. 2015, 13,10262– 10272; ³ Zhang, X.; Wang, C.; Jiang, H. ; Sun, L. Chem. Commun., 2018, 54, (63), 8781-8784.

Área: AMB Nº de Inscrição: 30423

Development of a method of quantification of microcystin in fresh water using Chemical modified nodularins as internal standard.

Felipe G. Carvalho (PG),¹ Felipe A. Dörr (TC),¹ Fabiane Dörr (TC),¹ Ernani P. Junior (PQ).^{1*}

felipe.garcia.carvalho@usp.br; ernani@usp.br

¹Departamento de Análises Clínicas e Toxicológicas, USP-SP

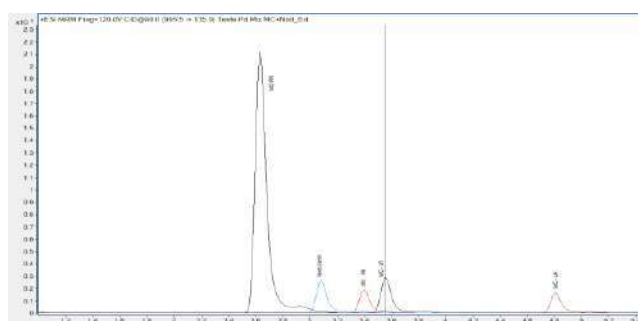
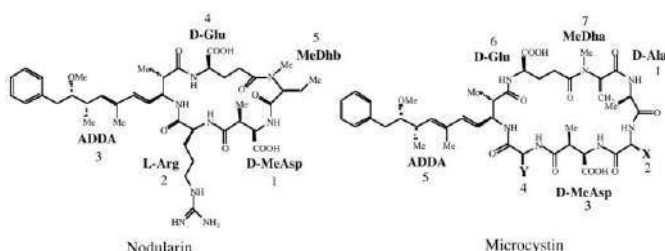
Palavras Chave: *Microcystins, LC-MS, Method, Internal standard, Chemical modification.*

Highlights

Microcystins are environmental contaminants. Quantification by HPLC-MS / MS. Internal standard required. Microcystins and nodularins are cyclic peptides. Chemical modification for new compounds

Resumo/Abstract

Cyanotoxins are toxins produced by cyanobacteria found in various environments. They have become an important source of environmental studies because of their toxicological potential by contaminating reservoirs and water sources, as reported in various studies and by the media. Among these cyanotoxins, the most famous are the microcystins, cyclic peptides, with very toxic potential, because of this existing legislation specific to them. The most common variants of these are LA, LR, RR and YR and will be those involved in this study. For quantification purposes, it is necessary to develop a rapid and effective method for this. Based on this thought, together with equipment with high separation power and reaching very low limits of detection, the choice of a high resolution liquid chromatography coupled to a triple quadrupole mass spectrometer detector (HPLC-MS / MS) was the choice more appropriate. But when working with a mass spectrometer, the choice of an internal standard (IS) is of extreme importance, because different from a UV-Vis detector, the mass detector greatly varies its result because it depends on the ionization of the molecules and they are not always the same. When adding IS, a compound with similar chemical characteristics with its analyte, both suffer the same ionization and with this they will have similar answers, which can be used for a more precise quantification. The choice of nodularins as an internal standard was due to their structural similarity to microcystins, ie, cyclic peptide. But because it is a compound that can be found naturally along with the analyte, a chemical modification thereof is necessary to create a new, non-naturally occurring molecule for accuracy analyzes.



Acknowledgments

This work was supported by grants 1799728 from Coordination of Improvement of Higher Level Personnel (CAPES).

Funcionalização eletroquímica da ligação C-H e selenação da posição α dos 2-naftóis via catalisadores iônicos de iodo

Vinicius Felipe Pereira (IC)¹, Anne Gabrielle Meirinho (PG)¹, Guilherme M. Martins (PG)², Samuel Rodrigues Mendes (PQ)^{1*}, Antonio L. Braga (PQ)³

vini.felpe@gmail.com; annemeirinho@hotmail.com; samuel.mendes@udesc.br

¹ Laboratório de Síntese e Catálise (SinCa) - Departamento de Química, Centro de Ciências Tecnológicas, Universidade do Estado de Santa Catarina – UDESC; ² Departamento de Química, Universidade Federal de Santa Maria – UFSM; ³ Departamento de Química, Universidade Federal de Santa Catarina – UFSC.

Palavras Chave: Eletrossíntese, Eletroquímica, Síntese Orgânica.

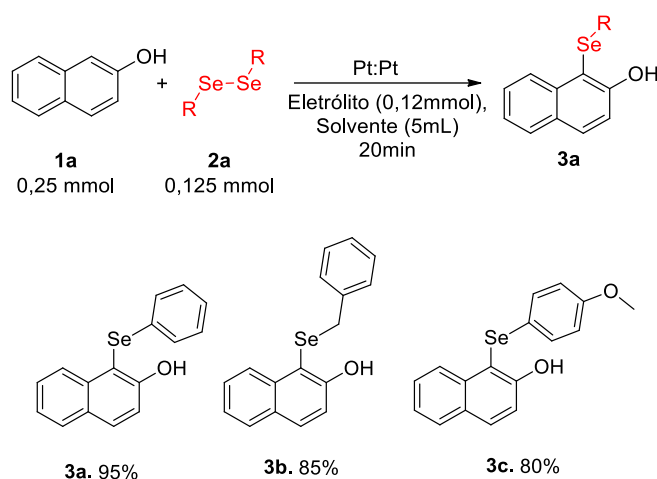
Highlights

Electrochemical C-H bond functionalization and selenation of the α -position of 2-naphthols via iodide ion-catalyzed. An attractive approach in organic synthesis for the chalcogenation of bicyclic arenes by using electrochemistry method. This efficient strategy provides high yields, atom-economic, metal-free, short reaction times, and a high range of biological applications.

Resumo/Abstract

Tendo em vista as vastas propriedades dos derivados do naftaleno e a alta relevância biológica dos compostos organocalcogênicos¹, neste trabalho foi desenvolvida a síntese eletroquímica de **3a** apresentado no Esquema 1, utilizando 2-naftol **1a** e metade de equivalência molar de diferentes disselenetos **2a**.

Em busca das melhores condições reacionais foram realizados diversos testes variando eletrólitos, solventes e quantidade de corrente elétrica aplicada. Mediante a isso, destacou-se a condição referente ao uso de iodeto de potássio como eletrólito, acetonitrila e 20mA de corrente.



Esquema 1. Síntese eletroquímica de Selenil-2-naftol

Além disso, também foi feita a adição de grupos doadores e receptores de elétrons por meio de diferentes disselenetos (Esquema 1), bem como a caracterização dos mesmos via RMN e CG-EM. Diante dos resultados obtidos, também foram realizados estudos de possíveis mecanismos para a síntese relatada. Dessa forma, a eletroquímica mostrou-se uma ferramenta eficiente possuindo condições brandas para a síntese das moléculas descritas.

Agradecimentos/Acknowledgments

UDESC, FAPESC, FITEJ, FINEP CAPES e CNPq

¹ Klayman, D. L.; Gunter, H.H. Organoselenium Compounds: Their Chemistry and Biology. Wiley-Interscience, Vol. 1. New York, 1973

SÍNTESE DE BISINDOLILMETANOS CATALISADA POR [NMPH]CH₃SO₃

André L. Vailati (PG), Lucas M. Caño (IC), Samuel R. Mendes (PQ)*, Fernando R. Xavier (PQ), Rogério A. Gariani (PQ).

andre_lv1@live.com; samuel.mendes@udesc.br

¹Departamento de Química, Universidade do Estado de Santa Catarina – UDESC

Palavras Chave: Líquidos Iônicos, Bisindolilmetanos, Química Verde.

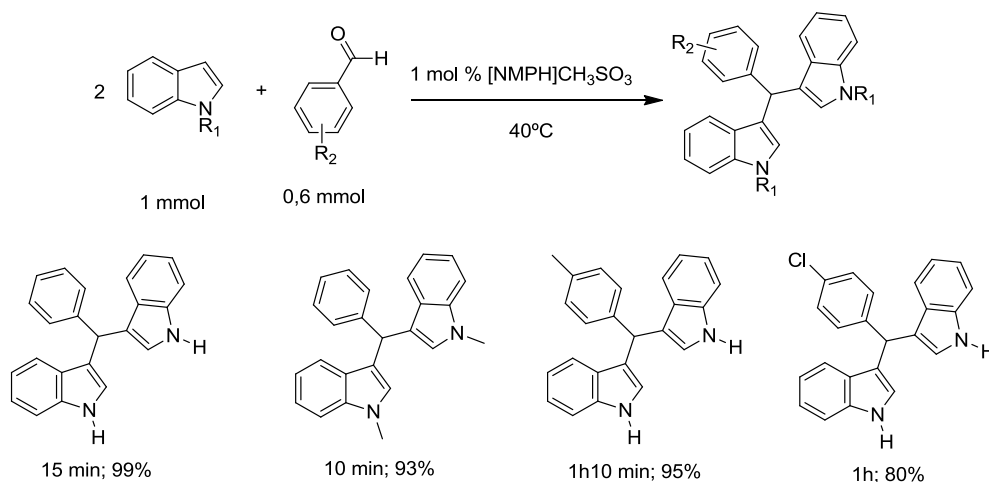
Highlights

Synthesis of bis(indolyl)methanes catalyzed for [NMPH]CH₃SO₃. N-methyl-2-pyrrolidonium methyl sulfonate [NMPH]CH₃SO₃ was efficient in the synthesis of 3,3'-bis(indolyl)methanes.

Resumo/Abstract

A preocupação com a geração excessiva de resíduos nocivos ao meio ambiente cresceu muito com o passar dos anos gerando a necessidade de buscar por alternativas de sínteses ecológicas e sustentáveis, essa área é conhecida atualmente como Química Verde e ganha cada vez mais espaço e importância. Uma alternativa para diminuir a quantidade e toxicidade de tais resíduos é a utilização dos Líquidos Iônicos (LIs) nas reações, com o intuito de substituir catalisadores metálicos e solventes que apresentam riscos à fauna e à flora. Devido as grandes possibilidades de Lis é possível moldá-los para a aplicação desejada. Além disso, apresentam características peculiares como pressão de vapor reduzida, que não contribui para a emissão de compostos orgânicos voláteis; elevada estabilidade térmica e química; facilidade de dissolução de compostos orgânicos, inorgânicos e polímeros; uma larga janela eletroquímica; e elevada condutividade iônica.¹

Sendo assim, este trabalho apresenta uma nova metodologia sintética para a preparação de bisindolilmetano, empregando o líquido iônico (LI) metil sulfonato de N-metil pirrolidônio (Esquema 1). Foram realizadas as otimizações das condições para as reações com o LI, bem como foram sintetizados diversos exemplos de cada classe para demonstrar a abrangência das metodologias desenvolvidas. Após serem devidamente purificados, foram caracterizados por Ressonância Magnética Nuclear (RMN) de ¹H e ¹³C. Todos os produtos foram obtidos com bons rendimentos e em condições brandas.



Esquema 1: Síntese de bisindolilmetanos catalisada por [NMPH]CH₃SO₃.

Agradecimentos/Acknowledgments

UDESC, FAPESC, FITEJ, FINEP CAPES e CNPq

¹ Hallett, J. P.; Welton, T. *Chem. Rev.* **2011**, *111*, 3508-3576.

Área: TEC

Nº de Inscrição: 49278

Perfluoropolieter thermal stability (PFPE) employed as a lubricant

Ellen C.A. Rosa (PG),^{1*} Rene F.B. Gonçalves (PQ),¹ Marcela G. Domingues (PG),¹ Antônio C. Silva (PQ),² José A.F.F. Rocco (PQ),¹. ellen@ita.br;

¹Departamento de Química, Instituto Tecnológico de Aeronáutica, ITA, CEP 12228-900, SJ dos Campos, SP;

²Departamento de Engenharia Química, Escola de Engenharia de Lorena, Universidade de São Paulo, 12602-810 Lorena – SP, Brasil

Keywords: Lubricant, Grease, Perfluoropolyether, Thermal Analysis, Thermogravimetry, Molecular Dynamics.

Highlights

The class of liquid lubricants perfluoropolyether (PFPE) has been used for aeronautical applications such as gas turbines and other industrial areas, mainly due to its excellent chemical and thermal stability. The purpose of this work was to study the thermal decomposition behavior of synthetic lubricant PFPE.

Abstract

The synthetic grease characterized in this study has an operating range between -70 and 316 °C. This high thermal stability is due to its main component, perfluoropolyether (PFPE) oil, which corresponds to 90-98% of the product composition. A large number of studies on lubrication has been conducted using thermal analysis methods, such as Thermogravimetry (TGA)¹. Molecular Dynamics (MD) is also used to understand the properties of materials, as it examines the interactions among their constituent atoms/molecules².

The TGA curves of the PFPE grease were obtained using a Shimadzu DTG 60. The tests were conducted according to ASTM E1131-08, using samples of approximately 10 mg and a synthetic air atmosphere (100 mL min⁻¹), heated from 25 °C to 1000 °C at 10, 15 and 20 °C min⁻¹ (Fig. 1). The TG curves showed that the grease is thermally stable up to the temperature of 300 °C. In the kinetic models of Flynn-Wall-Ozawa (FWO) and Kissinger, the calculated activation energies for the decomposition were 84.74 kJ mol⁻¹ and 78.48 kJ mol⁻¹, respectively.

The LAMMPS (Large Scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator)³ software package was used to simulate the decomposition of PFPE in a temperature range of 0 to 3500 K during 50 ps, under a synthetic air atmosphere (Fig. 2). The activation energy of PFPE's thermal decomposition in the simulation was 73.71 kJ mol⁻¹. It is worth noting that the grease under study has 90-98% (m/m) of PFPE oil in its formulation.

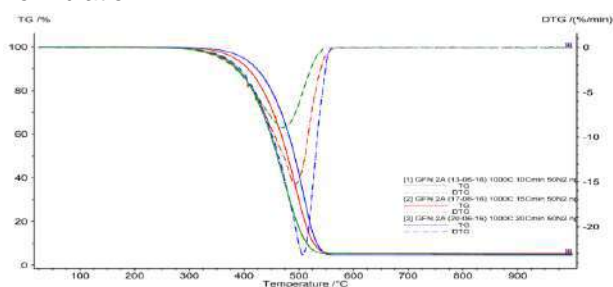


Fig 1. TG and DTG curves of PFPE grease.

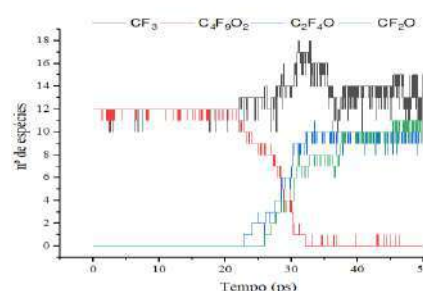


Fig 2. Simulation of PFPE in LAMMPS.

Thus, the activation energy calculated in the simulation (LAMMPS) was consistent with the experimental results (thermal analysis). These results show that the PFPE grease has excellent thermal behavior, which enables high temperature applications, and also that the simulations can successfully predict the kinetic parameters for special lubricants.

Acknowledgments

ANEEL– Agência Nacional de Energia Elétrica; EDF Norte-Fluminense; Molygrafit Indústria and Comércio Ltda.

¹ YOKOYAMA, Fumihiko, Estimation of Service Lives and Operating Temperature Ranges of High-Temperature Lubricating Oils Using Thermal Analysis, v. 4, n. 8, p. 516–523, 2014;

² RINCON, Maria C *et al.*, Designing meaningful MD simulations : The lithiation of Silicon, v. 11, n. Md, p. 15002, 2013.

³ LABORATORIES, Sandia National, LAMMPS Molecular Dynamics Simulator, disponível em: <<http://lammps.sandia.gov/>>.

Use of ionic liquid in the microwave assisted extraction of costic acid from *Nectandra barbellata* (Lauraceae) with antiparasitic activity

Vinicius S. Londero (PG),^{1*} Guilherme M. Antar (PG),² João B. Baitello (PQ),³ Thais A. Costa-Silva (PG),⁴ André G. Tempone (PQ),⁵ Larissa V. F. de Oliveira (PG),¹ Fernanda F. Camilo (PQ),¹ João Henrique G. Lago (PQ).⁴ *E-mail: viniciuslondero@gmail.com

¹Instituto de Ciências Ambientais, Químicas e Farmacêuticas, Universidade Federal de São Paulo (UNIFESP); ²Instituto de Biociências, Universidade de São Paulo (USP); ³Instituto Florestal de São Paulo, Secretaria do Meio Ambiente do Estado de São Paulo (SMA-SP); ⁴Centro de Ciências Naturais e Humanas, Universidade Federal do ABC (UFABC); ⁵Centro de Parasitologia e Micologia, Instituto Adolfo Lutz (IAL).

Key words: *Nectandra barbellata*, Ionic liquid, MAE, Costic acid, Antiparasitic activity.

Highlights

This work reports the use of ionic liquid 1-butyl-3-methylimidazolium bromide in the microwave assisted extraction (MAE) from twigs of *Nectandra barbellata* Coe-Teixeira (Lauraceae). After bioactivity-guided fractionation the sesquiterpene costic acid (CA) was isolated. Antiparasitic activity of CA was evaluated *in vitro* against *Trypanosoma cruzi*. A trypanocidal effect against trypomastigote ($EC_{50} = 37.8 \pm 7.2 \mu\text{M}$) and amastigote ($EC_{50} = 7.9 \pm 0.4 \mu\text{M}$) forms was detected with no cytotoxicity ($CC_{50} > 200 \mu\text{M}$) to NCTC cells.

Abstract

The use of ionic liquids as extractive agents has increasingly aroused interest in its promising role as alternative solvents of lower environmental impact, compatible with an innovative, efficient and green technology.¹ In this work, dry twigs of *N. barbellata* were subjected to microwave assisted extraction (MAE) using the ionic liquid 1-butyl-3-methylimidazolium bromide. The obtained extract displayed *in vitro* activity against trypomastigote forms of *T. cruzi* (100% of parasite death at 300 $\mu\text{g}/\text{mL}$) and was submitted to a bioactivity-guided fractionation. This approach afforded the eudesmane-type sesquiterpene costic acid – CA (Figure 1), which structure was defined by NMR analysis. This compound has previously been described in some species of *Nectandra*,² but its anti-*T. cruzi* potential is still unknown. Therefore, the *in vitro* antiparasitic activity of CA and positive control benznidazole was evaluated against trypomastigote and amastigote forms of *T. cruzi* and the obtained results are presented in Table 1.

Figure 1. Chemical structure of the costic acid (CA)

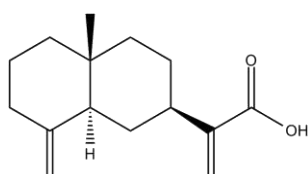


Table 1. Effects of the costic acid (CA) against trypomastigote and amastigote forms of *Trypanosoma cruzi* and NCTC cells

| Compounds | <i>T. cruzi</i> EC ₅₀ / μM (95% CI) | | NCTC CC ₅₀ / μM (95% CI) | SI | |
|------------------|---|---------------|--|----------------|------------|
| | trypomastigote | amastigote | | trypomastigote | amastigote |
| Costic acid (CA) | 37.8 \pm 7.2 | 7.9 \pm 0.4 | >200 | >5.3 | >25.3 |
| Benznidazole* | 16.4 \pm 4.3 | 5.5 \pm 1.0 | >200 | >12.2 | >36.4 |

EC₅₀: 50% Effective concentration; CC₅₀: 50% Cytotoxic concentration; 95% CI: 95% confidence interval; SI: Selectivity index. *Standard drug.

The obtained results shown that CA was active against trypomastigote forms of *T. cruzi* presenting CE₅₀ values at 37.8 \pm 7.2 μM with reduced toxicity for NCTC cells ($CC_{50} > 200 \mu\text{M}$) and SI > 5.3. To amastigote forms, CA displayed an excellent potential with CE₅₀ values of 7.9 \pm 0.4 μM and SI > 25.3, similar to positive control benznidazole. Therefore, following the criteria defined by the DNDi (Drugs for Neglected Diseases initiative),³ determined CE₅₀ and SI values indicated that CA could be considered as a potential candidate for the development of a new antichagasic drug. In addition, this work contributes to the obtaining of bioactive compounds through an alternative, green and sustainable procedure, from the use of ionic liquids.

References: ¹Morais, T.R. et al. *J. Braz. Chem. Soc.*, **2017**, 28, 492-497. ²Grecco, S.S. et al. *Tetrahedron: Asymmetry*, **2016**, 27, 793-810. ³Don, R.; Ioset, J.R. *Parasitol.*, **2014**, 141, 140-146.

Acknowledgements: FAPESP (2017/17044-1) and CNPq.

Estudo teórico de novos complexos com bases de Schiff visando obtenção de altos valores de hiperpolarizabilidade (β).

Fernanda C. C. Kunizaki¹ (PG), Marcos E. G. Carmo¹ (IC), Lincoln L. Romualdo¹ (PQ).

fernanda.costa@msn.com

¹ Unidade Acadêmica Especial de Química - Universidade Federal de Catalão – UFCat.

Palavras Chave: Base de Schiff, Hiperpolarizabilidade, Óptica não linear, Efeito Push-pull.

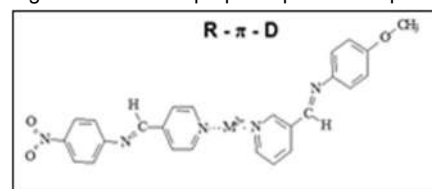
Highlights

Theoretical study of novel schiff base metal complexes for high values of hyperpolarizabilities – This work is focused on molecular modeling, based on DFT principles aiming to obtain the best values of hyperpolarizability for the proposed complexes.

Resumo/Abstract

Hiperpolarizabilidade (β) é um fenômeno óptico não linear (ONL) associado a geração de um segundo harmônico ao incidir ondas de alta intensidade sobre determinado material¹. Moléculas orgânicas são amplamente estudadas em busca de materiais com essa propriedade, pois estas possibilitam a formação de sistemas π conjugado e propiciam a transferência de carga intramolecular e estruturas moleculares planares, devido as interações dos átomos de carbono². O efeito push-pull possibilita a maximização de a transferência de carga intramolecular no sistema π , devido a inserção de grupos doadores (D) e retiradores (R) de elétrons, favorecendo a deslocalização eletrônica gerando a polarização no sistema³.

Figura 1. Estrutura proposta para o complexo.



Estudos teóricos associando compostos orgânicos a centro metálicos ricos em elétrons tem apresentado uma possibilidade de geração de altos valores de β ⁴. O objetivo deste trabalho é realizar estudos por DFT (Density Functional Theory) para avaliar as propriedades eletrônicas e óticas visando materiais com valores promissores de β , e baixa diferença de energia entre HOMO e LUMO.

Utilizou-se o funcional CAM-B3LYP e o conjunto de base 6-311+G, realizado pelo software Gaussian 09W em uma série de compostos de coordenação. Estes apresentam estruturas compostas por duas bases de Schiff distintas coordenados a diferentes íons de metais de transição conforme Figura 1. Os valores de β calculados para compostos com diferentes centros metálicos estão representados na Tabela 1, o valor referente à para-nitroanilina (pna), utilizada como referência, também está indicado. Observa-se que os complexos de Ni²⁺ e Fe²⁺ apresentaram valores mais elevados para a hiperpolarizabilidade.

Além dos resultados para a hiperpolarizabilidade, os valores de energia entre o HOMO e o LUMO dos compostos foram obtidos, indicados na Tabela 2. Os resultados indicam uma baixa variação de energia entre os estados, indicando uma pequena quantidade de energia necessária para a excitação eletrônica. Os resultados disponibilizados no diagrama, da Figura 2, indicam a possibilidade de utilização em células solares sensibilizadas por corantes (DSSC), propostas por Gratzel⁵.

Conforme os resultados apresentados e discutidos, dentre a série de novos complexos propostos, o complexo contendo o íon Ni²⁺ demonstra maior potencial para a aplicação, tanto para a hiperpolarizabilidade, quanto para as células solares.

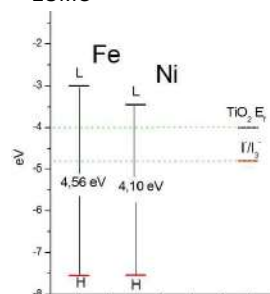
Tabela 1. Valores calculados de β .

| Composto | β (e.s.u) |
|---------------|-----------------|
| nitro anilina | 1,76E-29 |
| imD3ZnR4py | 1,83E-28 |
| imD3CuR4py | 6,28E-29 |
| imD3NiR4py | 3,43E-27 |
| imD3FeR4py | 4,68E-28 |
| imD3MnR4py | 6,28E-29 |

Tabela 2. Valores para orbitais HOMO e LUMO.

| Composto | imD3FeR4py | imD3NiR4py |
|---------------------------|------------|------------|
| Lumo (eV) | -7,55295 | -7,54424 |
| Homo (eV) | -2,99647 | -3,44627 |
| Diferença de energia (eV) | 4,55648 | 4,09797 |

Figura 2. Diagrama HOMO-LUMO



Agradecimentos a CAPES e ao Prof^o. Dr. Antônio E. da H. Machado, pela disponibilização do software Gaussian 09W.

¹ ZILIO, Sérgio Carlos. Óptica moderna: Fundamentos e Aplicações. 2009.

² RODRIGUEZ, Ruben Dario Fonseca. Não linearidades de segunda e terceira ordem de sistemas moleculares ramificados. 2016. Tese. Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2016.

³ PROCÓPIO, Márcia Barsottelli; CESAR, Amary. Química Nova, [s.l.], v. 32, n. 5, p.1157-1163, 2009.

⁴ LIU, Chun-guang et al. Chemical Physics Letters, [s.l.], v. 429, n. 4-6, p.570-574, out. 2006.

⁵ GRATZEL, Michael. Nature, v. 414, n.6861, p. 338, 2001.

Synthesis of core-shell nanoparticles with magnetic and luminescent properties for biomedical applications

Amanda das Graças Barbosa¹ (IC), Sandra de C. Pereira¹ (PG), Alberthmeiry T. de Figueiredo¹ (PQ).
amandadasgracas60@gmail.com

¹Unidade Acadêmica de Química - Universidade Federal de Catalão – UFCat.

Keywords: Cobalt ferrite, magnetism, luminescence, rare-earth.

Highlights

Synthesis of multifunctional material combining magnetic and luminescent properties. The synthesis is based on the coating of a magnetic material (core) by a luminescent (shell).

Resumo/Abstract

Materials with magnetic and luminescent properties have biomedical applications in the transport of drugs and the simultaneous diagnosis of images. These multifunctional materials are synthesized in order to obtain a core-shell system. Due to its ferromagnetic properties and its excellent chemical stability, it was decided to use cobalt ferrite (CoFe_2O_4) as core¹. And the silicon dioxide (SiO_2) doped with RE^{+3} ions of europium or samarium was used as a shell, because doping with rare-earth ions facilitates electronic transitions responsible for luminescence. For core-shell synthesis, RE^{+3} was dissolved in ethanol and water, followed by the addition of phenanthroline (phen) and magnetic particles. The tetraethyl orthosilicate was added under stirring and sonication for 25 minutes. The solution was stirred for 3 h and the solvent was dried at room temperature for 3 days. The products were structurally characterized by XDR, Figure 1 illustrates the XRD pattern of pure ferrite and core-shell. In both core-shell XRD patterns the presence of a broadband is verified, such behavior is characteristic of amorphous materials, which is related to the presence of SiO_2 . To ascertain the magnetic property of the material, the products were exposed to a magnetic field of 1 T. The $\text{CoFe}_2\text{O}_4@ \text{SiO}_2:\text{phen}:\text{Eu}^{+3}$ showed saturation magnetization of 8 emu/g, presenting a decrease in relation to the pure ferrite due to the presence of a diamagnetic shell. The luminescence of the materials was analyzed by subjecting the products to an ultraviolet lamp with exciting radiation of 350 nm. Only core-shell containing europium presented visible emission, Figure 2 describes the result obtained. The products doped with europium presented the most promising results, since it has both properties of interest.

Figure 1. XRD patterns of CoFe_2O_4 and $\text{CoFe}_2\text{O}_4@ \text{SiO}_2:\text{phen}:\text{TR}^{+3}$.

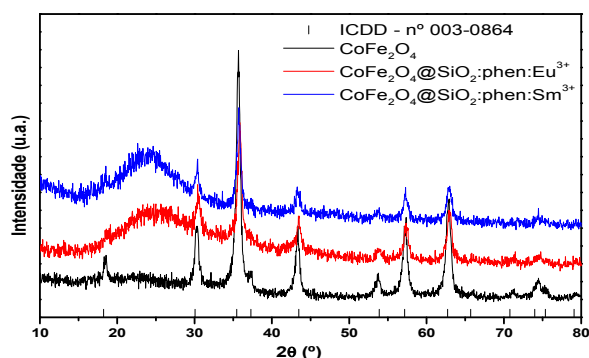


Figure 2. $\text{CoFe}_2\text{O}_4@ \text{SiO}_2:\text{phen}:\text{Eu}^{+3}$ with and without the presence of UV radiation, respectively.



References

¹CALERO-DDELIC, V.L e RINALD, C. "Synthesis and magnetic characterization of cobalt-substituted ferrite ($\text{Co}_x\text{Fe}_{3-x}\text{O}_4$) nanoparticles". Journal of Magnetism and Magnetic Materials, v. 314, p. 60-67, 2007.

Arrays of copper microelectrodes prepared from disposable electronic chips

Giane S. Higino (PG)*, Eduarda Iorio de Castro (IC), Jairo J. Pedrotti (PQ)

gianegh.higino@hotmail.com; jpedrotti@mackenzie.br

MackGraphe – Graphene and Nanomaterials Research Center - Mackenzie Presbyterian University - Rua da Consolação, 896 – São Paulo, SP – CEP 01302-907

Palavras Chave: copper microelectrodes, arrays of microelectrodes, square-wave voltammetry, nitrate.

Highlights

- Copper microelectrodes (CuMEs) were prepared from SMD disposable electronic chips.
- The microelectrodes show an average radius of $22.1 \pm 1.9 \mu\text{m}$.
- The CuMEs shown good performance for NO_3^- SW voltammetry detection between 50 and $900 \mu\text{mol L}^{-1}$.

Abstract

Microelectrodes have some attractive properties in comparison with conventional sized electrodes in stationary solution including the predominance of radial diffusion to the electrode; a reduced ohmic iR drop in solution; a fast cell response time and the ability to operate by a simple two-electrode system rather than the more complex potentiostatic system [1]. The fabrication of microelectrodes is usually made by photolithography and microfabrication processes, which are expensive and require highly qualified operator. In this work we present a simple and fast process to prepare copper microelectrodes (CuMEs) by using the copper wires which are used in semiconductor industry to connect the integrated circuit to the pins of the chips which use surface mounted device (SMD) technology. Arrays of CuMEs with 8, 14 and 20 units were prepared by using procedure previously described [2]. Fig. 1A and 1B shows the microelectrodes platform assembling and a typical optical image of a random CuME with radius of $22.1 \pm 1.9 \mu\text{m}$. The XEDS spectrum used for the characterization of the metal and the electrochemical behavior of the CuMEs in $\text{NaOH } 0.50 \text{ mol L}^{-1}$ are presented in Fig. 2. The cathodic detection of NO_3^- at $50 - 900 \mu\text{mol L}^{-1}$ concentration range in aqueous acid medium by square-wave voltammogramy [3] shows the potentialities of proposed CuMEAs for an electroanalytical application (Fig 3).

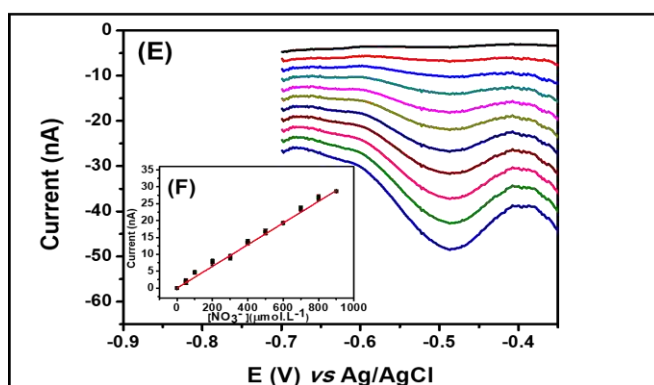


Fig 3. (E) SW voltammograms for nitrate detection in the range of $50 - 900 \mu\text{mol.L}^{-1}$ in $\text{Na}_2\text{SO}_4 0.10 \text{ mol.L}^{-1}$ (pH=2) obtained with an array with 08 CuMEs. The inset (F) shows the calibration curve. Conditions: Frequency: 20Hz; pulse amplitude: 10mV and potential step: 2mV.

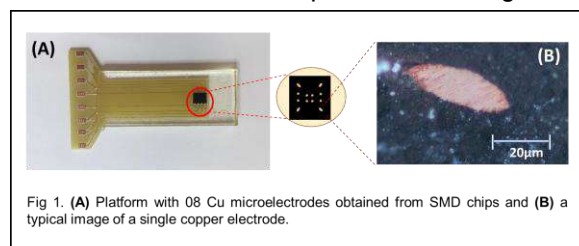


Fig 1. (A) Platform with 08 Cu microelectrodes obtained from SMD chips and (B) a typical image of a single copper electrode.

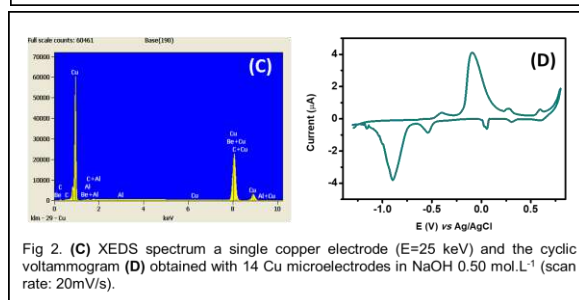


Fig 2. (C) XEDS spectrum of a single copper electrode ($E=25 \text{ keV}$) and the cyclic voltammogram (D) obtained with 14 Cu microelectrodes in $\text{NaOH } 0.50 \text{ mol.L}^{-1}$ (scan rate: 20 mV/s).

Acknowledgments

Mackpesquisa e FAPESP

1. K. Stulik et al, *Pure Appl. Chem.* **2000**, 72, 1483–1492.
2. B.D. Pacheco, J. Valério, L. Angnes, J.J. Pedrotti, *Anal. Chim. Acta* **2011**, 696, 53-58.
3. L. Angnes, T.R.L.C. Paixão, W.R. Araujo, I.S. Silva, *Sensors and Actuators B* **2013**, 188, 94-98.

Sustainable synthesis of gold nanoparticles in heterogeneous systems

Daliane C. de Faria (IC),¹ Francielle O. Chagas (PG),^{1,2} Luis Henrique M. da Silva (PQ),^{2,3} Maria do Carmo Hespagnol (PQ)^{1,3*}

dalianefaria9@gmail.com; [*mcarמושespanhol@gmail.com](mailto:mcarמושespanhol@gmail.com)

¹Grupo de Análises e Educação para a Sustentabilidade (GAES), ²Grupo de Química Verde Coloidal e Macromolecular (QUIVECOM), Departamento de Química, Centro de Ciências Exatas e Tecnológicas, Universidade Federal de Viçosa, Viçosa/MG; ³Instituto Nacional de Ciências e Tecnologias Analíticas Avançadas (INCTAA).

Palavras Chave: Nanoparticles, Nanotechnology, Green chemistry, Copolymer, Green synthesis

Highlights

Biphasic systems formed by triblock copolymer. Gold nanoparticles in biphasic systems to simultaneously separate and detect industrial interest.

Abstract

Synthesis of the gold nanoparticles (AuNP) has been investigated mainly to improve chemical stability, process of synthesis and modification of their surface, electronic, optical, thermal and catalytic properties to future application in different fields of science. However, generally the AuNP synthesis is not very clean process and it is realized in homogeneous system.¹ In this work, we investigated novel AuNP synthesis in aqueous biphasic system (ABS) with two heterogeneous phases. The ABSs used in the AuNP synthesis are formed by triblock copolymers + salt + water. Figure 1 shows that higher quantities of AuNP were produced in the ABS with F68 than L64 and L35 in the presence of sodium citrate (CitNa). Copolymer F68 presents more quantity of ethylene oxide group (EO) than L64 and L35. Thus, in an ABS with F68, the gold reduction is more favorable to produce AuNP. Figure 2 shows that citrate anion favors AuNP formation because this ion acts as a stabilizer agent as well as a reducing agent of nanoparticles. Figure 3 presents the cation effect on the AuNP synthesis in an ABS with F68. As can be seen, an ABS with ammonium citrate (CitNH₄) does not promote the AuNP formation, while in the CitNa ABS there is a large AuNP production. The AuNP concentrate preferably in macromolecule rich-phase, independently of the ABS used to produce them (as illustrated in the picture - Fig. 2). The copolymer and salt are the constituents of the ABS that influence the quantity, form and size of the AuNP formed. It is possible to verify these characteristics of the AuNP by observing their electronic spectra (Fig. 1 and Fig. 2). The AuNP produced in the ABS with F68 + Na₂SO₄ presents a wavelength maximum (λ_{max}) = 552 nm and a broadening of peak. Whereas, λ_{max} = 533 nm was obtained when AuNP was produced using ABS with F68 + CitNa. Transition electron microscopy of the AuNP is being realized to demonstrate the difference of the AuNP obtained in each ABS. Figure 4 shows AuNP's absorbance as function of the time. The AuNP produced on the F68 + sodium tartrate (TartNa) ABS is more stable than the AuNP obtained in other ABSs.

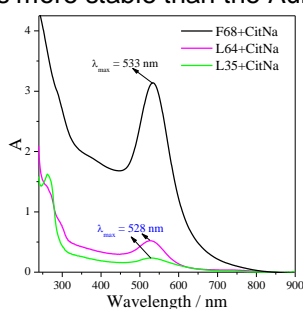


Fig.1. Effect of the copolymer

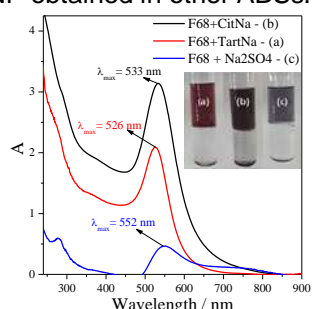


Fig.2. Effect of the anion

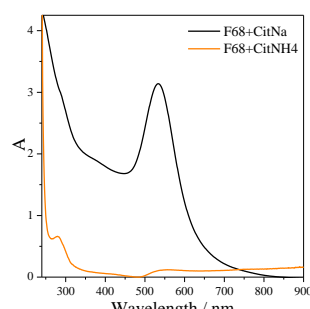


Fig.3. Effect of the cation

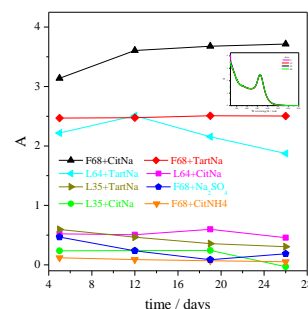


Fig. 4. Kinetics of AuNP formation

This work showed that it is possible to produce AuNP in a system with two phases. This is advantageous for analytical applications because it will be able to separate and detect/quantify an analyte *one-pot*.

References

¹J. Turkevich, PC Stevenson, J. Hillier. *Discuss. Faraday Soc.*, 11 (1951), p. 55

Acknowledgments

CAPES/Ciências Forenses, INCTAA, FAPEMIG, and CNPq.

OBTAINING OF CHALCONES WITH ALUMINUM PAPER: AN ALTERNATIVE SAFE FOR CLASSES ORGANIC CHEMISTRY

Shirlene A. Brito(IC), Patrícia Natalia B. da Silva (IC), Hellen A. Loureiro (IC), Irlon M. Ferreira

(PQ) shirleneamaral24@mail.com

Grupo de Biocatálise e Síntese Orgânica Aplicada, Departamento de Ciências Exatas, Universidade Federal do Amapá, Rod. JK, KM 02, 68902-280, Macapá, Amapá, Brasil.

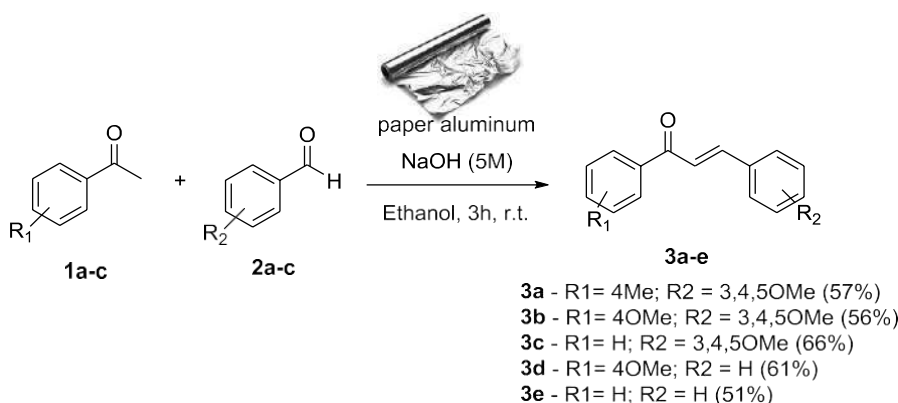
Keywords: Chalcone, green chemistry, aluminum paper, aldolic condensation.

Highlights

Obtaining of chalcones by aluminum paper; Substituting of the HCl solution for aluminum foil discs.

Abstract

Chalcones may be synthesized by reacting aldol condensation between an aromatic aldehyde and an aromatic ketone in the presence of a strong base such as NaOH (6M) finished with a Lewis acid, as such, HCl. As the search for new methods, environmentally acceptable, safe and inexpensive for the synthesis of different chalcones has aroused interest in the scientific community, the HCl solution at the end of the reaction was substituted for aluminum foil discs in obtaining chalcones. An alternative method in chalcones synthesis was developed, respecting the principles of green chemistry, as alternative classes of organic chemistry in undergraduate courses. The aromatic ketone derivative (2.0 mmol) **1a-c**, the aromatic aldehyde **2a-c** (2.1 mmol), ethanol (10 mL) and NaOH (1 mL, 5 M). The reaction was magnetic stirring for 3 h at room temperature. Then, 5 discs (0.5 cm diameter) of Cut-Rite® paper aluminum (perforated with paper punch) were added and magnetic stirring allowed for another 30 min. After this time a yellow precipitate was obtained. The precipitate formed was vacuum filtered with Büchner funnel, washed with ice water (3 x 50 mL) and the aluminum foil disks removed from the medium.



Acknowledgments

The authors would like to acknowledge Fundação de Amparo à pesquisa do Estado do Amapá (FAPEAP, grant no. 34568.515.22257.28052017) for their financial support.

Evaluation of natural adsorbents applied to DPX (Disposable Pipette Extraction) for adsorption of metallic ions.

Vanessa N. Alves (PQ), Marina M. Ferreira (PG)*.

vanessanalves@gmail.com; marimesquitaf@gmail.com

¹Departamento de Química, UFG – Regional Catalão.

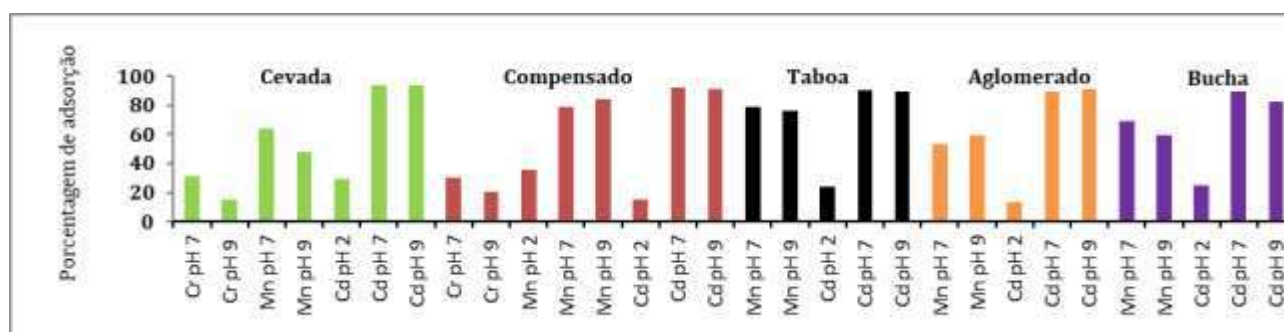
Palavras Chave: DPX, Adsorção, Metais.

Highlights

The adsorption is the most popular method for extraction of metallic ions. Disposable Pipette Extraction (DPX) is a new method consisting of a micropipettes ferrule filled with the sorbent.

Resumo/Abstract

O aumento da quantidade de metais tóxicos lançados no ambiente tem sido cada vez maior, sendo necessário um maior controle da concentração desses íons. Nesse sentido, o desenvolvimento de metodologias analíticas capazes de determinar esses íons é essencial, pois apesar da disponibilidade de diversas técnicas espectroscópicas, em alguns casos, etapas de extração e pré-concentração são necessárias. A microextração em fase sólida (SPME) é uma das técnicas que se destaca para extração e/ou pré-concentração de íons metálicos. Assim, baseada na SPME, a extração em pipeta descartável (DPX – do inglês Disposable pipette extraction) é um método novo que consiste em uma ponteira de micropipeta padrão, “carregada” com o sorvente. Assim, neste trabalho, o potencial adsorvente de diversos adsorventes naturais, frente a íons metálicos, foi avaliado, aplicados à técnica DPX. Cevada (*Hordeum vulgare*), madeira no formato compensado, taboa (*Typha domingensis*), madeira no formato aglomerado e bucha vegetal (*Luffa cylindrica*) foram avaliados como adsorventes, frente aos íons Cd(II), Cr(III) e Mn(II). Ponteiros padrão de 5 mL tiveram suas extremidades vetadas com lã de vidro e preenchidas com 20 mg do material adsorvente. Soluções dos analitos na concentração de 1 mg L⁻¹ preparadas em pH 2, 7 e 9 foram aspiradas diversas vezes para dentro da ponteira, promovendo sua interação com o adsorvente em questão, após 2 ciclos de aspiração, a solução foi dispensada em um frasco e levada para análise no FAAS. Os resultados obtidos para os experimentos estão descritos no gráfico abaixo:



Pode-se observar através do gráfico altas porcentagens de adsorção para todos os adsorventes testados, podendo se destacar os analitos Cd e Mn que apresentarem porcentagens de adsorção maiores que 70% para todos os materiais. Através desse estudo, é possível desenvolver métodos para adsorção desses analitos utilizando o método DPX como método de extração.

Agradecimentos/Acknowledgments

CAPES, FAPEG, UFG, UFU.

Dois novos complexos de cobre(II) mono- e dinuclear derivados da unidade $[Cu(bpca)]^+$: Síntese, Caracterização e Estrutura Cristalina.

Rafaela M. R. da Silva (IC),^{1*} Nathália R. de Campos (PG),¹ Daniella O. Reis (PG),² Willian X. C. Oliveira (PQ),³ Humberto O. Stumpf (PQ),³ Maria Vanda Marinho (PQ).¹

rafaela_ribeiro11@hotmail.com; mvmarinho09@gmail.com.

¹Instituto de Química, Universidade Federal de Alfenas, Unidade Educacional Santa Clara, Alfenas, Minas Gerais, CEP 37133-840. ²Colégio Magnum Cidade Nova, Belo Horizonte, Minas Gerais, CEP 31140-360.

³Departamento de Química, Universidade Federal de Minas Gerais, Belo Horizonte, Minas Gerais, CEP 31270-901.

Palavras Chave: Ligante bpca, complexos de cobre (II), ligante pirazinocarboxílico

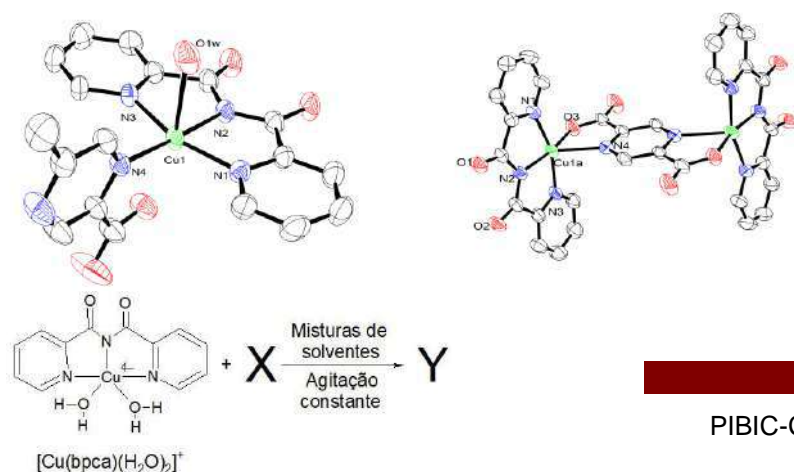
Highlights

Two new mono- and binuclear copper(II) complexes derived from $[Cu(bpca)]^+$ unit: Synthesis, Characterization and Single-crystal X-ray diffraction.

- Preparation of the $[Cu(bpca)]^+$ unit by hydrolysis of 2,4,6-tris(2-pyridyl)-1,3,5-triazine (tpyt);
- Synthesis of copper(II) complexes containing mixed ligands bis(2-pyridylcarbonyl)imide (Hbpca) and pyrazinedicarboxylic acids.
- Single-crystal X-ray diffraction revealed mono- and binuclear complexes.

Resumo

Sais de cobre(II) promovem a hidrólise do ligante polidentado 2,4,6-tris(2-piridil)-1,3,5-triazina (tpyt) para a formação do bloco construtor $[Cu(bpca)(H_2O)_2]^+$ (bpca = bis-(2-piridilcarbonyl)-amida). Este último pode ser considerado um dos blocos construtores mais utilizados recentemente na química de coordenação voltada para área do magnetismo molecular,¹ envolvendo desde a formação de diferentes complexos de coordenação a redes poliméricas.² Neste trabalho apresentamos a síntese e caracterização de dois novos blocos construtores contendo o precursor $[Cu(bpca)(H_2O)_2]NO_3$ com os ácidos 5-metil-pirazinocarboxílico (H-5-mpca) e 2,5-pirazinodicarboxílico (H₂-2,5pzdc), os quais são descritos, respectivamente, pelas seguintes fórmulas químicas $[Cu(bpca)(5-mpca)H_2O].4H_2O$ (**1**) e $\{[Cu(bpca)]_2(2,5-pzdc)\}$ (**2**). As sínteses dos novos complexos mono- e dinuclear de cobre(II) são descritas no esquema 1. Para ambos, os espectros na região do infravermelho mostram uma banda principal em 1717 cm⁻¹, indicando a hidrólise do tpyt em bpca bem como estiramentos característicos do ânion 5-mpca⁻ [1622, 1450, 1406, 1362 cm⁻¹] e do diânion 2,5-pzdc²⁻ [1619, 1483, 1387, 1321 cm⁻¹] resultantes da coordenação do carboxilato ao centro metálico. A análise por difração de raios X por monocristal revelou a formação de um complexo mononuclear e dinuclear para os complexos **1** e **2**, respectivamente, como mostrado na Figura 1. Resultados obtidos por difração de raios X por pó de **1** e **2** (experimental e simulado (cif)) exibem uma boa concordância, indicando que o monocristal analisado é representativo dos cristais de todas as análises.



Esquema 1. Esquema geral de síntese, sendo "X" o ligante de escolha (H-5-mpca ou H₂-2,5pzdc) e "Y" o novo complexo formado.

Figura 1- Representação ORTEP mostrando: (esquerda) complexo mononuclear de **1**. (direita) complexo dinuclear de **2**. Moléculas de água para **1** e átomos de hidrogênio de **1** e **2** foram omitidos por clareza.

Agradecimentos

PIBIC-CNPq, Unifal-MG, Capes, Fapemig.

1. E. O. Ribeiro, *et al.*, *CrystEngComm.*, **19(36)**, 5460-5472 (2017).
2. W. X. C. Oliveira, *et al.*, *Cryst Growth Des.*, **15(3)**, 1325-1335 (2015).

Área: INO

Nº de Inscrição: 01091

A fast microwave-assisted route of nsutite-type material

Thays C. C Lavra (PG)¹, Kauany F. Bastos (IC)², Henrique Ismael Gomes (IC)², Leidy A. Silva (PG)³, Bruno A. M. Figueira (PQ)², José M. R. Mercury (PQ)¹

kauany_bastos@outlook.com; thayslavra@gmail.com

¹Pós Graduação em Engenharia de Materiais, IFMA. ²Instituto de Engenharia e Geociências, UFOPA. ³Pos Graduação em Biodiversidade (Bionorte), UFMA.

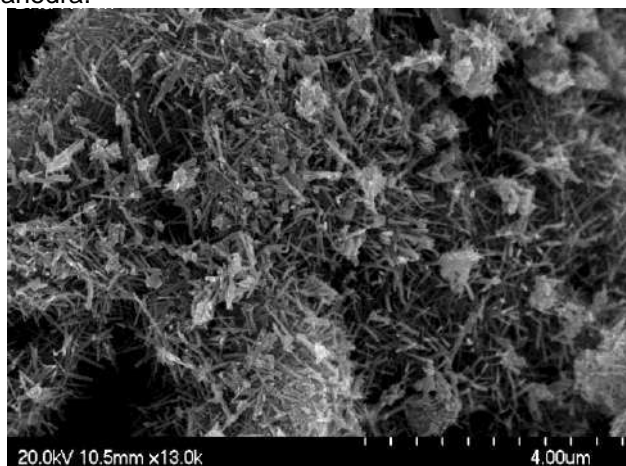
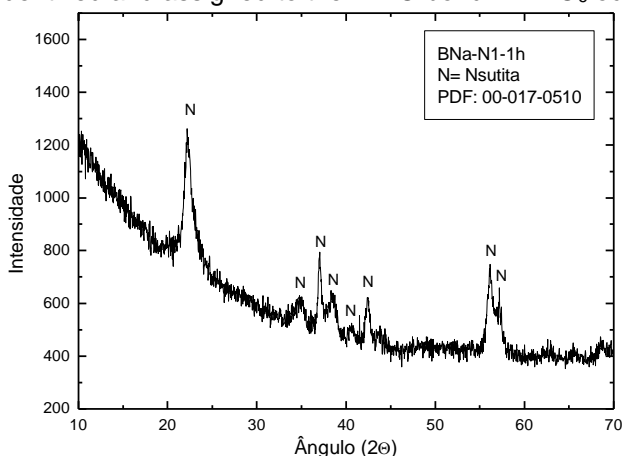
Keywords: *Nsutite, Synthesis, Microwave, Manganese oxide, Characterization.*

Highlights

A fast microwave assisted hydrothermal synthesis have been described. Layered octahedral manganese oxide has been employed as starting material.

Abstract

Nsutite-type material (NM) is important phase due its electrochemical, magnetic, supercapacitance and catalytic properties. In this work, a new process to synthesis tunnel manganese oxide (nsutite) using a microwave assisted technique (MW-HT) and layered manganese as starting material is presented. A time reaction of 15 minutes resulted in the synthesis of crystalline phase, shorter to 24 h observed in a conventional synthesis. The final product was investigated by X-ray diffraction (XRD), BET analysis, Scanning Electron Microscopy, and Infrared spectroscopy (FTIR). All observed XRD peaks could be related to those of pure hexagonal nsutite (space group P) with lattice parameters $a=b$ 9.55 Å, and $c=4.40$ Å. The N₂ physisorption analysis showed that the product synthesized in 15 min presented the highest BET surface area (59.571 m²/g) and pore volume (0.2491 cm³/g) than in 24 h (35,764 m²/g and 0.1339 cm³/g) by conventional route. The SEM morphology showed that NM rods were produced. FTIR bands at 1115, 725, 575, 520 and 464 cm⁻¹ were identified and assigned to the Mn-O bond in MnO₆ octahedra.



Acknowledgments

This work was supported by National Council for Scientific and Technological Development (No. 420169) and Coordination for the Improvement of Higher Education Personnel (No. 88881.160695), IFMA and UFOPA.

Área: TEC

Nº de Inscrição: **01092**

PRODUCTION AND ANALYSIS OF BIODIESEL OBTAINED FROM DIFFERENT AGRICULTURAL WASTE

Monique KK. Figueiredo (PQ),¹ **Jonatan V. da Conceição (TM)**¹, **Cibelly M. S. de Sales (TM)**², **Luana M. de Oliveira (TM)**³.

monique.figueiredo@ifrj.edu.br

¹Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia do Rio de Janeiro, Campus Duque de Caxias, IFRJ;

Key words: *Biodiesel, Agricultural Waste, Transesterification, Energy.*

Highlights

Use of agricultural waste for the production of biodiesel.

Production and analysis of biodiesel quality parameters using oils from agricultural waste and different routes.

Resumo/Abstract

Fossil fuels currently used on a large scale as a source of energy are finite and extremely polluting resources. Thus, the search for alternative fuels for clean and renewable energy, called biofuels, has been intensified due to the expectation of decreasing oil reserves, high oil prices and environmental pollution problems caused by the emission of gases from the burning of fossil fuels. To overcome this situation, the study of biofuels has been shown as a viable alternative for the solution of these problems.

Therefore, the objective of the search was to produce biodiesel from transesterification reaction of the soursop seed, grape seed, mutamba seed, apricot seed, and orange peel oil as an alternative to the companies that generate this waste, which could produce this biodiesel and take advantage of it as an own energy alternative. Minimizing the environmental impacts from the use of fossil fuels, and minimizing the socioeconomic impacts of companies that generate waste. Six methods of biodiesel production were utilized, all using the reflux method, in order to identify which method obtained the highest percentage of esters. Within these six methods, what varied was the type of alcohol, whether the reaction would occur in one or two stages and the use of methoxide ready without water and the preparation in the laboratory. After identifying which were the most efficient methods, for each biomass studied, through the NMR analysis, triplicates of the same were done. In these final biodiesels, acid number, cloud point, flow point, kinematic viscosity, aspect and NMR were analyzed, in this last have result in the ester content in biodiesel above 95.6%. According to the results it can be said that the production methods are feasible, since the ester contents were satisfactory and the parameters analyzed were within the ANP specification (Brazilian standards).

Agradecimentos/Acknowledgments

IFRJ - Prociência /CNPq/ Capes

Spectrophotometric method for quantification of the reducing capacity of teas based on the formation of Fe(II)/1,10-phenanthroline complex

Aline Freire Gouveia de Amorim (IC), Cícera Pimenta Marcelino (PG), Horacio D. Moya (PQ)^{1*}

afreire310@hotmail.com; cicera.pimenta@gmail.com; horacio.moya@fmabc.br

¹ Faculdade de Medicina da Fundação do ABC – CEPES (Centro de Estudos, Pesquisa, Prevenção e Tratamento em Saúde) – CEP – 09060-650 – Santo André – SP

Key words: Antioxidant capacity, teas, 1,10-phenanthroline, Fe(II), spectrophotometry.

Highlights

Antioxidant compounds reduce Fe(III) to Fe(II) which in presence of 1,10-phenanthroline originate the Fe(phen)₃²⁺ complex that was used then to quantify the reducing capacity of six commercial teas.

Abstract

The suggested method is based on the reduction of Fe(III) to Fe(II) (acetate buffer; pH 4.6) by reducing compounds in solution containing 1,10-phenanthroline (*phen*, Fig. 1)^[1]. Absorbance values recorded at 511 nm characteristic of the orange-reddish Fe(phen)₃²⁺ complex formed after the incubation period (20 min; 80°C) were used to determine the total reducing capacity (TRC) of six commercial teas. These TRC results (expressed as equivalents of ascorbic acid) were compared with those obtained with the DPPH^{•+} (2,2-diphenyl-1-picrylhydrazyl) reagent^[2] and with the polyphenol content (PC) obtained with the Folin-Ciocalteu reagent^[3]. For the analyzed samples (Table 1) the TRC values obtained with the Fe(phen)₃²⁺ complex showed an excellent positive correlation with those obtained using the DPPH^{•+} ($r^2 = 0.950$) indicating that both methods

can be used to quantify the reducing capacity of this kind of sample.

Table 1 - Total reducing capacity values and polyphenol content for the teas analyzed

| Tea | Scientific name | DPPH ^(a) | Fe(phen) ₃ ²⁺ ^(b) | PC ^(c) |
|----------|-------------------------------------|---------------------|--|-------------------|
| White | <i>Camellia sinensis</i> L. | 1.09 ± 0.05 | 11.84 ± 0.28 | 133 ± 6.0 |
| White | <i>Camellia sinensis</i> L. | 1.07 ± 0.07 | 11.16 ± 0.45 | 129 ± 3.0 |
| Carqueja | <i>Baccharis trimera</i> L. | 15.2 ± 0.34 | 1.86 ± 0.03 | 23 ± 0.6 |
| Mint | <i>Mentha piperita</i> L. | 7.72 ± 0.20 | 4.28 ± 0.43 | 57 ± 2.4 |
| Mate | <i>Ilex paraguariensis</i> St. Hil. | 3.62 ± 0.16 | 5.53 ± 0.85 | 73 ± 1.4 |
| Black | <i>Camellia sinensis</i> L. | 3.19 ± 0.14 | 6.81 ± 0.64 | 70 ± 1.3 |

a = g dry material (DM) /g DPPH; b = g DM /g AA; c = g pyrogalllic acid/100 g DM

Both TRC values (Fe(phen)₃²⁺ and DPPH^{•+}) also show good agreement with the PC quantified with the Folin-Ciocalteu reagent ($r^2 = 0.974$ and $r^2 = 0.942$, respectively) suggesting that the polyphenols are responsible for the reducing capacity found in these samples. The suggested method is simple, easy to perform, reproducible and can be used in routine analysis considering that reagents are not expensive and equipment and materials are commonly available in most laboratories. In addition, the results obtained with the proposed procedure justify its use in the determination of the reduction capacity of other polyphenols-rich samples (e.g. wine, beers and other beverages).

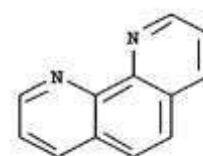


Figure 1

- 1) Santo, M. G., Nunez, C. V. and Moya, H. D. 2013. *Advances in Biological Chemistry*, 3, 525-535.
- 2) Sánchez-Moreno, C., Larrauri, J.A. and Saura-Calixto, F. 1998. *Journal of the Science of Food and Agriculture*, 76, 270-276.
- 3) Brazilian Pharmacopoeia, 5th. ed., VI, Brasília, ANVISA, 2010, 484.

Acknowledgments

Financial support: FAPESP (Projeto nº 2017/12714-9).

Área: _ORG_____ N° de Inscrição: _01094_

Serum biomarker discovery for theileriosis diagnosis based on chemometric approaches using Nano-LC-ESI targeted proteomics data

Leticia G. De Pontes (PQ),^{1*} Asier Galan (PQ),² Petra Nižić Bilić (PQ),² Josipa Kuleš (PQ),² Nicolas Guillemin (PQ),² Anita Horvatić (PQ),² Renato L. Carneiro (PQ),³ Vladimir Mrljakc (PQ),² Peter David Eckersall (PQ),⁴ Rui S. Ferreira Jr (PQ),⁵ Benedito Barraviera (PQ),⁵ Lucilene D. dos Santos (PQ),⁵

leticiapontesproteomica@gmail.com

¹Department of Chemistry and Molecular Physics, USP; ²Department of Clinic for Internal Disease, Croatia; ³Department of Chemistry, UFSCAR; ⁴Department of Biodiversity Animal Health and Comparative Medicine, Scotland; ⁵

Keywords: Biomarker; Theileriosis; Carbamoyl-phosphate; Proteomics; Cofactor binding; Pentose phosphate

Highlights

- Multivariate data analysis of 12 metabolites from two carbamoyl-phosphate related metabolic pathways was carried out; - Cofactor binding and Pentose phosphate found to be potential biomarkers for theileriosis diagnosis; - Cofactor binding and Pentose phosphate add 14% accuracy for theileriosis diagnosis.

Abstract

Theileria is an intracellular parasite that causes active forms of *bubalus bubalis* theileriosis, occurs in southern Europe, North Africa, South America and most of Asia. Theileriosis is a serious disease in which between 76% and 82% of infected animals die. The disease causes high mortality and reduced yield of meat and milk in the survivors. Much effort has been dedicated to serum biomarker discovery for theileriosis diagnosis. For this purpose, this paper reports the use of mass spectrometry coupled with multivariate analysis as an untargeted proteomic approach to classifying 57 blood samples into negative for theileriosis or positive for theileriosis (n = 23) or positive for theileriosis (n = 34). The serum was depleted (albumin) and directly analyzed with mass spectrometry for untargeted proteomics, followed by multivariate analysis based on the principal component analysis (PCA) (Fig.1) and genetic algorithm (GA) with support vector machines (SVM), linear (LDA) and quadratic (QDA) discriminant analysis. PCA-SVM models outperformed LDA and QDA results, achieving sensitivity values of 82.4%. Two types of proteins contributes to the distinction between positive for theileriose and negative for the former condition and Pentose phosphate for the latter. However, the precise roles of Pentose phosphate this process are unknown. These proteins together allow the samples classification into a definite diagnosis of the disease. Our results demonstrate: 1) Multivariate data analysis of 12 metabolites from two carbamoyl-phosphate related metabolic pathways was carried out; 2) Cofactor binding and Pentose phosphate found to be potential biomarkers for theileriosis diagnosis; 3) Cofactor binding and Pentose phosphate add 14% accuracy for theileriosis diagnosis. We anticipate our assay to be a starting point for more sophisticated models. With these findings highlight the potentiality of using mass spectrometry associated with chemometrics to discriminate between healthy animals and those suffering from theileriose.

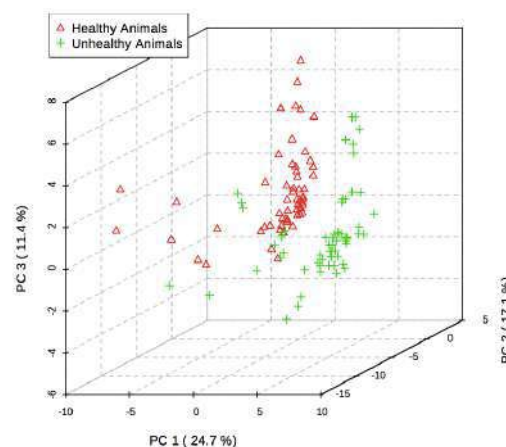


Figure 1 - Multivariate analysis based on the principal component analysis (PCA)

Acknowledgments

This study was supported, in part, by a grant from the Foundation for Research Support of the State of Sao Paulo, (FAPESP) Proc. No 2014/13299-7 (LDS); CNPq (National Counsel of Technological and Scientific Development) Proc. No. 458919/2014-4 (LDS) and 563582/2010- 3 (BB). We acknowledge the Department of Clinic-Croatia, for its support with the mass spectrometric analysis.

Síntese, caracterização e potencial catalítico em reações de bromação oxidativa de oxidocompostos de vanádio(IV)

Rúbia Camila Ronqui Bottini (PG),¹ Francieli S. Santana (TC),¹ Giovana G. Nunes (PQ),^{1*} Jaísa F. Soares (PQ)¹

rubia.bottini@gmail.com; nunesgg@ufpr.br

¹Departamento de Química, UFPR, Curitiba, PR, Brasil

Palavras Chave: vanádio(IV), oxidocompostos, bromoperoxidase, catálise, bromação oxidativa.

Highlights

Synthesis, characterization of vanadium(IV) oxidocompounds and catalytic potencial to oxidative bromination. Two heteroleptic oxidovanadium(IV) complexes have been synthesized and characterized by XRD-single crystal and spectroscopic methods. Both compounds were active to the bromination of the phenol red.

Resumo/Abstract

Complexos de vanádio têm sido empregados como modelos funcionais e estruturais do sítio ativo de bromoperoxidasas dependentes de vanádio.¹ Visando tal aplicação foram preparados dois complexos de oxidovanádio(IV) heterolépticos contendo o ligante 2,2-bipiridina, variando o ligante auxiliar entre oxalato e D, L-malato. O complexo mononuclear $[\text{VO}(\text{C}_4\text{H}_4\text{O}_5)(\text{C}_{10}\text{H}_8\text{N}_2)] \cdot \text{H}_2\text{O}$ (**A**) foi preparado conforme descrito na literatura.² A análise de **A** por IV, DRX-monocristal e análise elementar confirmam a obtenção do produto esperado. A reação entre $[\text{VO}(\text{acac})_2]$, ácido oxálico e 2,2'-bipiridina (1:1:1) produziu cristais verde-escuros (**B**) com rendimento de 78%. A análise de DRX-monocristal revelou a obtenção do complexo binuclear $[\text{V}_2\text{O}_3(\text{C}_2\text{O}_4)(\text{C}_5\text{H}_8\text{O}_2)(\text{C}_{10}\text{H}_8\text{N}_2)_2] \cdot 2\text{H}_2\text{O}$, em que os dois centros de vanádio, possuem geometria octaédrica distorcida e estão unidos por um grupo oxido (O^{2-}) em ponte. A estrutura de **B** apresenta ligações de hidrogênio (do tipo C-H...O) e empilhamento π - π (intra- e intermolecular) entre os anéis aromáticos, com distância entre os centroides de cerca de 3,8 Å. Os resultados de análise elementar (% m/m: C, 46,72; H, 4,50; N, 8,09 e V, 12,62) foram compatíveis com os valores teóricos para a estrutura determinada por DRX. O espectro de IV de **B** apresenta bandas em 981, 889, 798, 766, 473, 1717 e 1474 cm^{-1} atribuídas à $\nu(\text{V}=\text{O})$, $\nu(\text{V}-\text{O})$, $\nu_{\text{as}}(\text{V}-\text{O}-\text{V})$, $\nu_{\text{s}}(\text{V}-\text{O}-\text{V})$ e $\delta(\text{V}-\text{O}-\text{V})$, $\nu(\text{C}=\text{O})$ e $\nu(\text{C}=\text{N})$, respectivamente. O espectro eletrônico de **B** apresenta uma banda intensa em 306 nm com um ombro em aproximadamente 420 nm atribuídos à transição característica do ligante 2,2'-bipiridina do tipo π - π e às transições d-d entre os centros metálicos, respectivamente. O espectro de RPE, 77K, do sólido macerado apresentou um sinal alargado em $g = 1,98$ ($\Delta_{\text{p-p}} = 22,9$ mT), típico de espécies binucleares de vanádio(IV). Espectros registrados em solução com metanol e dimetilsulfóxido a temperatura ambiente, apresentam 8 linhas características de espécies mononucleares de vanádio(IV) (^{51}V com $I = 7/2$), sugerindo que a estrutura binuclear de **B** não seja mantida em solução. Estudos preliminares do potencial catalítico para promover a bromação do vermelho de fenol foram realizados em meio levemente ácido a 30°C na presença de H_2O_2 e KBr. A reação foi acompanhada por espectroscopia eletrônica monitorando o aumento da absorvância em 592 nm, relativa a formação do azul de bromofenol. Para **A**, utilizando-se uma concentração de vanádio de $7,2 \times 10^{-4} \text{ mol} \cdot \text{L}^{-1}$, observou-se 100% de decaimento após 1 h e 40 min, indicando uma alta formação do produto azul de bromofenol. Os ensaios realizados com **B** ($7,2 \times 10^{-4} \text{ mol} \cdot \text{L}^{-1}$ em V), também mostraram o mesmo perfil nos espectros eletrônicos porém o consumo total do vermelho de fenol ocorreu após 1h e 25 min, sugerindo que este possa ser mais eficiente que **A**. Os produtos **A** e **B** foram obtidos puros e bom rendimento pelas rotas sintéticas utilizadas. Ambos apresentaram potencial para a utilização como catalisador em reações de bromação e serão avaliados em outros substratos.

[1] CRANS, D.C.; CHATTERJEE, P.B. *Vanadium Biochemistry*. Elsevier Ltd., 2013.

[2] CHEN, C.Y., et al. *Journal of Inorganic Biochemistry*, v. 141, p. 114-120, 2014.

Agradecimentos/Acknowledgments

UFPR, CNPq, CAPES, Fundação Araucária, PROEX, LAMAQ-UTFPR.

pH na água de chuva de uma região canavieira desde 2004

Jacques Florêncio (IC),¹ Dayane C. O. Reis (PG),¹ Maria Lúcia A. M. Campos (PQ),^{1*}
jacquesflorencio@usp.br; lcampos@ffclrp.usp.br

¹Departamento de Química, Faculdade de Filosofia, Ciências e Letras de Ribeirão Preto, USP

Palavras Chave: (pH, Água de chuva, Ribeirão Preto).

Highlights

Rainwater pH from a sugar cane plantation region since 2004

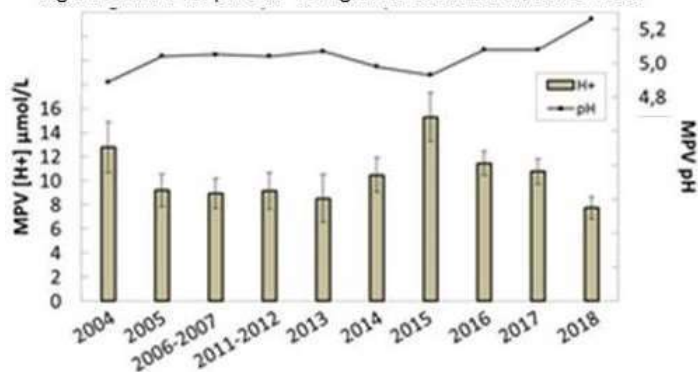
The recent decrease in H⁺ concentration observed in rainwater could be attributed to the improvement of vehicular combustion and fuel, leading to a decrease on the emission of acidic gases.

Resumo/Abstract

O estado de São Paulo é responsável por 60% de todo etanol produzido do país. Em 2018 cerca de 97% da colheita da cana no estado foi realizada de forma mecanizada, dispensando a queima da palha. No entanto, ainda há queima de biomassa na região devido à utilização do bagaço para geração de energia, queima da biomassa para limpeza de terreno, e ainda, incêndios rurais acidentais ou provocados. Os gases NO_x, SO_x e ácidos orgânicos emitidos, acidificam a atmosfera e a água de chuva. Este trabalho tem como objetivo dar continuidade a uma série temporal iniciada em 2004 para avaliar se houve alteração significativa na concentração de H⁺ na água de chuva da cidade de Ribeirão Preto – SP.

Foram coletadas 618 amostras de chuva por evento no campus da USP – Ribeirão Preto, de 2004 a 2018. O pH foi medido em amostras sem filtrar, e após calibração do pHmetro com solução de HCl ($1 \times 10^{-4} \text{ mol L}^{-1}$). A faixa de pH variou de 4,09 a 7,24, com média ponderada pelo volume (MPV) de 5,03. Os eventos que tiveram pH menor que 5,6 somaram 79% do total (n=490), demonstrando que há importantes fontes de acidez na atmosfera regional. A concentração MPV de H⁺ anual variou de 7,74 a 15,25 $\mu\text{mol L}^{-1}$ (Figura 1), havendo uma queda na concentração de H⁺ de 2015 a 2018 de 50%, apesar do aumento da frota veicular da região de 515.200 para 532.814 mil. Não houve variação significativa na concentração de H⁺ entre os períodos de safra (seca) e entre-safra (chuva) demonstrando que não é possível avaliar a contribuição de espécies ácidas emitidas pela queima de biomassa. Nosso grupo de pesquisa observou uma redução na concentração de NO₃⁻ e SO₄²⁻ na água de chuva em período similar¹ que foi atribuída à diminuição do enxofre nos combustíveis fósseis e ao uso de catalisadores automotivos que levam a conversão do NO₂ em N₂. Fatores como ressuspensão do solo, rico em calcário e emissão de gás amônia, também podem influenciar na concentração final de H⁺ na atmosfera, entretanto não houve correlação linear significativa entre os íons H⁺ e os íons Ca²⁺ ($r = 0,170 \text{ n} = 250$) ou entre H⁺ e NH₄⁺ ($r = 0,241 \text{ n} = 250$), na água de chuva de Ribeirão Preto durante o período estudado. Portanto, nossos resultados indicam que a diminuição recente na concentração de H⁺ observada na água de chuva pode ser atribuída a uma menor emissão de gases ácidos de origem veicular.

Figura 1: MPV de pH e H⁺ na água de chuva de Ribeirão Preto



1. SCARAMBONI et al., 2018. Investigating hydrogen peroxide in rainwater of a typical midsized city in tropical Brazil using a novel application of a fluorometric method. Atmospheric Environment 176 (2018) 201-208.

Agradecimentos/Acknowledgments

CNPq, Fapesp (2018/16554-9)

Synthesis, cholinesterase inhibition and molecular modeling study of lophine-benzylamine hybrids

Viktor S. Câmara (PG),¹ **Ana J. Soares** (PG),¹ **Marco A. Ceschi** (PQ),^{1*} **Rafael F. Dantas** (PQ),² **Floriano P. Silva-Jr** (PQ),² **Mario R. Senger** (PQ),² **Cristiane M.C. Salles** (PQ),³ **Isabella A. Guedes** (PQ),⁴ **Laurent E. Dardenne** (PQ).⁴

viktor.saraiva@gmail.com; **mceschi@iq.ufrgs.br**

¹Departamento de Química Orgânica, UFRGS; ²Laboratório de Bioquímica Experimental e Computacional de Fármacos, Fiocruz; ³Instituto de Ciências Exatas, UFRRJ; ⁴Laboratório Nacional de Computação Científica, LNCC.

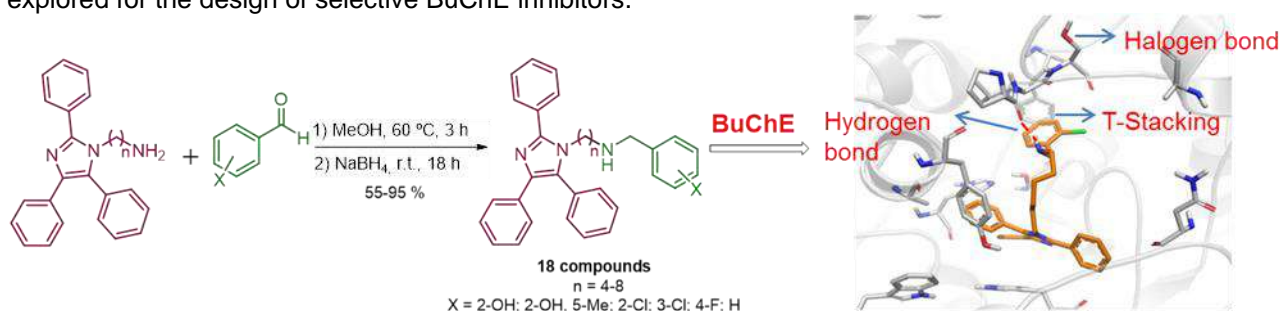
Palavras Chave: Alzheimer, Cholinesterases, Lophine-benzylamine, Molecular Modeling.

Highlights

Novel series of lophine benzylamine were synthesized through reductive amination reaction. All hybrids selectively inhibit the BuChE enzyme. Molecular docking studies were performed.

Resumo/Abstract

Alzheimer's disease (AD) is a progressive neurodegenerative disorder that causes irreversible loss of brain functions. A strategy for palliative treatment of AD is restore acetylcholine levels, using cholinesterase inhibitors (ChEI). Tacrine was the first ChEI approved by the FDA for the treatment of AD, however it was removed from the market due to its hepatotoxicity.¹ Currently, there are four drugs used to treat AD, but none of them is effective in the long term. Due to multifactorial character of AD, the syntheses of molecular hybrids are highlighted in the literature.² The hybrids can act as ChEIs and present further biological activity of interest for the AD treatment. In this way, lophine, a structural derivative of imidazole, can be a nucleus for the synthesis of novel compounds for the treatment of Alzheimer's disease.³ In this work, a novel series of lophine-benzylamine hybrids were design and synthesized to act as ChEIs. First, the synthesis of the intermediate *N*-alkylaminolophine through a multicomponent reaction between benzaldehyde, benzyl, ammonium acetate and alkyl diamines using a microwave furnace was optimized. The hybrids were synthesized through reductive amination reaction, between *N*-alkylaminolophine and aromatic aldehydes. All the hybrids selectively inhibited BuChE over AChE with IC₅₀ values in low micromolar concentration range. According to the docking results, the lophine moiety is located at the bottom of the gorge forming diverse stacking interactions. Due to the lack of aromatic residues at the peripheral anionic *site* in the BuChE, the benzylamine moiety is located at the acyl pocket of the enzyme. As seen in this work, the acyl pocket can be explored for the design of selective BuChE inhibitors.⁴



¹ Lopes, J. P. B. et. al. *Journal of the Brazilian Chemical Society* **2017**, 28 (11), 2218-2228.

² Ceschi, M. A. et. al. *European Journal of Medicinal Chemistry* **2016**, 121, 758-772.

³ da Costa, J. S. et. al. *European Journal of Medicinal Chemistry* **2013**, 62, 556-563.

⁴ Ceschi, M. A. et. al. Número do registro: BR10201702760, Depósito: 20/12/2017

Agradecimentos/Acknowledgments



Área: INO

Nº de Inscrição: 01099

Luminescence studies of a Zn(II) complex from ligands containing the 1,3,4-oxadiazole heterocycle for application in molecular biology

Mayana Balboena Bregalda (IC),¹ Tiago P. de Camargo (PQ),²

mayana1401@gmail.com; tiagocamargo@utfpr.edu.br

^{1,2} Departamento de Química e Biologia UTFPR

Palavras Chave: *Bioinorganic chemistry, Luminescent Complexes, Fluorescence*

Highlights

The simple strategy for the design of luminescent coordination compounds is to organize metal centers with chromophore linkers forming mononuclear or binuclear compounds, thereby creating a wide variety of complexes with luminescent properties that may vary according to the electronic configuration of the metal. This project aims to prepare a mononuclear zinc complex with 1,3,4 oxadiazole ligand.

Resumo/Abstract

Highly luminescent coordination compounds have recently attracted much attention due to interest in applications such as biological imaging, photochemical catalysis, highly efficient luminescent devices and luminescent sensors. The simple strategy for the design of luminescent coordination compounds is to organize metal centers with chromophore linkers forming mononuclear or binuclear compounds, thereby creating a wide variety of complexes with luminescent properties that may vary according to the electronic configuration of the metal. To take a step further in understanding life at the molecular level intelligent probes that detect, quantify or show the image of key components (DNA, proteins, small molecules or metal cations) involved in specific biological processes have been studied [1]. Aiming at this, this project aims to prepare a mononuclear zinc complex with 1,3,4 oxadiazole binders containing a naphthalimide chromophore group. The ligand was synthesized in 3 steps [2]: i) 4- nitrobenzoyl chloride and 5-(2-pyridyl)-tetrazole (formation of the oxadiazole heterocycle); ii) reduction of the nitro with SnCl₂; iii) protection of the amino group using the naphthalic anhydride group. The complex was prepared by the addition of a methanolic solution of zinc perchlorate to a solution of the binder. After a few days a light-yellow solid was isolated in 65% yield. The ligand and the Zn(II) complex were characterized by ¹H and ¹³C-NMR, IR and Uv-vis spectroscopy and mass spectrometry (ESI-MS). The photochemical properties of the complex were studied by uv-vis spectroscopy and fluorescence, where the complex presents, in solution, a strong green luminescence emitting at approximately 660 nm. In addition, interaction studies of the complex with DNA are underway, where this interaction will be monitored by fluorescence spectroscopy.

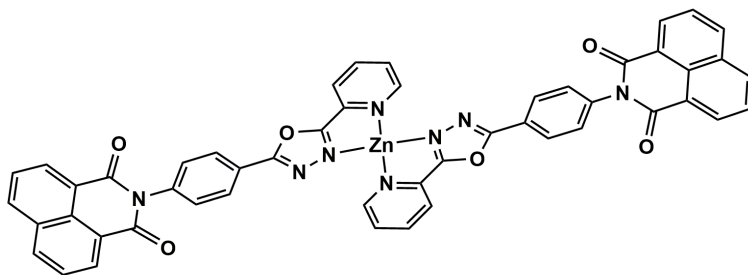


Figure 1 - Proposed structure for the Zn complex

Agradecimentos/Acknowledgments

Universidade Tecnológica Federal do Paraná (UTFPR), UFPR, UFSC, Capes, Cnpq and Araucaria foundation.

Referências/References

- [1] Dylan W Domaille, NATURE CHEMICAL BIOLOGY, 2008.
- [2] WESTPHAL, Eduard. Síntese de cristais líquidos funcionalizados contendo o heterociclo 1,3,4-oxadiazol. 2013. 363 f. Tese (Doutorado) - Curso de Química, Universidade Federal de Santa Catarina, Florianópolis, 2013.

Trends in Green Chemistry Research

Leonardo Victor Marcelino (PG),^{1*} Carlos Alberto Marques (PQ)²

leovmarcelino@gmail.com

¹ Pós-Graduação em Educação Científica e Tecnológica, UFSC; ² Departamento de Metodologia de Ensino, UFSC

Palavras Chave: *Green Chemistry, Bibliometry, Cocitation Analysis, Literature Review.*

Highlights

We investigate over 14,000 papers on Green Chemistry and their references by cocitation analysis, generating a panorama of trends in Green Chemistry research from 1990 until 2017.

Resumo/Abstract

Green Chemistry (GC) is a growing field with huge accumulated publications, hampering qualitative descriptions of its trends. We resorted to cocitation analysis¹ to address a large amount of data, presenting a panorama of GC research. The technique relies on the co-occurrence of citations to a set of references to investigate research fronts² (a joint of fresh, highly cited papers around a same theme) associated to an intellectual base (a group of cocited documents that supports the knowledge in the front). We selected 14,142 documents (Fig. 1) and used the CiteSpace² software to perform the analysis, generating a network of publications in GC, finding 16 trends in GC research of which we present the 9 most relevant in Table 1. The oldest and biggest trends arose in 1999 until recent years: *Characterization of GC; Metallic and Microwave assisted Catalysis; Organic Reaction in Aqueous Media*, and; *CO₂ as Substrate. Solid Acid Catalysis* and *Ionic Liquids* are trends influent until 2010. *Biomass Transformation*

peaked between 2010-2014. *Deep Eutectic Solvents* and *Lignin Valorization* are very fresh trends. This kind of research is important to assess the history and evolution of GC and ongoing investigation will deepen the analysis of the trends presented.

Figure 1: Data retrieval information.

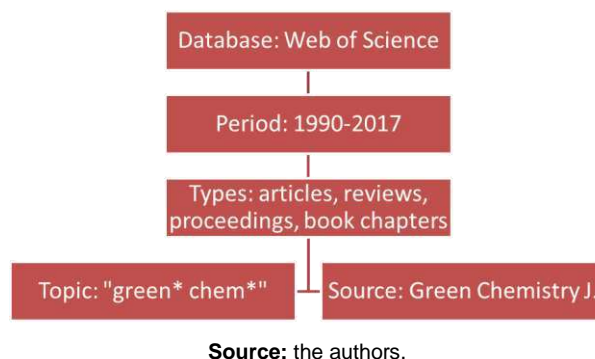


Table 1: Trends of Green Chemistry research and their sizes and periods of action.

| Trends | Intellectual Base | | | Research Front | | |
|--|-------------------|-----------|-----------|----------------|-----------|-----------|
| | Size | Mean Year | Period | Size | Mean Year | Period |
| Lignin Valorization | 10 | 2013 | 2010-2016 | 7 | 2017 | 2017 |
| Deep Eutetic Solvents | 6 | 2012 | 2003-2016 | 10 | 2015 | 2014-2017 |
| Solid Acids Catalysis | 12 | 2004 | 2002-2017 | 10 | 2010 | 2010 |
| Ionic Liquids | 55 | 2000 | 1982-2011 | 17 | 2004 | 2002-2010 |
| CO ₂ as Substrate | 28 | 2002 | 1981-2015 | 18 | 2012 | 1999-2017 |
| Organic Reactions in Aqueous Media | 31 | 2002 | 1980-2014 | 30 | 2009 | 1999-2017 |
| Metallic- and Microwave Assis. Cataly. | 38 | 2000 | 1986-2013 | 30 | 2008 | 1999-2014 |
| Biomass Transformation | 33 | 2009 | 2002-2014 | 34 | 2011 | 2010-2014 |
| Characterization of GC | 45 | 2004 | 1991-2016 | 56 | 2010 | 1999-2017 |

Source: the authors.

Acknowledgement: This research was supported by Capes/PDSE/Process n. 88881.189651/2018-0 and CNPq. We thank to Adilson L. Pinto (UFSC/Brazil), Dr., and Chaomei Chen (Drexel Uni., USA), Dr., for the technical aid.

¹ GRÁCIO, M. C. C. Acoplamento bibliográfico e análise de cocitação: revisão teórico-conceitual. **Enc. Bibli.**, v. 21, n. 47, p. 82–99, 12 set. 2016.

² CHEN, C. CiteSpace II: Detecting and visualizing emerging trends and transient patterns in scientific literature. **J. Assoc. Inf. Sci. Technol.**, v. 57, n. 3, p. 359–377, 1 fev. 2006.

Emerging contaminants in membrane bioreactor (MBR) wastewater treatment & reuse plant as performance indicators.

Rafaela G. Machado (PG),^{1*} Josilei da S. Ferreira (PG),¹ Guilherme M. Grosseli (TC),¹ Roberta C. Urban (PQ),¹ Pedro Sergio Fadini (PQ).¹

psfadini@ufscar.br; rafaela_machado08@hotmail.com

¹Chemistry department, UFSCar.

Keywords: *Emerging contaminants, MBR, Water Reuse.*

Highlights

Quantification of emerging contaminants in sewage
Rate of removal of emergent contaminants after treatment in MBR

Abstract

The emergent contaminants (EC) presence in aquatic environments associated to water scarcity episodes has generated a scenario of insecurity regarding to water supply. In this scenario, there is a concerning about the concentration levels of EC in the effluent of the Wastewater Treatment & Reuse Plant (WWTRP) Capivari II, Campinas-SP, equipped with a bioreactor coupled to membrane filtration (MBR), aiming reclaimed water production.

Monthly sampling were conducted and EC quantification carried out using the GC-MS after SPE. QA/QC procedures employed isotopically labeled compounds and recovery tests.

Concentrations values of the EC (ng L⁻¹) in the raw sewage ranged from: 95,153 – 146,927 for caffeine, 595 – 29,017 for paracetamol, 564 – 4,717 for ibuprofen, 416 – 2,248 for 1-hydroxyibuprofen, 6,985 – 38,246 for 2-hydroxyibuprofen, 1,566 – 21,560 for carboxyibuprofen, 346 – 1,329 for diclofenac, 1,551 – 6,167 for 1naproxen, 117 – 660 for carbamazepine, 234 – 33,030 for 10,11-dihydroxycarbamazepine, 1,217 – 2,638 for 2-hydroxycarbamazepine, 392 – 3,758 for triclosan and 1,113 – 3,543 for methyl triclosan.

Some compounds had mean removal values above 85%, such as caffeine (99.7%), paracetamol (85.1%), ibuprofen (96.4%) and its metabolites 1-hydroxyibuprofen (91.3%) and 2-hydroxyibuprofen (96.5%), naproxen (89.5%), triclosan (96.7%) and methyl triclosan (100%); being therefore suitable compounds for degradation in this kind of WWTRP. The high triclosan removal is not only a result of a degradation process in the water medium, but also the consequence of sorption in the sludge. Carbamazepine metabolites had lower removal values than the aforementioned compounds, showing removal values of 61% for 10,11-dihydroxycarbamazepine and 55% for 2-hydroxycarbamazepine. Other contaminants exhibited persistent behavior with increases in their concentrations, such as carbamazepine and diclofenac, what is denoted by negative removal values, as is usually done in the literature of the area.

Removal values, ranging from -91% to -2% and -41% to 51% were observed for carbamazepine and diclofenac, respectively. The recalcitrance of certain emerging contaminants are related to its chemical structures, e.g. conjugated heterocyclic compounds, such as carbamazepine, and the presence of chlorine in diclofenac chemical structure, difficult the degradation by microbial activity^{1,2}. Increases in concentration values during process are probably related (i) to the EC originally accumulated in aggregates and/or enclosed in fecal particles that are released to the liquid phase during biotic or abiotic treatment process or (ii) related to conjugated forms of ECs that are back-transformed or de-conjugated into parental compounds through either biotic and/or abiotic processes^{3,4}.

¹Alvarino, T.; Suarez, S.; Lema, J. M.; Omil, F. *Journal of Hazardous Materials*, 278, 506–513, 2014.

²Tran, N. H.; Uruse, T.; Ngo, H. H.; Hu, J.; Ong, S. L. *Bioresource Technology*, 146, 721–731, 2013.

³ Archer, E., Petrie, B., Kasprzyk-Hodern, B., Wolfaardt, G.M. *Chemosphere*, 174, 437-446, 2017.

⁴ Blair, B., Nikolaus, A., Hedman, C., Klaper, R., Grundl, T., *Chemosphere*, 134, 395-401, 2015

Acknowledgments

CAPES (1772630), CAPES finance code 001, CNPq, FAPESP, INCTAA processo 465768/2014-8

Área: ORG*(Inserir a sigla da seção científica para qual o resumo será submetido. Ex: ORG, BEA, CAT)***Nº de Inscrição: 01102***(Inserir o número de inscrição do autor que fez a submissão)***Sulfa-Michael Additions and Intramolecular Insertion Reactions of α,β -Unsaturated β -Ketosulfoxonium Ylides****Eduardo F. Mizobuchi (IC)¹, Antonio C. B. Burtoloso (PQ)¹****eduardo.mizobuchi@usp.br; antonio@iqsc.usp.br**¹Instituto de Química de São Carlos IQSC- USP

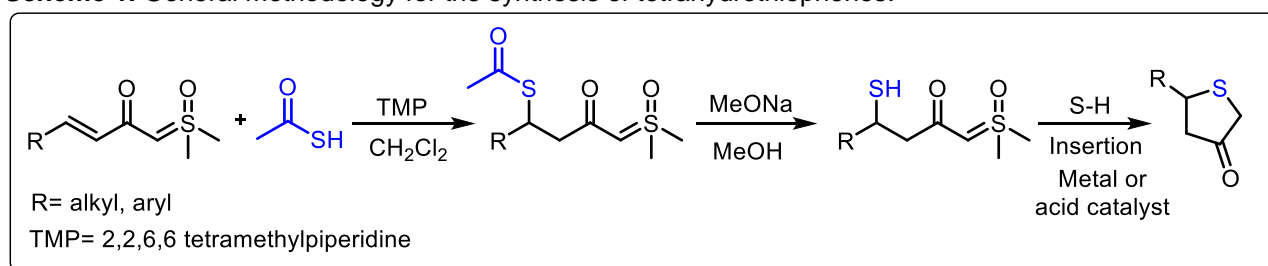
Palavras Chave: (Sulfur Ylides, Michael Addition, Insertion Reaction, Tetrahydrothiophene).

Highlights

A new methodology for the synthesis of tetrahydrothiophenes employing α,β -unsaturated β -ketosulfoxonium ylides is presented. The Michael adducts undergo deacylation reaction followed by S-H insertion via metal or acid catalysis furnishing substituted tetrahydrothiophenes.

Resumo/Abstract

Sulfoxonium ylides are an emerging class of compounds for the development of new synthetic methodologies. Organosulfur compounds are an important class of molecules present in many natural and synthetic products with biological activities. Out of the many classes of organosulfur compounds, the tetrahydrothiophene motif shows great interest due to its widespread occurrence in important molecules¹. Here we present a new methodology for the synthesis of tetrahydrothiophenes employing α,β -unsaturated β -ketosulfoxonium ylides as precursors in mild conditions. The α,β -unsaturated β -ketosulfoxonium ylides were prepared following the protocol developed by Corey and Chaykovsky² and underwent Michael Addition using thioacetic acid as Michael donor. The adducts underwent deacetylation reaction and the resulting adducts were submitted to intramolecular S-H insertion reactions employing metal or acid catalysts affording substituted tetrahydrothiophenes^{3, 4}.

Scheme 1. General methodology for the synthesis of tetrahydrothiophenes.

1. DAMANI, L. A. In Sulfur-containing drugs and related organic compounds: Chemistry, biochemistry, and toxicology; Ellis Horwood Ltd.: Chichester, U.K., 1989; Vol. 1, Part B, 2. COREY, E. J., CHAYKOVSKY, M. Dimethyloxosulfonium methylide and dimethylsulfonium methylide. Formation and application to organic synthesis. *J. Am. Chem. Soc.* 1965, 87, 1353-1364, 3. MANGION, I. K. et al. Iridium-Catalyzed X-H Insertions of Sulfoxonium Ylides. *Organic Letters*, v. 11, n. 16, p.3566-3569, 20 ago. 2009, 4. DIAS, RAFAEL M. P.; Burtoloso, Antonio C. B. Catalyst-Free Insertion of Sulfoxonium Ylides into Aryl Thiols. A Direct Preparation of β -Keto Thioethers. *Organic Letters*, v. 18, p. 3034-3037, 2016.

Agradecimentos/Acknowledgments

We thank Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de São Paulo (FAPESP) for the financial support (2013/25504-1, 2013/18009-4, and 2017/23329-9) and for the fellowship for E.F.M (2018/02920-3).

Synthesis of Oxoquinoline Ribonucleosides as Potential Inhibitors of Purine Nucleoside Phosphorylases

Rodrigo C. da Silva (PG),^{1*} Jhulia E. F. de Oliveira (IC),¹ Maria Cecília B. V. de Souza (PQ),¹ Marcela C. de Moraes (PQ),¹ Fernanda C. S. Boechat (PQ)¹.

rscilva@id.uff.br

¹Departamento de Química Orgânica - Universidade Federal Fluminense (UFF), Niterói, RJ, Brasil

Keywords: Quinolones, Nucleosides, PNP

Highlights

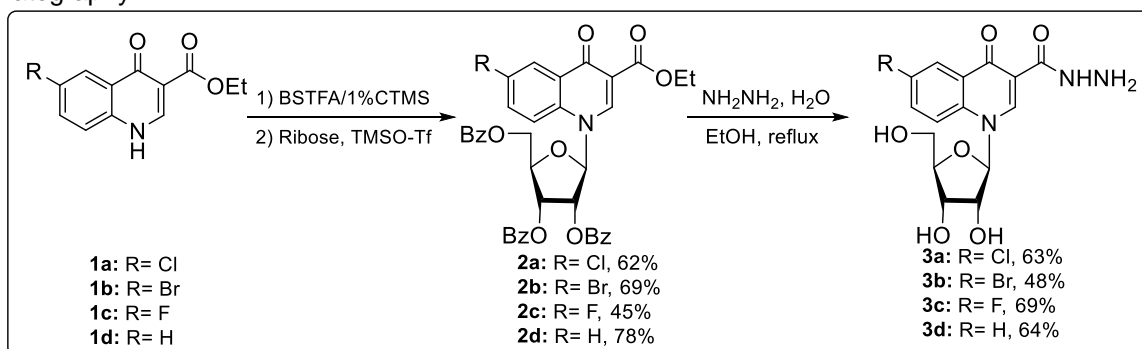
Oxoquinoline ribonucleosides were synthesized and tested as potential PNP inhibitors. They were obtained using a three-step synthetic route and were fully characterized by spectroscopic analysis.

Abstract

Purine nucleoside phosphorylase (PNP) is a key enzyme in the purine salvage pathway. PNP deficiency in humans leads to an increase in the concentration of d-guanosine in the blood, resulting in apoptosis of T cells, thus inhibition of this enzyme can be helpful for the treatment of T-cell leukemias and autoimmune disorders, including rheumatoid arthritis, and multiple sclerosis.¹

Because of their potential in clinical applications, many nucleoside analogues have been synthesized and tested as PNP inhibitors.² In this work, we have designed and synthesized a series of quinolone ribonucleosides **3a-d**. Protected ribonucleosides **2a-d** were prepared by previous silylation of oxoquinolines **1a-d** and subsequent condensation reaction with ribofuranose under TMSO-Tf catalysis.³ The target compounds **3a-d** were obtained in moderate yields by reacting protected ribonucleosides **2a-d** with a solution of hydrazine hydrate in ethanol under reflux.⁴ This methodology provides in a one-pot reaction the deprotection of ribofuranosyl moiety and also carbonyl nucleophilic reaction leading to carbohydrazide ribonucleoside derivatives.

The structures of all compounds were confirmed by spectral data (IR, 1D and 2D ¹H-NMR spectra). The activity of these compounds against the human PNP enzyme were evaluated by two-dimensional liquid chromatography.



References:

- [1] Wen, Q.-H., Wang, L.-H., Zeng, X.-A., Niu, D.-B., Wang, M.-S. *International Journal of Biological Macromolecules*. **2018**, 118, 588–598.
- [2] Makita, S., Maeshima, A.M., Maruyama, D., Izutsu, K., Tobinai, K. *OncoTargets and Therapy*. **2018**, 11, 2287–2293.
- [3] Canuto, C.V.B.S., Gomes, C.R.B., Marques, I.P., Faro, L.V., Santos, F.C., Souza, T.M.L., Cunha, A.C., Romeiro, G.A., Ferreira, V.F., de Souza, M.C.B.V. *Letters in Drug Design & Discovery*. **2007**, 4, 404-409
- [4] Cunha, A.C., Tributino, J.L.M., Miranda, A.L.P., Fraga, C.A.M., Barreiro, E.J. *Farmaco*. **2002**, 57,999-1007

Acknowledgments

CAPES, CNPq, FAPERJ. This study was financed in part by the Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior - Brasil (CAPES) - Finance Code 001.

Área: MAT

Nº de Inscrição: 01104

Estudo de composições de blendas poliméricas co-contínuas de Poliestireno/Polimetilmetacrilato e inclusão de cargas condutoras

Daniel Felipe Pietezak (IC),^{1*} Ermelinda Silvana Junckes (IC),¹ Fabio Andrés Silva Vega (PG)², Daniela Becker (PQ)², Carla Dalmolin (PQ)¹

danielfpj98@gmail.com;

¹ Departamento de Química, UDESC;

² Programa de Pós-Graduação em Ciência e Engenharia de Materiais –PPGCEM, UDESC.

Palavras Chave: Blendas co-contínuas, Polianilina, Nanotubos de Carbono, Compósitos, Microscopia eletrônica.

Highlights

Study about different compositions of co-continuous blends of Polystyrene/Polymethylmetacrylate and inclusion of conductive charges.

Study about different compositions of co-continuous blends of Polystyrene/Polymethylmetacrylate and inclusion of conductive charges. PS and PMMA blends with different compositions were characterized by scanning electron microscopy in order to obtain a cocontinuous structure. Conductive loads (polyaniline or carbon nanotubes) were added to improve electrical properties. Interactions among the conductive loads and

Resumo/Abstract

Compósitos de cargas condutoras e matriz polimérica vêm sendo estudados como uma potencial resposta à necessidade de desenvolvimento de filmes poliméricos condutores. Para atingir valores desejáveis de condutividade elétrica, as formulações estudadas sugerem uma quantidade de carga condutora superior a 10 – 20%, razão massa/massa. Esse valor acaba sendo muito alto para garantir a viabilidade econômica do material e também pode prejudicar as propriedades mecânicas da matriz polimérica. Entretanto, esse limite de percolação pode ser diminuído ao controlar as interações entre a carga e a matriz polimérica e/ou restringir a localização das cargas condutoras, formando um caminho específico para o fluxo de elétrons. Esses requisitos podem ser obtidos a partir de compósitos ternários, utilizando uma carga condutora e uma blenda imiscível, preferencialmente de estrutura co-contínua. Neste estudo, pretende-se obter uma estrutura co-contínua numa blenda formada por poliestireno (PS) e polimetilmetacrilato (PMMA) e estudar suas interações com polianilina (Pani) ou nanotubo de carbono (NTC) como cargas condutoras. Para isso, três composições foram estudadas, sendo essas nas proporções: 60/40, 50/50 e 40/60 (PS/PMMA razão m/m). A estrutura das blendas foi avaliada por microscopia eletrônica de varredura (MEV) após a extração do PS, sendo que a composição 50/50 foi a que apresentou a estrutura desejada. Com base nisso, todo o estudo posterior que foi feito com a inclusão das cargas PANI e NTC, na razão de 1% carga/blenda, nesta composição. Os compósitos produzidos também foram avaliados por MEV, indicando uma localização preferencial diferente para cada carga. Devido à presença de grupos semelhantes entre a polianilina e o poliestireno, observou-se uma posição preferencial da Pani nas regiões ricas em PS. Para o NTC, observou-se o inverso: uma localização preferencial nas regiões ricas em PMMA. Essa localização restrita diminui o volume ocupado pela carga condutora, facilitando a interação entre as partículas da carga condutora e, assim, facilitando o processo de condução elétrica, conforme observado pela redução da resistividade destes filmes, medida pelo método de quatro pontas.

Agradecimentos/Acknowledgments

Esse trabalho foi financiado em parte pela Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior – Brasil (CAPES) – código 001. Os autores ainda agradecem ao CNPq e FAPESC pelos auxílios recebidos.

Green nanosensor for the quantification of lidocaine in cocaine samples

Tháís S. Soares (IC),¹ Francielle O. Chagas (PG),^{1,2} Adriano O. Maldaner (PQ),^{1,3,4} Pablo A. Marinho (PQ),⁵ Luis H. M. da Silva (PQ),^{2,4} Maria C. Hespanhol (PQ).^{1,4*}

tha.soares09@gmail.com; [*mcarmohespanhol@gmail.com](mailto:mcarmohespanhol@gmail.com)

¹Grupo de Análises e Educação para a Sustentabilidade (GAES), ²Grupo de Química Verde Coloidal e Macromolecular (QUIVECOM), Departamento de Química, Centro de Ciências Exatas e Tecnológicas, Universidade Federal de Viçosa, Viçosa/MG; ³Instituto Nacional de Criminalística, Polícia Federal, Brasília/DF; ⁴Instituto Nacional de Ciências e Tecnologias Analíticas Avançadas (INCTAA); ⁵Instituto de Criminalística, Polícia Civil, Belo Horizonte/MG

Key-world: Optical nanosensor, Cocaine, Adulterants, Quantification.

Highlights

Lidocaine determination in cocaine samples. Blue-to-red color transition. New nanoaggregates showed discrimination between lidocaine and other adulterants.

Abstract

Several pharmaceutical agents are used as cocaine adulterant, such as lidocaine (LI), benzocaine (BZ), procaine (PR), phenacetin (PH), caffeine (CF), levamisole (LV), hydroxyzine (HD), 4-dymethylaminoantipyrine (AP) and diltiazem (DZ), to mimic the cocaine effects on the user¹. Thus, to determine the main compounds add in the drug is essential for formulate restriction on the sale of these compounds. Polydiacetylenes (PDA) are conjugated polymers with ability to respond by different analytes undergoing blue-to-red transition². This work describes the application of a green optical nanosensor (GON) of PDA for LI determination in cocaine hydrochloride (CH) samples. GON was prepared by solubilizing 10,12-pentacosadiynoic acid (PCDA) in aqueous solution copolymer L64. Figure 1 shows that GON transition color occurs only in the presence of LI molecules. In order to quantify LI in cocaine samples, an analytical curve of LI concentration as a function of colorimetric response (CR %) by standard addition method was obtained. The curve equation was $CR = 0.2319 + 0.0376(C_{LI} / \text{mg kg}^{-1})$, $R^2 = 0.997$. The limit of detection and limit of quantification were 118 mg kg^{-1} and 357 mg kg^{-1} , respectively. Table 1 shows performance of GON to determinate LI in cocaine samples. In the different samples with several adulterants and CH was possible to determinate LI with error less than 10 %.

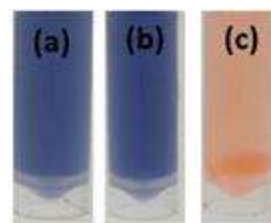


Fig. 1 Color appearance of pure ON (a), ON + CH + all adulterants (less LI) (b), ON + CH + all adulterants (c).

Table 1. Determination of lidocaine in cocaine samples.

| Samples | Concentration / mg kg^{-1} | | | | | | | LI | ER / % |
|---------|-------------------------------------|------|-----|-----|-----|-----|------|-------------------|--------|
| | CH | PR | BZ | PH | DT | HD | LV | | |
| A | 2500 | 2900 | - | - | 550 | - | 950 | 1395 ± 87.62 | 9.48 |
| B | 2500 | 2700 | 100 | - | - | - | 2050 | 833.0 ± 9.48 | 1.44 |
| C | 2500 | 2350 | - | 500 | - | 850 | 750 | 2002 ± 158.74 | -2.37 |
| D | 2500 | - | - | - | - | - | - | 1628 ± 22.17 | -10.2 |

References

¹da Silva, G. O., de Araujo, W. R., & Paixão, T. R. (2018). Portable and low-cost colorimetric office paper-based device for phenacetin detection in seized cocaine samples. *Talanta*, 176, 674-678.

²de Paula Rezende, J., Ferreira, G. M. D., Ferreira, G. M. D., da Silva, L.

H. M., da Silva, M. D. C. H., Pinto, M. S., & dos Santos Pires, A. C. (2017). Polydiacetylene/triblock copolymer nanosensor for the detection of native and free bovine serum albumin. *Materials Science and Engineering: C*, 70, 535-543.

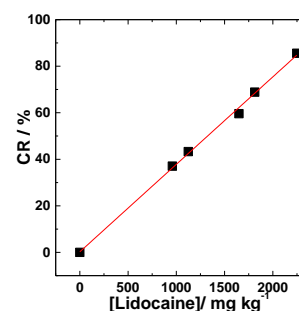


Fig.2 Calibration curve obtained from the CR for different LD concentrations.

Acknowledgments

CAPES/Ciências Forenses, INCTAA, FAPEMIG, and CNPq.

Development of green HPLC methods for analysis of metabolites in *Bauhinia Forficata* Link using multivariate analysis.

Maria E. de Oliveira (IC)¹, Maiara S. Borges (PG)², Cristiano S. Funari (PQ)³, Daniel Rinaldo (PQ)^{1,2*}

maria.eduarda@fc.unesp.br; daniel.rinaldo@unesp.br

¹Chemistry department, FC-UNESP; ²Chemistry Institute, IQ-UNESP; ³Department of Bioprocesses and Biotechnology, FCA-UNESP

Key words: *Bauhinia Forficata* Link, Metabolic fingerprinting, Chemometrics, Green chemistry

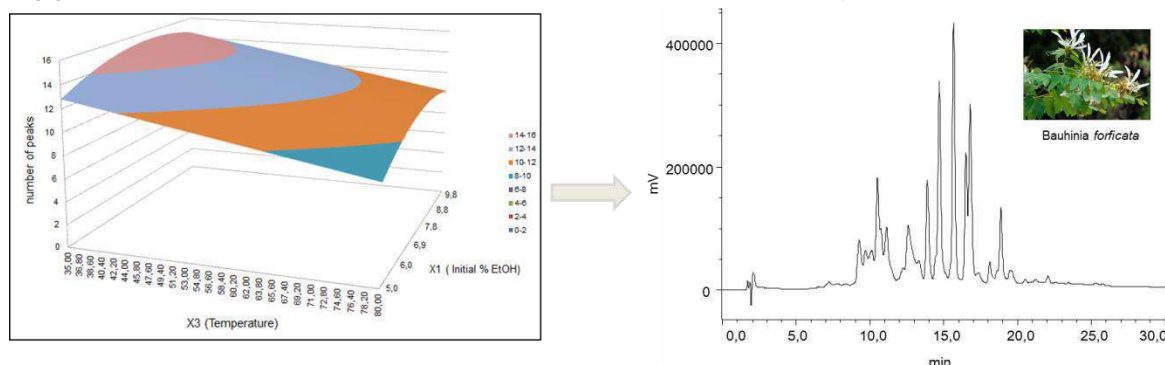
Highlights

- Multivariate and environmental approach for development of HPLC method.
- Replacement of toxic solvents with non-toxic and sustainable solvents for analysis by HPLC.
- Analysis of *B. forficata* by HPLC without generating toxic waste.

Abstract

Bauhinia forficata Link is popularly known as "pata-de-vaca". This species is listed in RENISUS and is used for the treatment of hypoglycemia and diabetes mellitus.¹ Analysis by HPLC of *B. forficata* have use toxic solvents such as acetonitrile that generate large amounts of waste and can provide risks to the health of the analyst and the environment. Therefore, the objective of this work was to develop a new methodology of analysis by HPLC applying the concepts of green chemistry to obtain the chromatographic profile of *B. Forficata*. After to obtain the crude extract a fractional factorial design (2^{7-2}) was applied using HPLC-PAD. The monitored response was the total number of peaks in the chromatogram. With the answers obtained in the analyzes, it was possible to determine that the variables showed greater influence on the separation of the metabolites of *B. forficata* by HPLC, using EtOH and water as mobile phase. After determination of the most important variables, a dohlert design was applied and from the ANOVA table it was possible to observe that the calculated model has an adequate statistical condition and can be used for predictions. The ideal condition for the 2 variables should be between -1 and 0.866 (coded values) predicting optimal point with initial percentage of EtOH of 20% and analysis temperature of 35 °C (Fig 1). Therefore the multivariate optimization approach allowed us to find an optimal methodology for analysis.

Fig 1. Response surface plot for a number of peaks responses at Doehlert design and HPLC-PAD fingerprint of *B. forficata* at $\lambda = 340$ nm. Column: XSelect, 150 x 4.6mm. Mobile phases: H₂O + 0.5 % acetic acid (A) and EtOH (B) at the following gradient: 20–50% B in 30 min. Flow-rate: 1 mL min⁻¹. Temperature of analysis: 35 °C; injection volume: 20 μ L.



References:

¹ Fetrow, C. W. & Avila, J. R. (2000). Manual de Medicina Alternativa para o profissional. Editora Guanabara Koogan S/A: Rio de Janeiro.

Acknowledgments

National Institute of Science and Technology - INCT BioNat, CNPq grant # 465637/2014-0, and FAPESP grants # 2014/50926-0 and # 2016/08179-8, Brazil.

42ª Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química: Eixos Mobilizadores em Química

Área: ELE

Nº de Inscrição: 01107

Determination of lactic acid in sugarcane vinasse based on electrode modified with molecularly imprinted polymers, reduced graphene oxide and gold nanoparticles

Thulio C. Pereira (PG)^{1,2*}, **Nelson R. Stradiotto (PQ)**^{1,2,3}.

tuliocs22@gmail.com

¹Institute of Chemistry, São Paulo State University (UNESP), Araraquara, São Paulo, Brazil; ²Bioenergy Research Institute, São Paulo State University (UNESP), Araraquara, São Paulo, Brazil; ³School of Metallurgical and Industrial Engineering, Volta Redonda, Fluminense Federal University (UFF), Volta Redonda, Rio de Janeiro, Brazil.

Keywords: Lactic acid, Electrochemical Sensor, Molecularly Imprinted Polymer, Reduced Graphene Oxide, Gold Nanoparticles, o-Phenylenediamine.

Highlights

Vinasse is a residue of sugar-alcohol industry. Lactic acid can be applied in areas of interest. MIP electrochemical sensor. Electropolymerization of o-PD on reduced graphene oxide and gold nanoparticles.

Abstract

The great majority of all the vinasse obtained in the sugar-alcohol industry is still used as fertilizer, however this procedure can cause some environmental problems. In addition this residue is rich in a series of compounds with important properties that can be applied in several areas of interest. Lactic acid is one of most important organic acids, this compound presents humectant, antioxidant and acidulant properties, being able to be applied in the food, chemical, biochemical, cosmetics and pharmaceutical industries¹. The incorporation of graphene based materials and metal nanoparticles on electrochemical sensors can offer an improvement in sensor sensitivity and the incorporation of molecularly imprinted polymers (MIP) allows a significant improvement in the selectivity, allowing superior analytical performance for these devices². In this context, the present work proposes an electrochemical sensor based on MIP obtained on a surface modified with reduced graphene oxide (RGO) and gold nanoparticles (AuNPs) for the determination of lactic acid in the sugarcane vinasse. Modification of glassy carbon electrode (GCE) with RGO was performed by applying a constant potential of -1.5 V by 600 s in RGO suspension 0.60 mg mL⁻¹ dispersed in Na₂SO₄ 0.10 mol L⁻¹. Modification with AuNPs onto GCE/RGO was performed by applying a constant potential and 0.5 V by 100 s with HAuCl solution 5.0 x 10⁻⁴ mol L⁻¹ in 0.50 mol L⁻¹ H₂SO₄. The MIP was prepared by electropolymerization of o-phenylenediamine (o-PD) 1.0 x 10⁻³ mol L⁻¹ using cyclic voltammetry (CV) in the range of 0.0 V to 0.8 V at 50 mV s⁻¹ for 25 consecutive cycles in PBS (pH 5.0) containing lactic acid 2.0x 10⁻⁴ mol L⁻¹. For removal of the template the electrode was immersed in acetonitrile for 60 s at room temperature, under stirring. For rebinding, the electrode was immersed in PBS (pH 6.0) containing lactic acid in different concentrations under stirring for 10 min. The response obtained for the sensor was evaluated using differential pulse voltammetry (DPV) and using as probe the redox pair [Fe(CN)₆]^{3-/4-}. The steps of GCE-RGO/AuNPs/MIP sensor construction were characterized electrochemically using the techniques of CV and electrochemical impedance spectroscopy (EIS) and morphologically using scanning electron microscopy (SEM) and atomic force microscopy (AFM). The sensor presented two linear working ranges at different concentration ranges for lactic acid: 1.0 x 10⁻¹⁰ to 1.0 x 10⁻⁹ mol L⁻¹ and 1.0 x 10⁻⁹ to 1.5 x 10⁻⁸ mol L⁻¹, the figures of merit were calculated using the first range, the values calculated for LOD, LOQ and amperometric sensitivity were: 8.9 x 10⁻¹¹ mol L⁻¹, 1.9 x 10⁻¹⁰ mol L⁻¹, 1.8 x 10⁵ mA L mol⁻¹, respectively. In the presence of molecules with structure and similar chemical groups, which could be act as interferences, the sensor showed good selectivity for lactic acid. The method developed was successfully applied for the determination of lactic acid in sugarcane vinasse samples, mean recoveries varied from 97.7% to 105.1% with RSD between 2.1% and 4.9% indicating that the method developed shows good accuracy for the determination of lactic acid in samples of sugarcane vinasse.

Acknowledgments

CAPES; CNPq (Process: 40878783/2018-4); FAPESP (Process: 2017/25329-6)

[1] R. Alves, et al. *Biochem. Eng. J.* 133 (2018), 219-239.

[2] E. Roy, et al. *Biosens. Bioelectron.* 89 (2017), 234-248.

Área: ANA

Nº de Inscrição: 01109

Magnetic restricted access carbon nanotubes for preconcentration of organophosphorus in sample food with on line spectrometry UV-vis

Ayla Campos do Lago (PQ),^{1*} Pedro Marcos Frugeri (PG),¹ Marcelo Henrique da Silva Cavalcante (PG),¹ Eduardo Costa de Figueiredo (PQ),² Pedro Orival Luccas (PQ)¹.

*aylaquimic@yahoo.com.br

¹Instituto de Química, UNIFAL; ²Departamento de Ciências Farmacêuticas, UNIFAL

Palavras Chave: Carbon nanotubes, Magnetic solid phase extraction, Restricted access, Organophosphorus.

Highlights

Organophosphorus pesticides is a class of effective pesticides used to control agricultural pests and are an inhibitor of acetylcholinesterase.

Magnetic extraction is a promising technique that the adsorbent is separated from the matrices by an external magnetic field.

Restricted access materials (RAMs) have been used for the exclusion of proteins (interferent) and an extractor of the analyte of complex matrices.

Resumo/Abstract

A extração em fase sólida, do inglês, *solid phase extraction* (SPE) usando nanotubos de carbono (NTCs) como adsorvente têm sido muito empregada visto às vantagens deste material, no entanto sabe-se que os nanotubos são hidrofóbicos agregando em meio aquoso o que dificulta sua separação. Os NTCs magnéticos que aliam a características dos NTCs às partículas de Fe_3O_4 , assim, com o uso de um ímã é possível isolar os analitos retidos no NTCs magnéticos de forma rápida, simples e eficiente¹. Uma alternativa para extração de analitos de amostras biológicas são os nanotubos de carbono magnéticos de acesso restrito², do inglês, *magnetic restricted access carbon nanotubes* (M-RACNTs). Os M-RACNTs permitem a adsorção de diversos analitos de baixo peso molecular ao mesmo tempo em que eliminam macromoléculas, como proteínas. A síntese dos NTCs magnéticos foram realizados de acordo com a literatura¹ quanto à síntese dos M-RACNTs foi usado o mesmo procedimento descrito pelo nosso grupo de pesquisa o qual foi pioneiro na síntese de NTCs de acesso restrito². O sistema FIA com detecção espectrofotométrica proposto teve seus parâmetros, avaliados pelo uso de um planejamento fatorial fracionário 2^{6-2} e otimizados por meio de gráfico de superfície de resposta. A melhor condição de resposta foi obtida: concentração de NBS em 0.005 % (m/v), rodamina B em 0.020 % (m/v), reatores 1 e 2 em 500 e 250 cm, respectivamente, e concentração de HAc /HCl 1,87/1,50 mol L⁻¹. A mistura dos seguintes organofosforados, clorpirifos, diazinon, malation, metamidos e paration na concentração de 500 µg L⁻¹ foi submetida ao método em comprimento de onda de 560 nm. Os fatores pertinentes ao sistema de extração magnética dispersiva foram avaliados pelo uso de um planejamento fatorial 2^{5-2} e otimizados por metodologia de superfície de resposta, volume de amostra 120 mL, volume de eluição 9 mL (acetonitrila), tempo de extração e dessorção 20 minutos, massa de M-RACNTs 71 mg. O método desenvolvido apresentou faixa analítica linear de 5 µg L⁻¹ a 90 µg L⁻¹ ($\text{Abs} = 0,0943 + 0,00815 [\text{organofosforado } \mu\text{g L}^{-1}]$ ($r = 0,996$)). LD e LQ igual a 0,26 µg L⁻¹ e 5,0 µg L⁻¹, respectivamente; fator préconcentração de 237, eficiência de concentração de 11.85 min.⁻¹, índice de consumo de 0.50 mL e frequência analítica de 06 amostras horas, considerando as etapas de preparo das amostras, extração, eluição, evaporação e análise no sistema FIA. O método foi aplicado em amostras de conteúdo protéico, brócolis, berinjela, couve-flor, leite de soja e vagem verde, as quais foram submetidas em alguns casos somente à trituração; o leite não sofreu nenhum tratamento prévio. O método foi validado por meio de adição de padrão (30 µg L⁻¹) e por comparação com a técnica cromatográfica HPLC com recuperações na faixa de 95,50 -109,16.

¹Deng XJ, Guo Q, Chen X, Xue T, Wang H, Yao P, Food Chemistry, 145, 2014, 853

²Barbosa AF, Barbosa VMP, Bettini J, Luccas PO, Figueiredo EC, Talanta, 131, 2015, 213

Agradecimentos/Acknowledgments

CNPq, CAPES, FAPEMIG, 42ºRASBQ

Área: AMB

Nº de Inscrição:
01110

Environmental assessment of impacted areas by metal and oxidative stress biomarker determinations in *Brillantaisia lamium* (Nees) Benth.

Lucia Helena S. de S. Pereira (IC)^{1*}, Rafael C. C. Rocha (PG)¹, Tatiana D. Saint'Pierre (PQ)¹, Rachel A. Hauser-Davis (PQ)², Adriana H. Nudi (PQ)¹, Adriana Gioda (PQ)¹

*luciahelena.rj@hotmail.com

¹Departamento de Química, PUC-Rio; ²Laboratório de Toxicologia, CESTEJ, ENSP, FIOCRUZ.

Key-words: Conservation, Water pollution, Metals, GSH, MT.

Highlights

Brillantaisia lamium was used as a biomonitor.

A Rapid River Assessment tool classified two Tinguá areas as "altered" and two RJMP areas as "natural". Cr, Pb and Sn were higher in roots, while GSH and MT were higher in leaves.

B. lamium is suitable as a metal phytoaccumulator biomonitor.

RJMP plants are suffering greater anthropogenic contaminant effects.

Abstract

The Atlantic Forest Biome used to cover 15 % of the entire Brazilian territory, but currently corresponds to only half of this percentage¹. Conservationist efforts are present in this range, such as the Tinguá Natural Heritage Private Reserve (NHPR) and the Rio de Janeiro Municipal Park (RJMP), two conservation units in Rio de Janeiro, Brazil, located at different distances from local urban centers. Even though these areas present significant ecological importance, water bodies in and adjacent to these units are being constantly polluted by domestic sewage inputs originating from irregular housing, without any sewage treatment networks, fixed to the margin of the water body. Thus, environmental impact assessments are of vital importance to identify anthropogenic disturbances in these areas. To this end, three sampling points were established at the Tinguá area, one located within the Tinguá NHPR, while two points were chosen at the RJMP area. The Rapid River Assessment (RRA) protocol was applied as a qualitative form of environmental monitoring of the water bodies at both areas and 10 *Brillantaisia lamium* (Nees) Benth., individuals (leaves, stems and roots), were collected from both areas in the winter of 2018 and assessed regarding metals and oxidative stress biomarkers (Reduced Glutathione – GSH, and metallothionein - MT). Sediment surrounding rivers traversing the study areas was also analyzed regarding metals. After freeze-drying, sediment and plant tissues were acid-digested with HNO₃ for Ni, Cr, Pb and Sn ICP-MS quantifications. GSH and MT were determined in plant tissues at 412 nm by spectrophotometry. The RRA classified two of the three Tinguá areas as "altered", indicating anthropogenic impacts, while the two RJMP areas were classified as "natural", demonstrating lower environmental impacts. Roots presented higher metal contents compared to stems and leaves for all metals, except Ni. Leaves, however, presented higher GSH and MT concentrations compared to stems and roots. Plants from RJMP seem to be under higher oxidative stress conditions, as both GSH and MT were present at higher concentrations in plant tissues therein. Ni was the only element present at concentrations associated to adverse biological effects according to the permissible exposure limit stipulated for freshwater sediments². Thus, plants from RJMP seem to be suffering higher anthropogenic contaminant effects, as expected since this area is nearer to the occupational RJ nucleus, even though the RRA results characterized the area as "natural", meriting further assessments.

¹ Campanili M.; Schäffer W. B. Mata Atlântica – Manual de Adequação Ambiental, 96 p., 2010.

² Amorim E.P. Avaliação da concentração de metais e outros elementos de interesse em amostras de sedimento dos estuários de Santos/São Vicente e Cananéia, estado de São Paulo, Brasil. Thesis. 336 p., 2012.

Acknowledgments

The authors would like to thank FAPERJ for the first author's scholarship and for financial support.

Área: FIS

(Inserir a sigla da seção científica para qual o resumo será submetido. Ex: ORG, BEA, CAT)

Nº de Inscrição: 01111

(Inserir o número de inscrição do autor que fez a submissão)

Complexo de inclusão β -ciclodextrina/monômero metacrílico: Efeito em matrizes poliméricas para aplicação dental

Rafael M. Savanhago (IC), Marcia Margarete Meier (PQ)

rafael.savanhago@edu.udesc.com;

Departamento de Química, Universidade do Estado de Santa Catarina, UDESC, Joinville/SC

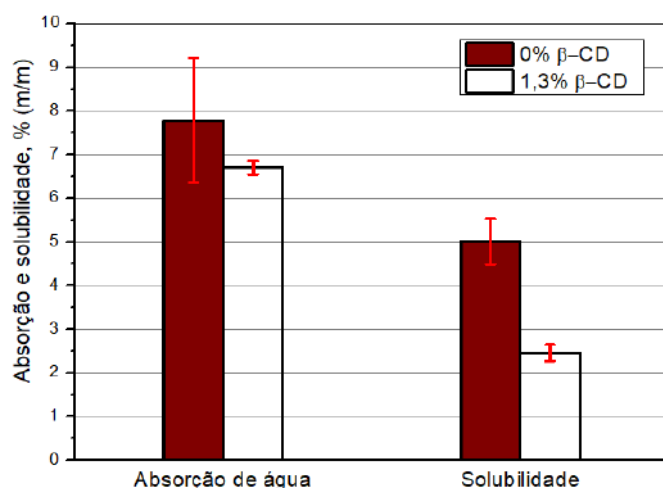
Palavras Chave: ciclodextrina, dental, complexo de inclusão, polímero, metacrilato

Highlights

Inclusion Complex of β -cyclodextrin/methacrylic monomer: Effect in polymeric matrix for dental application. Methacrylic copolymer hydrolyzed in dental composites restorations and we investigate a strategy to improve stability.

Resumo/Abstract

Visando aprimorar a composição de compósitos dentais, o presente trabalho tem como objetivo desenvolver estratégias de aumentar a estabilidade frente à hidrólise de um monômero metacrílico muito utilizado em compósitos dentais – utilizando β -ciclodextrina. A estequiometria do complexo de inclusão formado entre β - β -CD e o monômero metacrílico 2,2-bis[4-(2-hidroxi-3-metacriloxipropoxi)fenil]-propano (Bis-GMA) foi determinado por meio de experimentos de ressonância magnética nuclear (RMN). A influência de β -CD em matrizes poliméricas metacrílicas foi investigada utilizando ensaio de absorção de água e solubilidade. Os deslocamentos químicos associados aos hidrogênios localizados na cavidade da β -CD (H3 e H5), das diferentes proporções molares Bis-GMA/ β -CD, foram utilizados na construção do gráfico de Job's, indicando que a estequiometria molar do complexo de inclusão formado foi de 1:2 Bis-GMA/ β -CD.



Matrizes poliméricas cilíndricas (d:0,50 e h:0,070mm, n=6), contendo Bis-GMA/hidroxietilmetacrilato (45/55, m/m) e iniciadores de polimerização, foram preparadas por fotopolimerização (468nm) contendo 0% e 1,3% de β -CD. Os resultados (Figura 1) após 30 dias de ensaio de absorção de água/solubilidade indicam que a absorção de água não foi alterada na presença de β -CD, apesar de seu caráter hidrofílico, e houve uma diminuição significativa na solubilidade da matriz polimérica em presença de β -CD, evidenciando a possível redução da hidrólise do Bis-GMA em função da formação do complexo de inclusão.

Figura 1: Absorção de água e solubilidade de matrizes poliméricas metacrílicas na presença/ausência de β -CD, CATP.

Agradecimentos/Acknowledgments

Agradecemos à UDESC, FAPESC e CNPQ.

Área: CAT

(Inserir a sigla da seção científica para qual o resumo será submetido. Ex: ORG, BEA, CAT)

Nº de Inscrição: 01116

(Inserir o número de inscrição do autor que fez a submissão)

Síntese assistida por microondas de biaril-bases de Schiff**Marcos Antonio de Abreu Lopes Junior^{1*} (PG), Daniela Corrêa Santos¹ (IC) e Andréa Luzia Ferreira de Souza^{1*} (PQ)****maaljr20@gmail.com; andrealuzia@gmail.com**¹ Universidade Federal do Rio de Janeiro - Campus Macaé - Professor Aloisio Teixeira, avenida Aluizio da Silva Gomes, 50 – Cep 27930-560, Granja dos Cavaleiros, Macaé, RJ.

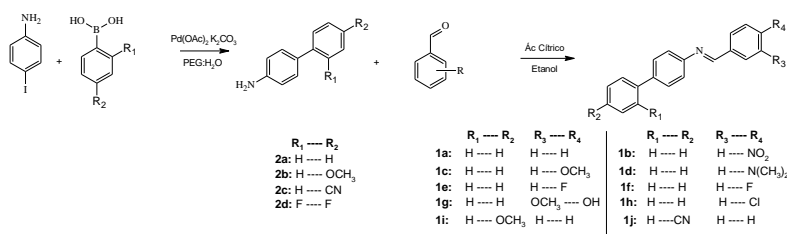
Palavras Chave: Biarilas, bases de Schiff, Suzuki, Microondas.

Highlights

Microwave-assisted synthesis of Biaryl-Schiff Bases. Schiff bases form an important class of organic compounds due to their variety of applications in various fields, including analytical, inorganic and biological chemistry. The azomethine group provides different interactions due to the electrophilic character of carbon and nucleophilic in nitrogen. Biphenyls are a structural moiety with a wide variety of pharmacological activities, including antifungal, antiinflammatory, antirheumatic, antitumor and antihypertensive agents.

Resumo/Abstract

Introdução. As bases de Schiff formam uma classe importante de compostos orgânicos devido a sua variedade de aplicações em vários campos, incluindo química analítica, inorgânica e biológica. O grupo azometino (C=N) proporciona diferentes interações devido ao caráter eletrofilico do carbono e nucleofílico no nitrogênio^{1,2}. As bifenilas são uma porção estrutural com uma ampla variedade de atividades farmacológicas, incluindo agentes antifúngicos, antiinflamatórios, anti-reumáticos, antitumorais e anti-hipertensivos³. Com base nisso, o objetivo deste trabalho é sintetizar biaril-bases de Schiff usando a irradiação das microondas (MO). **Metodologia.** A síntese das biaril-bases de Schiff (**1a-j**) propostas estão descritas no esquema 1, assim como a síntese dos intermediários biarilaminas **2a-d** via reação de Suzuki. **Resultados e Discussão.** A primeira parte do trabalho consistiu em um estudo para indentificar o catalisador mais eficiente para obtenção dos intermediários biarilaminas **2a-d**. As reações utilizando o Pd(OAc)₂ e o PdCl₂ forneceram a 4-aminobifenila (**2a**) com maior pureza⁴. O uso do Pd₂(dba)₃, assim como o Pd(PPh₃)₄, não forneceu **2a** com boa pureza e conversão. As conversões das reações de **2a**, **2b**, **2c** e **2d** foram observadas no CG-EM o que apontou em torno de 98%, 97%, 100% e 99% das conversões dos produtos, respectivamente. Após a purificação dos intermediários por recristalização e caracterização por RMN, outro estudo foi realizado para avaliar a melhor metodologia para a obtenção das biaril-bases de Schiff sob a irradiação das microondas. Iniciou-se o estudo com a reação de condensação entre a 4-aminobifenila (**2a**) e o benzaldeído em EtOH sob MO por 1 hora, em 150°C, para a formação de **1a**, variou-se 3 catalisadores: ácido acético, ácido cítrico e ácido clorídrico que apresentaram rendimentos de 65%, 90% e 40%, respectivamente. O protocolo usando ácido cítrico como catalisador sob MO forneceu as outras bases de Schiff (**1b-j**) com bons rendimentos (93-100%). Os novos derivados foram caracterizados por ponto de fusão, CG-EM, EM-HR, IV e RMN de ¹H e ¹³C.



Esquema: 1 Reação para obtenção das biaril-bases de Schiff **1a-j** através dos intermediários biarilaminas **2a-d**

Conclusão. As biaril-bases de Schiff propostas neste trabalho foram sintetizadas e caracterizadas com sucesso. **Referências bibliográficas.** [1] SILVA, C.D. *et al.* J. of Adv. Res., 2 (1), 1-8, 2011. [2] ANAND, P. *et al.* Int. J. Drug Des. Discov, 3, 851-868, 2012. [3] HORTON, D.A. *et al.* Chem. Rev., 103 (3), 893-930, 2003. [4] LIU, L. *et al.* J. of Org. Chem., 70(15), 6122-6125, 2005.

Agradecimentos/Acknowledgments

CAPES, CNPq, FAPERJ.

Área: EDU

Nº de Inscrição: 01117

A representação feminina em um Curso Superior de Química: um estudo sobre as relações de gênero

Maryna Bringmann (IC)^{1*}, Débora C. Santos (IC)¹, Camila Silveira (PQ)¹. *mabringmann@gmail.com

¹Departamento de Química, UFPR

Palavras-chave: relações de gênero, estudantes, mulheres, universidade.

Highlights

The female representation in a Higher Chemistry Course: a study on gender relations analyzes the relationships between the number of female and male students in a Chemistry Course at a Federal Public University.

Resumo/Abstract

A carreira acadêmica e científica de mulheres nas Ciências Exatas é uma problemática que ainda necessita de estudos e de ações para a superação da assimetria de gênero tão característica deste campo¹. Um dos aspectos a serem investigados diz respeito à segregação horizontal, “que inclui mecanismos que fazem com que as escolhas de carreiras sejam marcadamente segmentadas por gênero”². Deste modo, na perspectiva de gênero, o presente trabalho analisa as relações entre o número de estudantes mulheres e homens de um Curso de Química de uma Universidade Pública Federal do Estado do Paraná, tendo como recorte temporal o período de 10 anos. Os dados foram constituídos por meio do levantamento e organização das informações junto à Secretaria da Coordenação do Curso em estudo. O número de pessoas que ingressaram, evadiram e se formaram, de 2009 a 2018, pode ser observado na Tabela 1.

Tabela 1: Número de estudantes do gênero feminino e masculino de acordo com as categorias de análise.

| Ano | 2009 | | 2010 | | 2011 | | 2012 | | 2013 | | 2014 | | 2015 | | 2016 | | 2017 | | 2018 | |
|-----------|------|----|------|----|------|----|------|----|------|----|------|----|------|----|------|----|------|----|------|----|
| | F | M | F | M | F | M | F | M | F | M | F | M | F | M | F | M | F | M | F | M |
| Ingresso | 82 | 85 | 67 | 68 | 86 | 74 | 108 | 65 | 97 | 64 | 87 | 84 | 118 | 71 | 97 | 66 | 79 | 61 | 63 | 56 |
| Formatura | 5 | 13 | 4 | 1 | 4 | 0 | 1 | 2 | 7 | 7 | 12 | 10 | 27 | 18 | 27 | 18 | 28 | 19 | 20 | 8 |
| Evasão | 10 | 4 | 23 | 28 | 33 | 42 | 53 | 43 | 61 | 40 | 59 | 53 | 71 | 50 | 56 | 61 | 59 | 34 | 55 | 43 |

Fonte: As autoras (2019).

Na categoria “Ingresso”, com exceção dos anos de 2009 e 2010 em que as mulheres representaram 49,1% e 49,6%, respectivamente, do total de ingressantes, elas são a maioria nos demais períodos. Os anos de 2012 e 2015 apresentaram o maior índice de ingresso de estudantes do gênero feminino (62,4% cada). Sobre o número de estudantes que se formaram, as mulheres são maioria em todos os anos, exceto em 2009 (27,7%) e 2012 (33,3%), e em 2010, que há a mesma distribuição entre os gêneros. À exceção dos anos de 2010, 2011 e 2016, as estudantes são em maior número no caso de evasão. No ano de 2009 esse índice chega a 71,4%. O menor índice de evasão de mulheres ocorre no ano de 2011, sendo 44% dos casos. Assim, em um panorama geral, as estudantes são maioria em todas as categorias: ingresso (56%), formatura (58%) e evasão (55%). Sobre a formatura e o ingresso, acreditamos que “as mudanças nos paradigmas sociais, as políticas públicas educacionais, implantadas no país nas últimas décadas, vêm surtindo efeitos positivos sobre a progressão feminina” na Educação Superior³. Mas ainda sabemos que a inserção e conclusão do Curso não eliminam os problemas de gênero. Também é preocupante o grande número de estudantes que evadem, pois a experiência formativa é decisiva “para a reprodução de valores e atitudes que reduzem as oportunidades das meninas quanto para a mudança decisiva em suas perspectivas profissionais”². É fundamental o avanço em estudos sobre Gênero e Ciência, pela necessidade de compreensão e problematização dos fatores que excluem as meninas e mulheres neste segmento.

Agradecimentos/Acknowledgments

UFPR, PRAE, CNPq pela Bolsa e apoio financeiro.

¹BOLZANI, Vanderlan da Silva. (2017). Mulheres na ciência: por que ainda somos tão poucas?. *Ciência e Cultura*, 69(4), 56-59.

²OLINTO, Gilda. (2011). A inclusão das mulheres nas carreiras de ciência e tecnologia no Brasil. *Inc. Soc.*, 5(1), 68-77.

³BARROS, Suzane. C. V., MOURÃO, Luciana. (2018). Panorama da participação feminina na educação superior, no mercado de trabalho e na sociedade. *Psicologia & Sociedade*, 30, 1-11.

Synthesis and characterization of gold nanostructures and porphyrins functionalized with *L,L*-diphenylalanine for photodynamic therapy

Marcella A. Reis (IC)¹, Sandra V. Vassiliades (PG)¹, Andrea M. Aguilari (PQ)², Francesca Giuntini (PQ)³, Wendel A. Alves¹ (PQ)

marcella.alvisi@aluno.ufabc.edu.br

¹Centro de Ciências Naturais e Humanas, Universidade Federal do ABC, 09210-580, Santo André, SP, Brazil; ²Instituto de Ciências Ambientais, Químicas e Farmacêuticas, Universidade Federal de São Paulo, 09972270, Diadema, SP, Brazil; ³School of Pharmacy and Biomolecular Sciences, Liverpool John Moores University, Byrom Street, Liverpool, L3 3AF, UK.

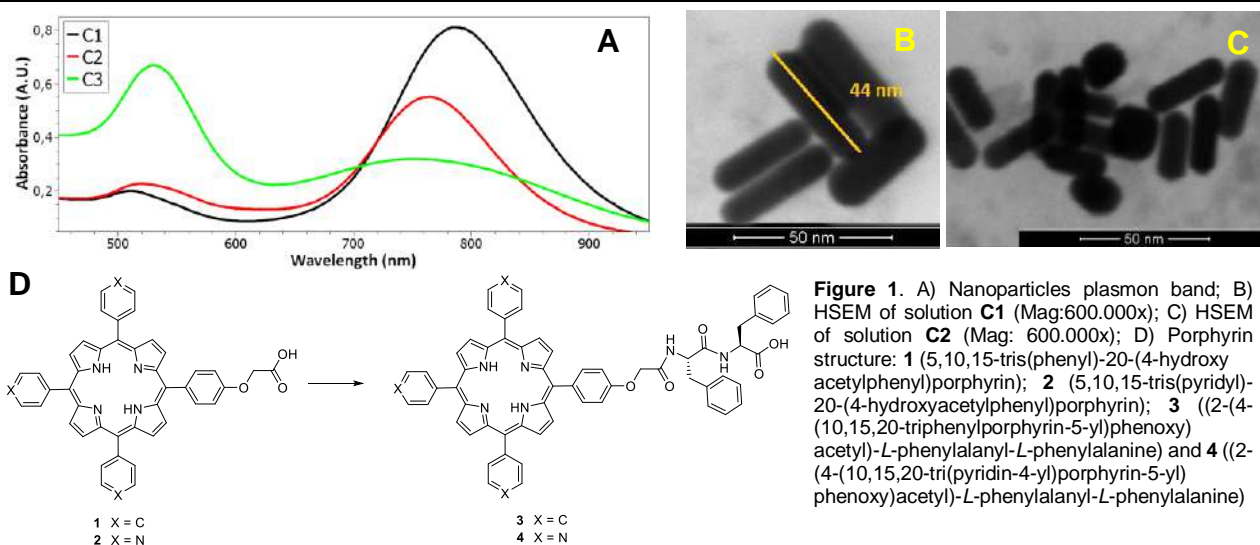
Keywords: Photodynamic Therapy (PDT), diphenylalanine (FF), porphyrins, gold nanostructures, surface plasmons.

Highlights

We will undertake the fabrication of light-responsive hybrid peptide nanostructures through the self-assembly of novel low molecular weight gelators (LMWGs) constituted by an FF-based moiety conjugated to a porphyrin photosensitizer and gold nanostructures.

Abstract

The self-assembling behavior of the LMWG can be triggered by a variety of external stimuli, depending on the nature of the chemical moiety linked to the core gelating unit (FF).^[1] Thus, LMWGs that can self-assemble in response to changes in the surrounding environment (pH, ionic strength, light, enzymatic reactions), opening the way to the development of novel biomaterials with tunable properties for tissue repair applications. Gold nanorods (AuNRs) are being studied in the construction of hybrid photosensitizers because of their optical properties, and the change caused in the local electric field by the presence of the plasmon band in nanoscale metallic particles.^[2] In this work, we propose a synthesis and characterization of AuNRs associated with FF-based moiety conjugated to a porphyrin photosensitizer. The AuNRs were prepared by the seed method^[3] in the presence of gold spherical particles as templates for the growing of long nanorods in solution. In the present study, synthesis of nanoparticles was successful by using silver nitrate, ascorbic acid, Au(III) ions and cetyltrimethylammonium bromide (CTAB) in different concentrations (**C1**= 0,051 mol/L; **C2**= 0,025 mol/L; **C3**= 0,008 mol/L). The AuNRs were characterized by UV/Vis spectroscopy (Fig. 1A), where for **C1** and **C2**, we have observed two absorption peaks, which are characteristics of the nanorods formation that were confirmed by scanning electron microscopy techniques (Fig. 1B-C). In this case, with the decrease of CTAB concentration, the aspect ratio changed as shown in Fig 1A. More recently, the compounds **1** and **2** (Fig. 1D) were synthesized in our research group and monofunctionalized with *L,L*-diphenylalanine (**3** and **4**, respectively). The second part of the work will focus on the characterization of the self-assembling behavior of the conjugates.



1. Ryan, D. M., and Nilsson, B. L. *Polymer Chemistry* **2012**, 3, 18-33; 2. Zhao, Tingting, *et al. Langmuir* **2010**, 26, 14937-14942. 3. Nikoobakht, B. and El-Sayed, M. A., *Chemistry of Materials* **2003**, 15 (10), 1957-1962.

Amino Acid-Derived 1,2,3-Triazoles: Development of a Fluorescent Sensor in Solution for Enantioselective Sensing and BSA Interaction

Natalí P. Debia (PG),¹ Maiara T. Saraiva (PG),² Bruna S. Martins (PG),¹ Roiney Beal (PG),³ Paulo F. B. Gonçalves (PQ),³ Fabiano S. Rodembusch (PQ),⁴ Diego Alves (PQ),² Diogo S. Lütke (PQ).^{1*}

natali.debia@hotmail.com; dslutke@iq.ufrgs.br

¹Instituto de Química, UFRGS; ²LASOL-CCQFA, UFPEL; ³Grupo de Química Teórica e Computacional, UFRGS; ⁴Grupo de Pesquisa em Fotoquímica Orgânica Aplicada, UFRGS.

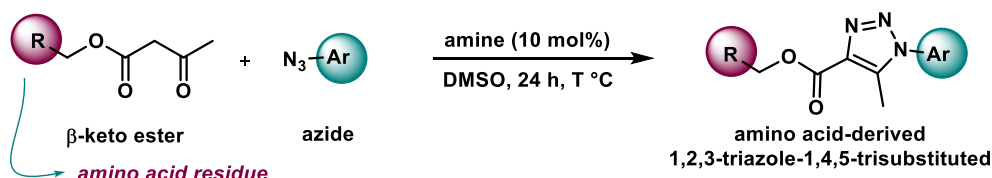
Palavras Chave: Amino Acids, 1,2,3-Triazoles, Fluorescent Probe, Enantioselective Sensing, Carbohydrate, BSA

Highlights

Synthesis of amino acid-derived 1,2,3-triazoles by organocatalytic enamine-azide [3+2] cycloadditions. Examples employed as probe for enantiomeric sensing of a carbohydrate and BSA interaction.

Resumo/Abstract

Heterocyclic compounds represent one of the most general structural units found in several natural and synthetic bioactive compounds.¹ In this line, 1,2,3-triazoles are an interesting class of nitrogen-based heterocycles extensively studied and used in the discovery of drug candidates and in new materials.² Furthermore, this class of compounds has been widely used as sensors for anions and metals, as well as electron donor / acceptor chromophore.³ In view of the importance of this nucleus, a series of amino acid-derived 1,2,3-triazoles presenting the amino acid and the aromatic moieties connected by a triazole-4-carboxylate spacer is discussed in this work. These compounds were achieved in good yields by organocatalytic enamine-azide [3 + 2] cycloadditions.



The methodology was optimized using L-proline-derived β -ketoester and p-methoxyphenylazide as the starting materials. Having established the best reaction conditions (Et_2NH as the catalyst in DMSO as the solvent at 80°C), we further expanded the scope to the other β -ketoesters prepared and different aryl azides. The photophysical properties of eight 1,2,3-triazoles synthesized have been evaluated, by UV-Vis absorption and fluorescence emission. One of the molecules obtained, bearing a 7-chloroquinoline moiety, was photoactive in the UV-violet region and was successfully employed as a probe for substrate-specific enantiomeric sensing using D-(–)-arabinose and L-(+)-arabinose. The potential application as a fluorescent probe to detect protein in phosphate buffer solution was also explored using as model bovine serum albumin (BSA). The studied compounds presented both suppression and association behavior in the presence of BSA. In addition, theoretical calculations were performed at levels $\omega\text{B97XD/cc-pVDZ}$ and $\text{PBE1PBE/6-311+G(d,p)}$ together with the polarizable continuum model to understand the interaction of the molecules with the enantiomers.

¹ Eicher, T.; Hauptmann, S. *The Chemistry of Heterocycles*; Wiley-VCH: Weinheim, 2003.

² Juricek, M.; Kouwer, P. H. J.; Rowan, A. E. *Chem. Commun.*, **2011**, 47, 8740-8749.

³ Lau, Y. H. et al. *Chem. Soc. Rev.*, **2011**, 40, 2848-2866.

Agradecimentos/Acknowledgments



Theoretical Study of the stereoelectronic interactions that rule Peroxide analogue geometries

Marco A. S. Afonso (IC),¹ Rodrigo A. Cormanich (PQ)^{1*}

mszafonso@gmail.com; cormanich@unicamp.br

¹Institute of Chemistry, University of Campinas, Campinas, SP, Brazil

Keywords: Peroxides, NBO, Stereoelectronic interactions, Conformational analysis

Highlights

Study of contribution of hyperconjugative, electrostatic and steric effects on the stability of hydroperoxides conformations.

Abstract

Gas phase electron diffraction experimental studies and microwave spectroscopy¹ have shown that peroxides adopt conformational preferences where the dihedral angles R-O-O-R/H-O-O-R assume values between 80 and 180°. Theoretical calculations² showed that the equilibrium of the stereoelectronic interactions (hyperconjugation) and steric and electrostatic repulsions are the responsible for such observation, being the hyperconjugative interactions of fundamental importance to dictate the stability of the global minima of these molecules.

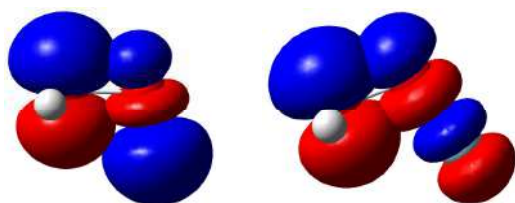


Figure 1. $n_2(O) \rightarrow \sigma^*(OH)$ hyperconjugative interaction representation for HOOH (left) and $n_2(O) \rightarrow \sigma^*(OF)$ for HOOF.

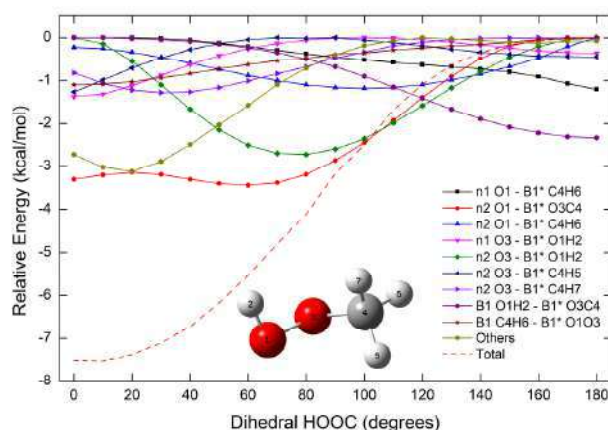


Figure 2. Principal hyperconjugative interactions of the HOOme molecule.

Natural Bonding Orbitals (NBO) found a sp^n and p -pure hybridization for the two lone pair orbitals for each of the H_2O_2 oxygen atoms, which are involved in several hyperconjugative interactions on peroxides³.

In this work, hydroperoxides (HOOR) containing different R groups have been studied theoretically by scanning the molecular energy as a function of the H-O-O-R dihedral angle (0-180° in steps of 10°) at the M06-2X/aug-cc-pVTZ theoretical level. NBO analysis was subsequently applied at the same level of theory for every point in the resultant potential energy curve.

Although the interactions between the oxygen lone pairs and the $\sigma^*(OX)$ orbitals (Figure 1) show the most intense energies for several peroxides, there are a series of secondary interactions (Figure 2) of lower energy, but that also have a important contribution to dictate the profile of the total hyperconjugation energy curve.

Hyperconjugation is an important effect for the molecules studied in this work, steric and electrostatic effects are also competitive. Thus, we are also evaluating the importance of steric and electrostatic repulsions in contrast to hyperconjugative interactions for the total energy of the hydroperoxides proposed in this study.

References:

1. Oberhammer, H. ;*ChemPhysChem* **2015**, *16*, 282.
2. Khursan, S. L.; Antonovsky, V. L. ;*Russ. Chem. Bull.* **2003**, *52*, 1312.
3. Clauss, A. D.; Nelsen, S. F.; Ayoub, M.; Moore, J. W.; Landis, C. R.; Weinhold, F. ;*Chem. Educ. Res. Pr.* **2014**, *15*, 417.

Acknowledgments: We thank FAPESP for a fellowship (to RAC #2018/03910-1) and for a scholarship (to MASA #2018/21979-9). We also thank SDumont, CESUP, CENAPAD-SP and CENAPAD-UFC for the computer clusters used in this work.

Área: ANA

(Inserir a sigla da seção científica para qual o resumo será submetido. Ex: ORG, BEA, CAT)

Nº de Inscrição: 01122

(Inserir o número de inscrição do autor que fez a submissão)

Method development and validation by UFLC-PDA-FLD for determination of endocrine disruptors in water matrices

Mikhael P.M. Vivas (PG),¹ Sabrina Martinez (PQ),² Jailson B. Andrade (PQ),^{1,2} Gisele O. Rocha (PQ)^{1,2}

mpmvivas@yahoo.com;

¹ Instituto de Química, Universidade Federal da Bahia, 40170-115 Salvador-BA, Brazil;

² INCT de Energia e Ambiente, UFBA, 40170-290 Salvador, BA, Brazil

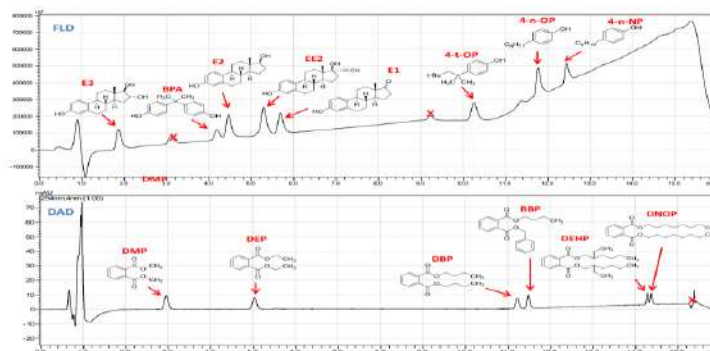
keywords: Endocrine disruptors, Liquid chromatography, Estrogenic activity.

Highlights

Chromatographic method for the analysis of 14 endocrine disruptors.
Simple, fast and efficient analysis strategy with fluorescence and photodiode array detectors.

Resumo/Abstract

Endocrine disruptors (ED) are species with the potential to affect endocrine system capacity at various levels, acting on steroid biosynthesis and or estrogen receptors (ER α and ER β), resulting in inhibition, blocking or promoting endocrine system activity. Imbalance of the endocrine system directly affects the reproductive capacity of the species, reports of feminization of the population of bird, fish and mammal species can be found in the literature. In humans these substances can promote early puberty in girls, decrease the quality of semen in men and various health problems such as cancer, diabetes and obesity. In this work a chromatographic method was developed and validated for the determination of the following substances: Bisfenol A (BPA), estriol (E3), estrone (E1), 17 β -estradiol (E2), 17 α -ethinylestradiol (EE2), 4-*n*-nonylphenol (4-*n*-NP), 4-*n*-octylphenol (4-*n*-OP), 4-*t*-octilfenol (4-*t*-OP), dimethylphthalate (DMP), diethylphthalate (DEP), butylbenzylphthalate (BBP), *di*-butylphthalate (DBP), *di*(2-ethylhexyl) phthalate (DEHP) and *di-n*-octyl phthalate (DnOP) in different water matrices in an acetonitrile (B) / water (A) system (Figure 1). Was used an ultra fast liquid chromatograph coupled to photodiode and fluorescence array detectors, column Shim-pack XR- Phenyl (100 x 2.0 mm, 2.20 μ m) The running time was 16 minutes, with repeatability ranging from 4.8% (BBP) to 11.2% (E1) in the inter-day test for four days, LOD ranged from 2 μ g L⁻¹ (E3) to 294 μ g L⁻¹ BBP, and the linearity between 0.9236 (BPA) and 0.9977 (DEHP).



Chromatogram obtained by the following schedule: start with phase B (acetonitrile) concentration at 30% and increase to 48% over a period of 7.60 minutes, then remain at 48% for 1.60 minutes, soon after 75% in the range of 2.80 min, in the sequence rises slowly to 82% in 2.00 minutes then returns slightly to 30% in 0.60 minutes maintaining this ratio for 1.80 minutes. Absorption and emission wavelengths used were 280 and 306nm respectively for the FLD and 254nm for PDA.

Agradecimentos/Acknowledgments

The authors thank CNPq and PPGQ-UFBA for the suport.

A practical iodination of *BODIPY* fluorophores using iodine and iodic acid

Luana A. Machado² (PG), **Liz R. Martins**¹ (IC), **Paula Romanhi**¹ (IC), **Gustavo S. Proença**¹ (IC), **Cindy J. de Oliveira**¹ (IC), **Leandro F. Pedrosa**^{1,2*} (PQ).

luanamachado@id.uff.br; leandropedrosa@id.uff.br

¹ Institute of Exact Sciences, Department of Chemistry, UFF, CEP 27213-145, Volta Redonda, RJ, Brazil.

² Institute of Chemistry, Department of Organic Chemistry, UFF, CEP 24020-141, Niterói, RJ, Brazil.

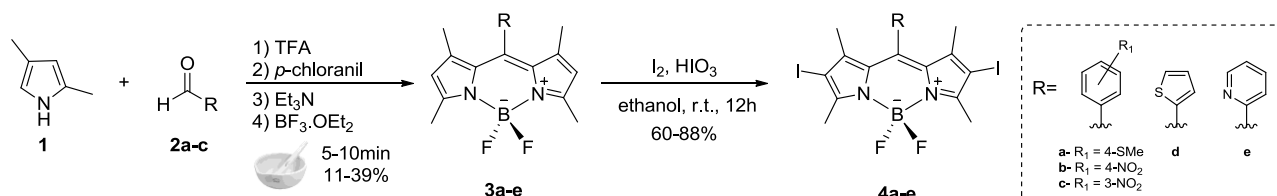
Keywords: *BODIPY*, boron-dipyrromethene, fluorophores, iodination.

Highlights

A practical, convenient, and highly efficient diiodination of 1,3,5,7-tetramethyl *BODIPY* derivatives was achieved by using I₂ and HIO₃ as the iodination reagent.

Resumo/Abstract

Over the past decades, there is increasing interest in the design, preparation, and functionality of *BODIPY* (4,4-difluoro-4-bora-3a,4a-diaza-s-indacene) dyes in a wide variety of research areas such as fluorescent dyes, chemosensors, supramolecular polymers, photodynamic therapy, energy transfer cassettes, and dye-sensitized solar cells owing to their outstanding chemical, thermal, and photophysical properties such as photostability, large extinction coefficients, high luminescence efficiency, long wavelength emission, reasonably long excited singlet state lifetimes, relative insensitivity to environment perturbations, and high fluorescence quantum yields.¹ Among synthetic procedures for functionalized *BODIPY*s, iodination of *BODIPY*s is one of the most useful approaches to the photodynamic therapy reagents and a good platform for the construction of extended π -electron conjugation affording red-shifted *BODIPY* derivatives through the transition-metal catalyzed reactions. Actually, the meso aryl substituted *BODIPY*s, also featuring iodine atoms on the pyrrole 2,6 positions, are characterized by high rate of singlet oxygen production and an extensive tumor cells penetration.² A combination of iodine and iodic acid has been found to be an excellent reagent for the efficient iodination of aromatic compounds (**Scheme 1**).



Scheme 1. Synthesis of iodinated *BODIPY* fluorophores.

In view of this problem, ten *BODIPY*s fluorophores (**3a-e** and **4a-e**) were synthesized, three of which were unpublished in the literature. These were synthesized by replacing the β -pyrrole per iodine positions of the non-iodinated homologous *BODIPY*s by means of aromatic electrophilic substitutions using iodic acid and iodine in ethanol under agitation to yield yields in the range of 60 to 88%.^{3,4} Structures were confirmed by ¹H, ¹⁹F and ¹³C NMR analysis. In conclusion, we apply a practical and efficient approach to the iodination of 1,3,5,7-tetramethyl-*BODIPY*s. I₂ / HIO₃ has proved to be a useful and highly efficient reagent for the iodination of *BODIPY*s at their 2,6-positions under mild conditions in good to excellent yields. This method provides an easy access to a wide range of potentially valuable meso-aryl-1,3,5,7-tetramethyl-*BODIPY* derivatives. Afterwards, they may have their skills tested as fluorescent markers in various biological processes, chemical sensors and solar cells.

REFERENCES

- Lakshmi, V.; et al. *Org. Biomol. Chem.*, **2015**, *13*, 2501
- Caruso, E.; et al. *J. Photoch. Photobio. A*, **2017**, *167*, 269.
- Banfi S.; et al. *Tetrahedron*, **2013**, *69*, 4845.
- Köksoy, B.; et al. *Dyes and Pigments*, **2017**, *140*, 384.

Influence of temperature and dialysis separation on the antioxidant activity of *Cedrela odorata* and *Amburana cearenses*

Pedro A. do Nascimento Junior (IC),¹ Edjane V. Pires (PQ),^{1*} Iara B. Valentim (PQ),² Antônio E. G. Santana (PQ),³ Carlos J. P. Barros,² Luana F. Barbosa (IC),² Carlos H.T.S de Moraes (IC),¹ Erika M. da Silva (IC),¹ Kelly B. da Silva (PG)⁴

pedro.almeida@alunos.uneal.edu.br; edjanevp@gmail.com*

¹ Department of Chemistry, UNEAL; ² Department of Chemistry, IFAL; ³ Center of Agrarian Sciences, UFAL; Institute of Chemistry and Biotechnology, UFAL

Keywords: (Dialysis, Green Chemistry, Medicinal plants).

Highlights

In this work a dialysis separation method was used, which includes an approach of green chemistry, aiming at the non-use of organic solvents, which can bring various environmental, health and safety problems.

Abstract

Some plants have been studied as a source rich in antioxidant substances. These substances are responsible for avoiding the oxidative stress, characteristic of the exacerbated production of free radicals. Several studies report that phenolic compounds are responsible for good antioxidant effects in plant species. According to De Souza et al (2018), phenolic compounds play an important role in cell protection, since they are able to sequester or inhibit the various reactive oxygen species, transfer electrons to free radicals, activate antioxidant enzymes and inhibit oxidase enzymes. In this context, the aqueous extracts of *Cedrela odorata* (MELIACEAE) and *Amburana cearenses* (FABACEAE) were prepared with the solvent cold (25 °C) and hot (100°C). The two types of extract were submitted to dialysis (Figure 1), which can be used to introduce or remove small molecules from a sample according to permeability through a membrane (WALKER, 2009). The antioxidant capacity was determined by monitoring the reaction between the free radical DPPH and the extracts, by measuring the decrease of the absorbance at 516 nm, in a spectrophotometer. Of the species under study, it is worth mentioning the good IC₅₀ values of *C. odorata* (table 1), so that the extract obtained in hot shows a better activity, and the external fraction was the one that represented a better IC₅₀ result compared to the observed in the internal fraction, which implies an influence of the method of separation by dialysis, since the activity intensifies in one of the fractions after separation. The results observed for *A. cearenses* show that the cold extract was more active, which indicates the influence of temperature on the antioxidant activity, however, the use of dialysis as a separation method did not bring better results.

Table 1. Antioxidant activity of the samples at two temperatures and after separation by dialysis

| Amostras | <i>C. odorata</i> | <i>A. cearenses</i> |
|---------------|--------------------------|--------------------------|
| | IC ₅₀ (µg/mL) | IC ₅₀ (µg/mL) |
| EXTBFrio | 8,50 ± 0,20 | 3,12 ± 0,29 |
| EXTBQuente | 7,27 ± 0,38 | - |
| FREXTERFrio | 9,34 ± 0,18 | - |
| FRINTERFrio | 7,42 ± 0,19 | 22,15 ± 0,29 |
| FREXTERQuente | 6,16 ± 0,05 | 19,20 ± 0,38 |
| FRINTERQuente | 11,76 ± 0,57 | 18,20 ± 1,75 |

EXTBFrio – extrato bruto a frio; EXTBQuente – extrato bruto a quente; FREXTERFrio – fração externa a frio; FREXTERQuente – fração externa a quente; FRINTERFrio – fração interna a frio; FRINTERQuente – fração interna a quente.



Figure 1. separation by dialysis of extracts obtained in cold and hot

We thank FAPEAL for financial support.

- De Souza, A.V., Vieira, R. Da S., Putti, F.F. Correlations between the phenolic compounds and antioxidant activity in the skin and pulp of table grape varieties. *Braz. J. Food Technol.*, v. 21, 2018.
- Walker JM. 2009. Protein Protocol Manual. Third edition. Springer-Verlag New York, LLC

SÍNTESE DE ADUTOS DE MICHAEL CATALISADA POR [NMPH]CH₃SO₃

Lucas M. Caño (IC), André L. Vailati (PG), Samuel R. Mendes (PQ), Felipe Wodtke (PG), Fernando R. Xavier (PQ), Rogério A. Gariani (PQ)

lucas.mendes.nd@gmail.com; samuel.mendes@udesc.br.

¹Departamento de Química, UDESC

Palavras Chave: Líquidos Iônicos, Adutos de Michael, Química Verde.

Highlights

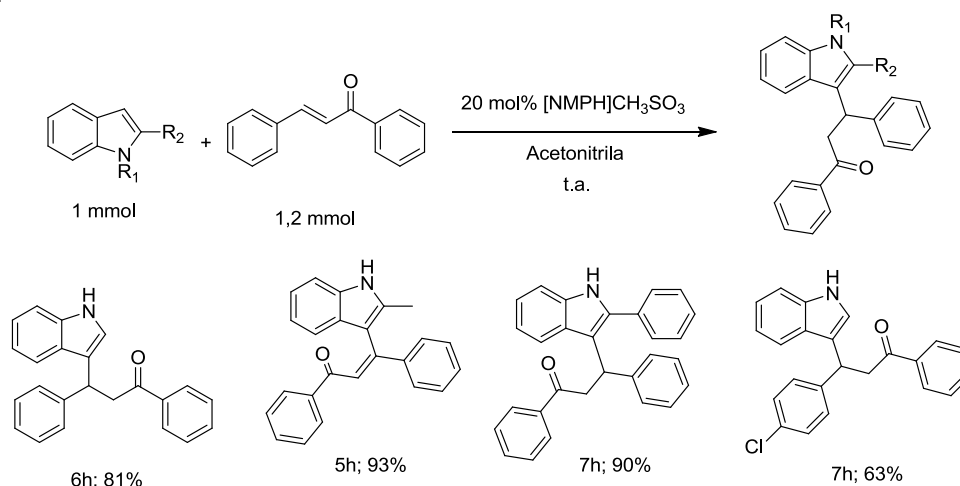
Synthesis of adducts de Michael catalyzed for [NMPH]CH₃SO₃. The ionic liquid N-methyl-2-pyrrolidonium methyl sulfonate [NMPH]CH₃SO₃ was efficient for the synthesis adducts de Michael.

Resumo/Abstract

Com o crescimento da população mundial e, conseqüentemente, o aumento do consumo, buscam-se alternativas para uma vida mais sustentável. Na Química, a realidade não é diferente, pois com o passar dos anos a preocupação com os resíduos gerados e com a utilização de reagentes nocivos cresceu e com isso vem se buscando formas de tornar o desenvolvimento da pesquisa mais sustentável. Desta forma, com o intuito de diminuir o tempo reacional e aumentar a eficiência das reações busca-se a síntese e utilização de novos catalisadores. Uma das alternativas encontradas visando substituir catalisadores metálicos e solventes tóxicos foi a utilização de líquidos iônicos.

Desta maneira, neste trabalho é proposta a aplicação do LI metil sulfonato de N-metil pirrolidônio como catalisador para a síntese de adutos de Michael, utilizando o indol como um dos reagentes, já que este núcleo esta presente em diversos compostos com aplicação farmacológica, tais como: analgésico, antibacteriano, anticancerígeno, anti-inflamatório e antiviral.¹

Diante disto foram realizadas otimizações das condições para as reações com o LI, bem como sintetizados diversos compostos (Esquema 1). Após serem devidamente purificados, foram caracterizados por Ressonância Magnética Nuclear (RMN) de ¹H e ¹³C. Os produtos sintetizados apresentaram bons rendimentos.



Esquema 1: Reação geral para a síntese de Adutos de Michael.

Agradecimentos/Acknowledgments

UDESC, FAPESC, FITEJ, FINEP CAPES e CNPq

¹ PARRINO, B. et al. *Eur. J. Med. Chem.*, **2019**, 161, p.154-178.

Área: ORG

(Inserir a sigla da seção científica para qual o resumo será submetido. Ex: ORG, BEA, CAT)

Nº de Inscrição: 01126

(Inserir o número de inscrição do autor que fez a submissão)

Mechanistic Study of Benzyl Alcohols Oxidation to Benzaldehydes by Trichloroisocyanuric Acid (TCCA)

Carlos V.P. dos Santos* (PG), **Marcio C.S. de Mattos**

cvpiq@yahoo.com.br

Departamento de Química Orgânica, Instituto de Química, UFRJ

Palavras Chave: Mecanismo, Cinética, Álcoois, Oxidação, Aldeídos, Autocatálise.

Highlights

- A convenient protocol for benzylic alcohols oxidation to benzaldehydes
- First mechanistic proposal for benzylic alcohols oxidation by TCCA
- A new autocatalytic kinetic model proposed

Resumo/Abstract

The use of trichloroisocyanuric acid (TCCA, Figure 1) for alcohols oxidation is known for more than 25 years.¹ However, until now, there is no systematic mechanistic study of this reaction.¹ We have already presented a new and convenient methodology for the oxidation of benzylic and secondary alcohols using TCCA.² Here we propose a general mechanism for the reaction diverse benzylic alcohols with TCCA.

Based on an extensive kinetic measurements of k_{obs} (Figure 2), free-energy correlation, isotope effect and order of reaction, our kinetic results indicated the hydride abstraction as the main pathway (Figure 3) and the order of reaction = 3.25. Along with other data, we propose a transition state formed by multiple molecules. To overcome this problem, a kinetic model was proposed to obtain the pseudo-first order expression.

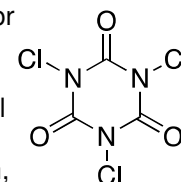


Figure 1- TCCA

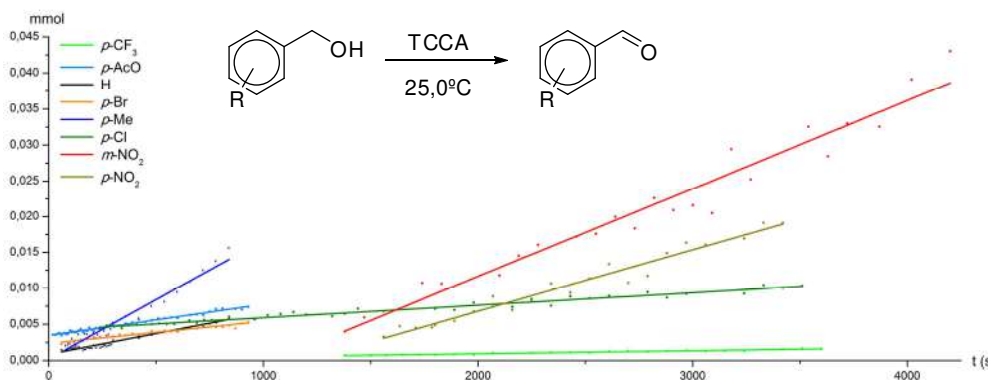


Figure 2 - Kinetic measurements of benzyl alcohols oxidation with TCCA

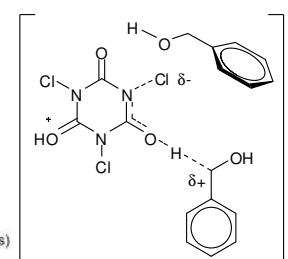


Figure 3 - TS proposal

[1] HIEGEL, G. A.; NALBANDY, M.; *Synth. Commun.* **1992**, *22*, 1589. (b) ZOLFIGOL, M. A.; SHIRINI, F.; CHOGHAMARANI, G.; *Synthesis* **2006**, 2043. (c) VAN SUMMEREN, R. P.; ROMANIUK, A.; IJPEIJ, E. G.; ALSTERS, P. L.; *Catal. Sci. Technol.* **2012**, *2*, 2052. (d) DIP, I.; GETHERS, C.; RICE, T.; STRAUB, T. S.; *Tetrahedron Lett.* **2017**, *58*, 2720.

[2] DOS SANTOS, C. V. P.; DE MATTOS, M. C. S. *46 World Chemistry Congress & 40 Reunião Anual da SBQ*, **2017**, São Paulo. *Proceedings*: 633.

Agradecimentos/Acknowledgments

We thank CNPq for financial support.

Alfabetização científica e abordagem CTS no ensino de Ciências: um relato de experiência no ensino fundamental

Felipe Edilino de Lima (IC),¹ David A. Cabral (IC),¹ Marcus Tambellini (FM),² João Henrique S. Romero (PQ),¹.

felipe.edilino@hotmail.com

¹Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia de São Paulo, Câmpus Catanduva; ²Escola Estadual Barão de Rio Branco, Diretoria de Ensino do município de Catanduva.

Palavras Chave: Elementary School, Scientific Literacy, PIBID, Sports Medicine.

Highlights

Title: Scientific Literacy and STS program in Science teaching: an experience report in elementary education

- ✓ Development of activities that associate theory and practice by Science, Technology and Society (STS) program;
- ✓ Elective Course – Sports Medicine; Importance of scientific literacy to make learning more meaningful to students.

Resumo/Abstract

Este trabalho foi desenvolvido pelos bolsistas do Programa Institucional de Bolsas de Iniciação à Docência (PIBID) do curso de Licenciatura em Química do Instituto Federal de São Paulo (IFSP) – Câmpus Catanduva numa escola de tempo integral de ensino fundamental no mesmo município. A partir da premissa que muitos estudantes da escola têm como projeto de vida o curso de Medicina, o professor da escola junto aos pibidianos resolveram oferecer uma disciplina eletiva, Medicina Esportiva, abordando principalmente os sistemas esquelético, digestório e circulatório. A estratégia CTS (Ciência, Tecnologia e Sociedade)¹ foi escolhida para o desenvolvimento das diversas atividades, tais como, construção de painéis e maquetes, realização de experimentos químicos e aulas práticas. O intuito deste trabalho realizado durante o segundo semestre de 2018, buscou estabelecer uma linguagem científica adequada para o público alvo com o objetivo de alcançar uma aprendizagem significativa aos discentes². Participaram da eletiva 40 alunos do sexto ao nono ano do ensino fundamental durante 18 semanas. Ao final do projeto os discentes apresentaram a comunidade escolar alguns experimentos realizados durante a eletiva e também alguns estandes sobre o corpo humano (Figura 1).

Figura 1 – Imagens da culminância ao final do semestre.



Evidenciou-se bom rendimento nas apresentações dos alunos e também a evolução destes durante o semestre. Para atingir esse resultado foi fundamental a abordagem CTS e a alfabetização científica que integraram um conjunto de estratégias, que foram fundamentais para a promoção de habilidades e competências, em que os alunos puderam associá-las ao seu cotidiano e projeto de vida.

¹SANTOS, W. L. P; MORTIMER, E. F. Uma análise de pressupostos da abordagem C-T-S (Ciência – Tecnologia-Sociedade) no contexto da educação brasileira, **Revista Ensaio**, v. 2, p. 110-132, 2002.² SASSERON, L. H.; de CARVALHO, A. M. Alfabetização Científica: uma revisão bibliográfica, *Investigações no ensino de Ciências*, v. 16, p. 59-77, 2011.

Acknowledgments

The authors would like to thank the CAPES.

Biobased spirosuccinimides from itaconic anhydride: A novel synthetic application of renewable carbons for important biological targets

Milene Macedo Hornink (PG), Alice Uva Lopes (IC), Leandro Helgueira Andrade (PQ)*

milenemacedohornink@usp.br; leandroh@iq.usp.br

Instituto de Química, Universidade de São Paulo, Av. Prof. Lineu Prestes 748, São Paulo - SP, 05508-000, Brasil;

Palavras Chave: Itaconic Anhydride, carbamoyl radical, continuous flow, spirosuccinimides.

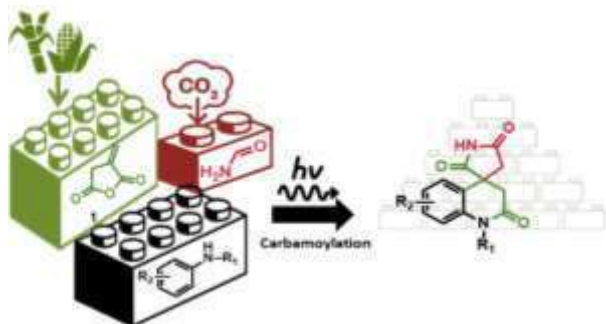
Highlights

Spirosuccinimides have important biological activities and pharmaceutical applications. We are disclosing a novel synthetic application of renewable carbons for the production of spirosuccinimide scaffolds towards the exploitation of carbamoyl radical reactivity.

Resumo/Abstract

Spirosuccinimides exhibit potential pharmaceutical applications, such as anticonvulsant, antiarrhythmic and for the treatment of diabetes complications [1] [2] [3]. Motivated by these important biological activities, we decided to create a synthetic strategy to achieve spirosuccinimides. We envisioned a synthetic approach in which the carbamoyl radical could be employed (**Scheme 1**) [4].

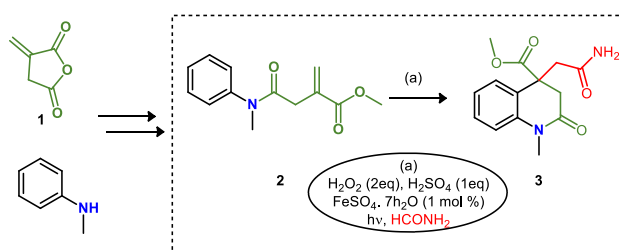
Scheme 1. Inspiration pathway for spirosuccinimides



In our purpose, we selected anilines and itaconic anhydride, a biobased compound, also an emerging building block well-known in the production of polymers [5]. Itaconic anhydride (**1**) is a key compound for the preparation of a variety of amide itaconic derivatives (**2**).

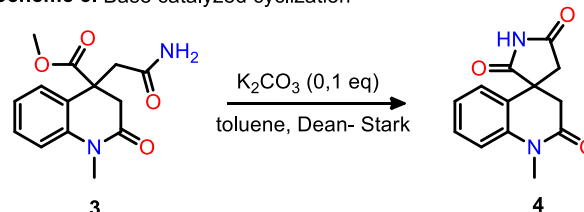
Initially, we employed *N*-methyl aniline to prepare amide (**2**) in good yield (76%). Having in hands the unsaturated amide (**2**), the carbamoyl radical was generated by photo-Fenton conditions using flow chemistry. By using a residence time of 10 minutes, the desired disubstituted dihydroquinolinone (**3**) was prepared in 77% yield.

Scheme 2. Carbamoylation of itaconic anhydride amide derivative



A simple protocol for the cyclization of **3** was employed and, the spirosuccinimide (**4**) was obtained in excellent yield (86%) (**Scheme 3**).

Scheme 3. Base catalyzed cyclization



In conclusion, we have demonstrated a fast methodology to achieve the spirosuccinimide backbones in good yields using renewable carbon as starting material. Our current target is to extend this novel methodology and provide biological activities for new spirosuccinimides.

- [1] Y. H. Park *et al.*, *Xenobiotica*, vol. 22, no. 5, pp. 543–550, 1992.
- [2] P. A. Tenthorey, R. A. Ronfeld, H. S. Feldman, and P. D. McMaster, *J. Med. Chem.*, vol. 24, pp. 47–53, 1981.
- [3] F. P. Hauck, J. Demick, and J. Fan, *J. Med. Chem.*, vol. 10, pp. 611–614, 1967.
- [4] J. C. Abreu, C. A. E. Barata, and L. H. Andrade, *Org. Lett.*, vol. 19, no. 5, pp. 1060–1063, 2017.
- [5] O. Valerio, M. Misra, and A. K. Mohanty, *RSC Adv.*, vol. 7, no. 61, pp. 38594–38603, 2017.

Agradecimentos/Acknowledgments

We thank CNPq, CAPES and FAPESP for the financial support.

Evaluation of gaseous mercury in the atmosphere of Salvador-BA

Elisvan Reis Mota (PG),^{1*} Robson Mota de Jesus (PQ),² Pedro Afonso de Paula Pereira (PQ),^{1,2} Gisele Olímpio da Rocha (PQ).^{1,2}

elisvanrm@yahoo.com.br

¹Instituto de Química, UFBA; ²CIEnAm, UFBA

Keywords: Mercury, Atmosphere, Salvador

Highlights

Mercury is well established as a highly toxic global air pollutant. This work is pioneer in the evaluation of concentrations of gaseous mercury in the atmosphere of Salvador, Bahia, Brazil.

Abstract

Mercury is well established as a highly toxic global pollutant, which may cause harm to the environment and human health. Exposure to high concentrations of gaseous mercury causes problems such as irritability, impatience, and depression among others. In urban centers fossil fuel burning is the main source of mercury emissions to the atmosphere. Continuous monitoring of gaseous mercury is important in areas close to its emission sources, in order to assess the related risks. Salvador, capital of the state of Bahia, has about 2.7 million inhabitants distributed in a peninsular area of 361 Km². Samplings were performed using a mercury portable analyzer, RA 915 M (Lumex, Russia), during 2018, in 13 urban neighborhoods of Salvador. The results obtained are shown in the graph depicted in Figure 1.

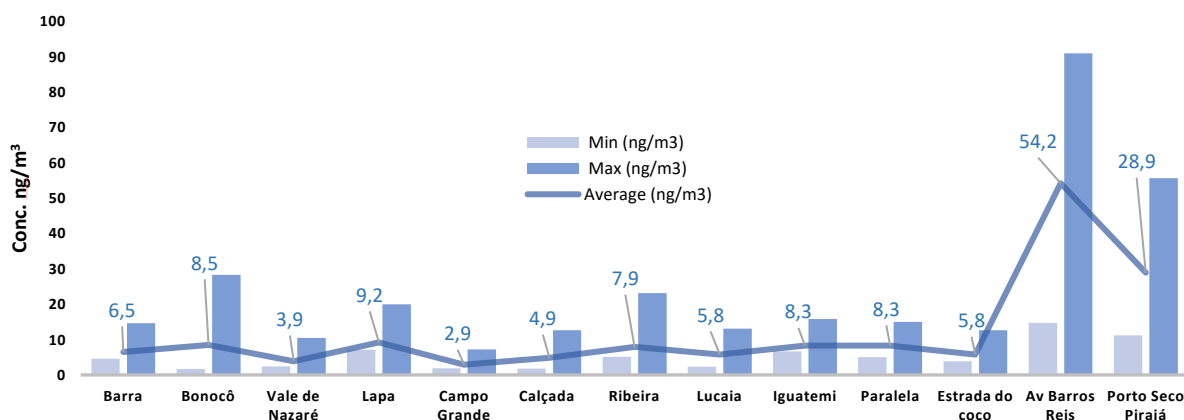


Figure 1. Concentrations of gaseous mercury obtained in 13 neighborhoods of the city of Salvador

The results show that all values are below the reference level for exposure and long-term inhalation, established by the World Health Organization, which is 200 ng/m³. The highest concentration of mercury was found in the Barros Reis Av.. This can be explained by the frequent traffic jams that occur in this region, since vehicular emissions are important sources of Hg to the atmosphere. The region of Porto Seco Pirajá presented the second largest concentration. This region has a small industrial pole, besides being located in the vicinity of BR 324, a highly traffic impacted road. On the other hand, the neighborhood of Campo Grande presented the lowest concentrations found. This region is located in a naturally raised area of the city and presents an appreciable vegetation cover. Studies have shown that the gaseous mercury can be absorbed by the tree leaves. In this way, the vegetation cover of this region probably has influence in the low concentrations verified in this area. Finally, this work was the first one conducted in Salvador, providing a relevant assessment of the atmospheric levels of mercury in this city. These results are important to establish affirmative policies for the control and prevention of Hg emissions.

Acknowledgments

CNPq, INCT on Energy & Environment, FAPESB, CAPES.

42ª Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química: Eixos Mobilizadores em Química

Área: ANA

Nº de Inscrição: 01130

Viability of oral pre-formulation consisting of ganciclovir and NaCl by TGA / DTG and DSC

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

brunaquimica@live.com

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

Key words: *Ganciclovir, sodium chloride, binary mixture, forced degradation, thermal analysis, oral administration.*

Highlights

Thermal analysis as a useful tool in the verification of pharmaceutical interactions in the development of pre-formulations and routes of administration.

Resumo/Abstract

Ganciclovir sodium (GS) is a drug widely used to inhibit viral replication of infections caused by cytomegalovirus (CMV). It is currently marketed under the injectable form requiring preparation and handling care due to its pharmacological specificities with teratogenic and carcinogenic potential in humans.¹ Oral administration is a more convenient and safe alternative, however, it is necessary to use excipients that improve the bioavailability of GS in this route, such as sodium chloride (NaCl).² NaCl is an excellent osmotic agent that helps in the modification and time of drug release.³ After the choice of excipients in pre-formulations, it is necessary to verify the behavior of the binary mixtures to ensure the stability, viability, safety and efficacy of the drug. Thus, this work aims to evaluate the compatibility and degradation of binary mixtures of GS and NaCl from thermal analysis techniques. Samples of GS, NaCl and four 1:1 binary mixtures (m / m) were supplied by Halex Istar Indústria Farmacêutica S.A.. The binary mixtures have different conditions, one being at room temperature; and the others underwent three stress tests, during ten days: UVA / UVB in the photo-stability chamber (Zem®); and relative humidity (75 % ± 1 %) and temperature (60.0 °C ± 0.3 °C) in the climatic chamber Climus. The TGA / DTG curves of the GS and NaCl were analyzed in the α -Al₂O₃ crucible in the TG / SDTA / 851^e equipment, with temperature variation of 25 - 1000 °C for the drug and up to 400 °C for the excipient. In the DSC curves of all samples, a perforated cap aluminum crucible of 25 - 300 °C was used in the DSC 822^e equipment. Both curves were performed in Mettler Toledo equipment, under N₂ atmosphere with flow rate of 50.0 mL min⁻¹ and heating rate of 20 °C min⁻¹. The DSC curve of the GS presents endotherms between 80 - 230 °C and an endothermic peak around 275 °C, which in agreement with the interpretations of the TGA / DTG curve, refer to dehydration and fusion followed by decomposition, respectively. For the DSC curve of NaCl, as shown in the TGA / DTG curve, no thermal event occurs up to the temperature of 300 °C. The thermal events of the binary mixtures were similar to those of the isolated drug. From the results of thermal analysis, it is concluded that the excipient NaCl does not alter the temperature where the GS fusion occurs, even when under stress conditions. This indicates that there is no pharmaceutical interaction or degradation. Thus, the formulation composed of GS and NaCl is viable.

¹ Rui, W-B et al. Limited sampling strategy for the estimation of the area under the concentration-time curve for ganciclovir in Chinese adult renal allograft recipients. *European Journal of Clinical Pharmacology*, 2019.

² Drew, W. L. et al. Oral ganciclovir as maintenance treatment for cytomegalovirus retinitis in patients with AIDS. *Syntex Cooperative Oral ganciclovir Study Group. N Engl J Med* 1995; 333:615-20.

³ Logash M, Pokotylo P, Zboina B, Stępień RB, *Medical Studies* 2017; 33-2.

Agradecimentos/Acknowledgments

LAMES/UFG, Halex Istar Indústria Farmacêutica S.A. e FUNAPE

Atividade antipriônica de novos conjugados 4-quinolona/1,4-benzoquinona

Amanda R. P. Costa (IC)^{1*}, Maria Cecília B. V. de Souza (PQ)¹, Tuane C. R. Gonçalves (PQ)², Jerson Lima da Silva (PQ)², Pedro N. Batalha (PQ)¹, Marcela C. de Moraes (PQ)¹, Fernanda da C. S. Boechat (PQ)¹

amandarpc@id.uff.br; pedrobatalha@id.uff.br

¹Departamento de Química Orgânica, Instituto de Química - UFF, ²Instituto de Bioquímica Médica, UFRJ

Palavras Chave: atividade antipriônica, benzoquinona, quinolona, Doenças do Prion

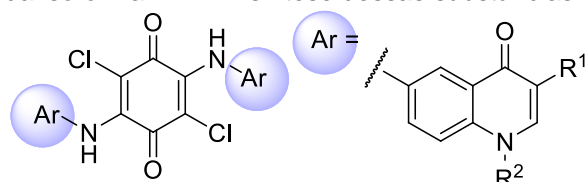
Highlights

Anti-Prion activity of novel 4-quinolone / 1,4-benzoquinone conjugates.

New agents for the treatment of prion diseases. Quinone based bioactive substances. Quinone-quinolone conjugates as bioactive candidates. Non-classical bioactivities for quinolone derivatives.

Resumo/Abstract

As doenças priônicas compõem um conjunto de doenças de caráter neurodegenerativo decorrentes de encefalopatias espongiformes transmissíveis (ETT) e foram descobertas por Stanley B. Prusiner. Uma das causas dessas doenças é a agregação da isoforma infectante da proteína Prion (PrP^{Sc}), insolúvel e resistente às proteases, formada após alterações conformacionais a partir da isoforma Prion celular solúvel (PrP^C). Esforços têm sido feitos no sentido de se desenvolver novas substâncias capazes de minimizar esta conversão conformacional. Neste sentido, Hoang, Salvatore e colaboradores, descreveram a atividade anti-Prion de compostos bivalentes contendo arcabouço 2,5-diaminobenzoquinônicos. Considerando também a versatilidade biológica associada à derivados de quinolonas, uma série de 2,5-dicloro-3,6-bis[(quinolon-6-il)amino]-1,4-benzoquinonas foram planejadas visando uma possível capacidade de diminuição do acúmulo da isoforma PrP^{Sc}. A síntese dessas substâncias foi apresentada na 41ª Reunião Anual da SBQem 2018.



- | | |
|---|--|
| 1a: R ¹ = CO ₂ Et; R ² = Et | 1e: R ¹ = CO ₂ H; R ² = Et |
| 1b: R ¹ = CO ₂ Et; R ² = Pr | 1f: R ¹ = CO ₂ H; R ² = Pr |
| 1c: R ¹ = CO ₂ Et; R ² = Pent | 1g: R ¹ = CO ₂ H; R ² = Pent |
| 1d: R ¹ = CO ₂ Et; R ² = Bn | 1h: R ¹ = CO ₂ H; R ² = Bn |

Este trabalho descreve a continuação deste projeto, com os resultados biológicos obtidos até o momento.

Inicialmente, as substâncias **1a-h** foram avaliadas em um ensaio de agregação térmica, no qual a proteína é mantida sob agitação e aquecimento e o efeito inibitório destes compostos na formação dos agregados é avaliado a partir do monitoramento do espalhamento de luz. Neste experimento, os compostos **1f-h** apresentaram %I > 60. Então, foi avaliada a citotoxicidade destes compostos em linhagens N2A e HEK-293, no qual determinou-se que concentrações inferiores a 20 μM não apresentam toxicidade. O efeito dos compostos **1a-h** na amplificação da agregação da proteína Prion *in vitro* foi avaliada a 20 μM, e observou-se que os compostos **1g** e **1h** reduziram significativamente a formação de fibras (56% para **1g** e 73% para **1h**), enquanto os demais compostos apresentaram percentuais de redução entre 22 e 38%. Para explorar o mecanismo de ação destas substâncias, foram realizados estudos cinéticos da formação de fibras na presença destes compostos, e os resultados preliminares indicam que há um efeito termodinâmico e cinético no processo de fibrilação da proteína Prion devido a ação destes compostos.

Agradecimentos/Acknowledgments

O presente trabalho foi realizado com apoio da Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior - Brasil (CAPES) - Código de Financiamento 001; CNPq; FAPERJ; PPGQ-UFF; PROAP-UFF.

Síntese de Novos Conjugados Quinonoquinolônicos Contendo Ponte Amínica com Perfil de Atividade Antitumoral

Alan Gonçalves de Souza (IC),¹ Fernanda Savacini Sagrillo (PQ),¹ Vanessa da Gama Oliveira (PG),¹ Pedro N. Batalha (PQ),¹ Fernanda da C. S. Boechat (PQ),¹ Maria Cecília B. V. de Souza (PQ).^{1*}

alangoncalves@id.uff.br; mceciliabvs@gmail.com

¹Departamento de Química Orgânica, UFF; Instituto de Química - Outeiro de São João Batista, s/nº. Campus do Valonguinho - Centro - Niterói - RJ, CEP: 24020-150, Brasil.

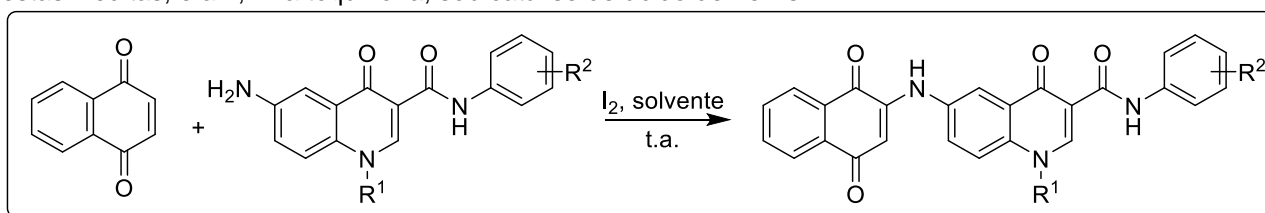
Palavras Chave: 4-Quinolonas, Quinolonocarboxamidas, 1,4-Naftoquinona, Antitumorais.

Highlights

In this work the synthesis of new conjugates containing in their structures the 4-quinolone and 1,4-naphthoquinone nuclei were performed. Their syntheses were planned via the coupling reaction between aminoquinolonecarboxamides and 1,4-naphthoquinone.

Resumo

O termo câncer é atribuído a um conjunto de doenças que têm em comum o crescimento desordenado das células que invadem os tecidos e órgãos e podem se espalhar para outras regiões do corpo causando metástase. O câncer é a segunda maior causa de morte no Brasil e no mundo, atrás apenas das doenças cardiovasculares, e pesquisas mostram que os casos tendem a crescer significativamente. Dessa forma, a busca por novas substâncias que possam atuar como agentes antitumorais é de grande importância. O núcleo 4-quinolona faz parte das estruturas de diversos fármacos com atividade antibacteriana, amplamente utilizados na clínica, e vem aumentando o número de relatos na literatura de derivados de 4-quinolonas que possuem diversas atividades biológicas denominadas não-clássicas tais como antifúngicos, antiparasitários, antivirais, antitumorais, anti-iskêmicos, por exemplo. Um análogo quinolônico que apresenta atividade antitumoral é a vosaroxina, que se encontra em estudos de fase clínica III contra a leucemia mielóide aguda e câncer de ovário. Diversos derivados quinônicos são substâncias que exibem uma série de atividades farmacológicas podendo se destacar as atividades tripanocida, antitumoral, antibacteriana, antifúngica, leishmanicida, antimicrobiana, dentre outras. Por exemplo, a doxorubicina é uma quinona utilizada no tratamento de diversas neoplasias, como cânceres de mama, endométrio, ovário, testículo, tireóide, estômago, bexiga, pulmão. É um dos fármacos antineoplásicos de maior importância na atualidade. Este trabalho tem por objetivo a síntese de novos conjugados contendo os núcleos 4-quinolônico e 1,4-naftoquinônico em suas estruturas para avaliação da sua atividade antitumoral. Sua síntese foi planejada via reação de acoplamento entre diferentes aminoquinolonecarboxamidas, previamente sintetizadas, substâncias estas inéditas, e a 1,4-naftoquinona, sob catálise de ácido de Lewis.



Foram obtidos sete novos conjugados e suas estruturas foram caracterizadas por métodos físicos de análise (IV, RMN de ¹H e ¹³C). Estas substâncias estão em fase de avaliação da atividade antineoplásica contra diferentes linhagens de células tumorais.

Referências:

1. INCA. Disponível em: <http://www1.inca.gov.br/conteudo_view.asp?id=322> (Acessado em: 30 de janeiro de 2019).
2. QIU, H-Y. et al. Chemical Biology Drug Design, p. 1-10, 2017.
3. NIJENHUIS, C. M. et al. Investigational New Drugs, v. 35, p. 478-490, 2017

Agradecimentos

O presente trabalho foi realizado com apoio da Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior - Brasil (CAPES) - Código de Financiamento 001; CNPq; FAPERJ; PPGQ-UFF; UFF-PROAES.

Área: ELE

Nº de Inscrição: 01133

Study and characterization of thermally reduced graphene oxide as electrodes for double-layer capacitors in various electrolytes.

Marcelo A. de Andrade (IC), Thiago Cipriano (PQ), Vitor L. Martins (PQ), Roberto M. Torresi (PQ)*

marcelo.amaro.andrade@usp.br; rtorresi@iq.usp.br

Departamento de Química Fundamental, Instituto de Química, Universidade de São Paulo, Brasil

Keywords: explosive thermal reduction, ionic liquids, reduced graphene oxide, supercapacitor

Highlights

This work consists in the manufacture of a thermally reduced graphene oxide by explosion of graphene oxide, with high surface area and high capacitance in various electrolytes.

Abstract

The use of thermally reduced graphene oxide (rGO) electrodes was explored aiming to improve the capacitance of supercapacitors by increasing the surface area of the electrode. The synthesis of graphene oxide (GO) was performed via a modification of the typical Hummer's method, by an efficient exfoliation of the graphite. Graphite powder was oxidized in concentrated sulfuric acid with sodium nitrate and potassium permanganate, which intercalates the graphite layers, promoting the exfoliation¹. After washing and drying, the brown GO solid obtained, shown in the figure 1 - image A, was thermally reduced by outburst² in an inert atmosphere of N₂ at 450 °C for 1 h. The material obtained, shown in figure 1 - image B, was a black powder, lighter and bulkier than those reduced chemically, with a higher surface area. As shown in the SEM image, there was an effective exfoliation of the GO, evidenced by the porosity caused by the overlap of the graphene sheets. The heating process promotes the breakdown of intermolecular forces by the release of gases from the reduction and the exothermic process can generate local increase of temperature and then a chain sequence of expansion of the material. We performed electrochemical impedance spectroscopy and cyclic voltammetry of the GO, the standard borohydride rGO and the thermally rGO foam prepared, exhibited large capacitance differences in different electrolytes. The voltammogram at the same scan rate was normalized by the active mass of the electrodes, comparing both materials before and after the thermal reduction. It is possible to observe a significant increase in the capacitance obtained for the thermally rGO prepared. These results open up a wide range of possibilities for the use of the material obtained.

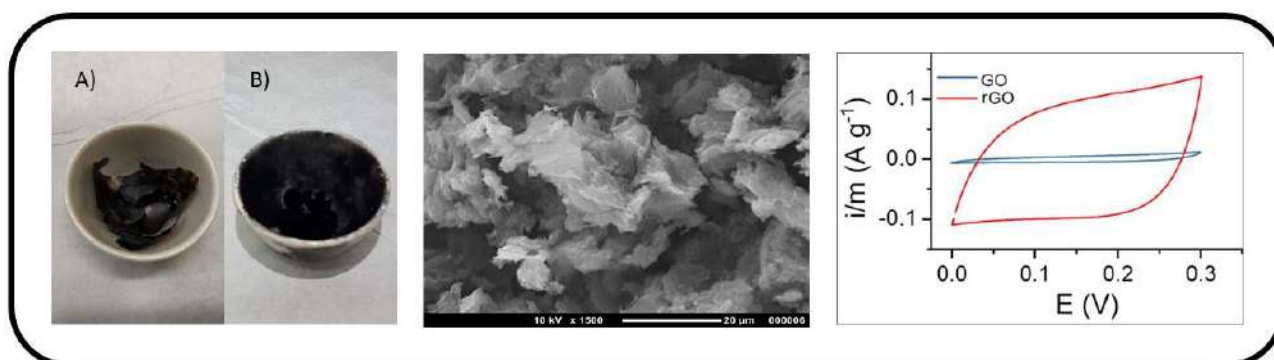


Figure 1: Left A – Solid graphene oxide, B – Thermally reduced graphene oxide, Central – S.E.M of thermal RGO sheets, Right – CV of RGO in Li₂SO₄ 1M compared with the oxide, both in a 10% PTFE binder electrode

¹ YU, Huitao et al. *High-efficient Synthesis of Graphene Oxide Based on Improved Hummers Method*. Article. Scientific Report – Nature. 2016.

² QIU, Yang et al. *Explosive thermal reduction of graphene oxide-based materials: Mechanism and safety implications*. Article. Carbon – Elsevier. 2014.

Acknowledgments

FAPESP grant nos. 2018/04111-5, 2015/26308-7, 2017/11784-3 and 2013/22748-7.

Bimetallic Au-Pd nanoparticles for the light-driven Suzuki reaction

Vitor A. Santos da Silva (IC)¹, Vitor S. Ramos (PQ)², José B. de Campos (PQ)², Alexsandro A. da Silva (PQ)³, Luiz F. B. Malta (PQ)⁴, Jaqueline D. Senra (PQ)^{3*}

vitor.asds@gmail.com; jdsenra@gmail.com

¹Escola de Química, UFRJ; ²Faculdade de Engenharia, UERJ; ³Instituto de Química, UERJ; ⁴Instituto de Química, UFRJ;

Palavras Chave: Nanoparticles, Palladium, Gold, Catalysis, Cyclodextrin, SEM

Highlights

Au-Pd nanoparticles were synthesized in the presence of cyclodextrins; SEM-FEG analyses showed NPs with mean diameter of 25 nm; The nanomaterials can serve as photocatalysts for Suzuki reactions.

Resumo/Abstract

Metallic nanoparticles (NPs) show very different optical and electronic properties when compared to their bulk counterparts, especially by virtue of the large surface-to-volume ratio; therefore a large fraction of the metal atoms is on the surface available for catalysis [1]. In the present work, it is intended to prepare and characterize Au-Pd bimetallic NPs and evaluate their activity as catalysts in Suzuki-Miyaura reactions. AuNPs were synthesized by following the Turkevich method [2]. Bimetallic NPs were synthesized by addition of 2-hydroxypropyl- β -cyclodextrin to a mixture of previously prepared AuNPs and sodium tetrachloropalladate (II) under 80 °C for 30 minutes. The dispersion was characterized by SEM-FEG and UV-vis spectroscopy. SEM-FEG image (fig. 1) showed particles with a mean diameter of 25 nm.

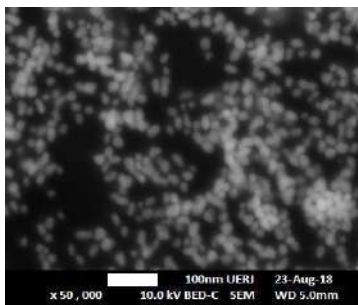


Figure 1. SEM-FEG image of Au-Pd NPs

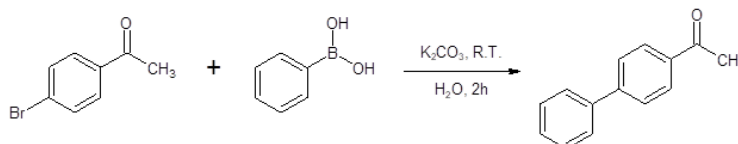


Figure 2. Reaction conditions

The Au-Pd NPs (1 mol% Pd) were tested as catalysts for the cross-coupling reaction of 4-bromoacetophenone and phenylboronic acid at room temperature in neat water, using a halogen lamp. This simple condition allowed an average of 80% yield. The product was characterized by GCMS. Reactions with less activated substrates are underway.

Agradecimentos/Acknowledgments

FAPERJ, CNPq and CAPES.

[1] SILVA, A. C., SOUZA, A. L. F., SIMÃO, R. A. S., MALTA, L. F. B. *A Simple Approach for the Synthesis of Gold Nanoparticles Mediated by Layered Double Hydroxide*. Journal of Nanomaterials. v.2013, 2013.

[2] TURKEVICH, J., STEVENSON, P. C., HILLIER, J. *A study of the nucleation and growth processes in the synthesis of colloidal gold*. Discussions of the Faraday Society. v.11, p.55-75, 1951.

Momento Químico: uma análise preliminar acerca da circulação de um jornal acadêmico

Rebeca Benkendorf (IC),^{1*} Brenno R. M. Oliveira (PQ),¹ Fabiola S. F. Sell (PQ),¹ Tatiana Comiotto (PQ).¹

rebecabenkendorf@gmail.com

¹ Departamento de Química, Centro de Ciências Tecnológicas – UDESC.

Palavras Chave: *Jornal universitário, Divulgação científica, CTS, Ensino de química.*

Highlights

Momento Químico: a preliminar analysis about the circulation of an academic journal

This paper presents a research conducted in November 2018 to analyze the quality and opinion of students about the journal *Momento Químico* realized through a questionnaire.

Resumo/Abstract

O *Jornal Momento Químico* é um programa de extensão da Universidade do Estado de Santa Catarina (UDESC) em que licenciandos em química escrevem textos sobre um tema relacionado à química com o objetivo de aproximar alunos de graduação e do ensino médio dos conhecimentos científicos explorados na universidade, trazendo conteúdos escritos de forma simples e de fácil compreensão.¹ Cada edição é composta por alguns gêneros textuais, dentre eles entrevistas, textos históricos, curiosidades e textos educacionais.

No segundo semestre do ano de 2018 foi desenvolvida uma pesquisa com um grupo de alunos da graduação, leitores do jornal, para avaliar a percepção desses em relação a circulação do mesmo, com questões objetivas e discursivas, analisando alguns pontos da qualidade gráfica e de conteúdo do jornal, com espaços para as opiniões de melhorias e sugestões desses alunos. A partir dessa aplicação piloto do questionário pretende-se ampliar o estudo com alunos do Ensino Médio que recebem o jornal, analisando também a visão desses alunos sobre o *Jornal Momento Químico*.

Ao analisar as respostas pode-se perceber que o jornal tem uma boa aceitação do público: 81,8% dos alunos concordam totalmente com a afirmação de que os temas trazidos pelo jornal são interessantes (enquanto 18,2% restantes concordam parcialmente com a afirmação). A parte gráfica do jornal também foi bem avaliada, sendo que a avaliação geral do jornal é que 27,3% dos alunos consideram o jornal muito bom e 72,7% consideram bom.

Quanto as perguntas descritivas, foi possível analisar a opinião dos alunos e verificar se houve aprendizagem com a leitura do jornal. Ao perguntar a participante A sobre o que foi aprendido com a leitura da última edição do jornal, sua resposta foi: “*Tudo que foi apresentado, porque sempre existe algo novo*”. Embora a resposta não permita verificar se de fato houve aprendizagem e o que foi aprendido, ela dá indícios da boa aceitação por parte da leitora em relação a linguagem e os conteúdos abordados no jornal, uma vez que seu julgamento é de que aprendeu tudo que foi abordado na referida edição.

Ao questionar sobre o diferencial do *Jornal Momento Químico* para os demais, vale destacar que algumas respostas citaram a confiabilidade das fontes de pesquisa, a qualidade gráfica do jornal e a apresentação de conteúdos de química de forma simples e relacionada ao cotidiano.

Com a aplicação dessa pesquisa com um pequeno grupo de alunos foi possível, ainda, analisar a percepção dos envolvidos e em que partes o jornal pode ser melhorado (como na divulgação e na linguagem utilizada), além de gerar novos dados para avaliar a qualidade do conteúdo que é proposto.

¹ FREINET, Célestin. *O Jornal Escolar*. Lisboa, Portugal: Estampa, 1974.

Agradecimentos/Acknowledgments



Nanopartículas de ouro bioconjugadas com a enzima tripsina

Leidiane Almeida Santos (PG)^{1*}, José G. M. Siqueira (PG)¹, Elaine A. de Farias (PQ)², Marccus V. A. Martins (PQ)³, Jocélia P. de C. Oliveira (PQ)¹

leidianealmeida_cat@hotmail.com

¹Unidade Acadêmica especial de Química, Universidade Federal de Goiás / Regional Catalão – UFG/Regional Catalão;

²Instituto Federal de Goiás, Campus Inhumas – IFG / Inhumas. ³Instituto Federal Goiano, Campus Avançado Catalão – IF Goiano / Catalão

Palavras Chave: Nanopartículas de ouro, tripsina, estabilização.

Highlights

Synthesis of bioconjugated trypsin gold nanoparticles.

Synthesis of gold nanoparticles conjugated to trypsin was performed, and the results showed positive results regarding the stabilizing potential of the enzyme.

Resumo/Abstract

A conjugação de nanomateriais metálicos com materiais biológicos tem atraído o interesse de diversas pesquisas devido aos efeitos sinérgicos gerados no bionanomaterial.¹ Em especial, nanopartículas de ouro conjugadas com moléculas biológicas são extensivamente produzidas para aplicações diversas como biodispositivos, catálise enzimática, etc.² Dentro deste contexto, realizou-se a síntese de nanopartículas de ouro (NpAu), usando como agente de estabilização a enzima tripsina (Tri). A formação do sistema bioconjugado NpAu/Tri pode ser observado por meio da Espectroscopia na região do Ultravioleta e Visível (UV-VIS) e na região do Infravermelho (FTIR). A figura 1 mostra o espectro UV-VIS para a tripsina (preto) onde não há bandas de absorção. No entanto, observa-se nitidamente uma banda com absorção máxima em 314 nm para a solução de H₂AuCl₄ (azul), típica das transições eletrônicas do íon Au³⁺. Após a síntese, observa-se uma banda com máximo de absorção em 545 nm (vermelho), típica da absorção plasmônica do ouro em tamanho nanométrico. A figura 2 apresenta os espectros na região do IR para a tripsina (preto) e para o sistema NpAu/Tri (vermelho). Em ambos os espectros observam-se praticamente os principais modos vibracionais que caracterizam a tripsina. Os picos em 1608 cm⁻¹, 1437 cm⁻¹ e 1085 cm⁻¹ podem ser atribuídos, respectivamente para o estiramento C=O, deformação N-H e estiramento C-O. Entretanto, para o sistema NpAu/Tri esses três modos vibracionais deslocam-se, respectivamente para 1624 cm⁻¹, 1514 cm⁻¹ e 1078 cm⁻¹. Esses deslocamentos indicam uma interação entre a superfície da Np com a enzima tripsina, a qual atua como matriz de estabilização.

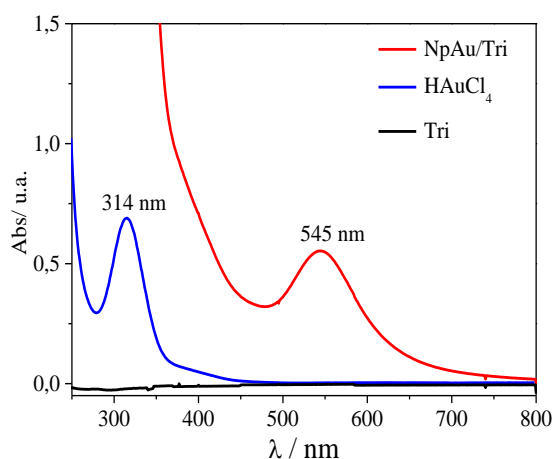


Figura 1: Espectros UV-VIS para tripsina (preto), H₂AuCl₄ (azul) e NpAu/Tri (vermelho).

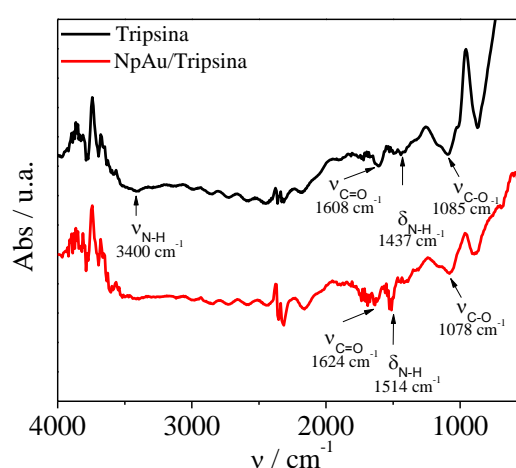


Figura 2: Espectros de FTIR para a tripsina (preto) e NpAu/Tri (vermelho).

¹ Willner I.; Baron R.; Willner B. *Advanced Mater* 18:1109–1120. (2006)

² Ghosh P.; Han G.; De M.; Kim C. K.; Rotello V. M. *Advanced Drug Delivery Reviews*, volume 60, p1307-1315 (2008)

Agradecimentos/Acknowledgments

UFG/Regional Catalão e a CAPES.

Área: EDU

Nº de Inscrição: 01139

Psicologia da Educação: uma experiência no curso de Licenciatura em Química

Júlia da Silva (IC),¹ Lara Luciano da Silveira (IC),^{1*} Tatiana Comiotto (PQ).¹

julia_dasilva@outlook.com; silveiralarals@gmail.com

¹Departamento de Química, Centro de Ciências Tecnológicas - UDESC

Palavras Chave: *Construtivismo, Experiências de Piaget, Licenciatura em Química, Psicologia da Educação.*

Highlights

Educational psychology: an experience in Chemistry Licentiate Degree

Addresses issues that are discussed in education psychology's classes counting with the participation of the Chemistry Licentiate Degree's academics. The Chemistry Licentiate Degree's academics and future teachers must be able to identify and respect the development level of their students according with the Jean Piaget's determinations.

Resumo

Por muito tempo imaginava-se que o estudo de química era oriundo unicamente do esforço dos alunos através da memorização do conteúdo. Assim, os estudantes tinham uma grande dificuldade de aprendizado e não conseguiam compreender o assunto exposto (CUNHA, 2012). Percebeu-se, então, a importância do conhecimento das teorias de aprendizagem que têm por objetivo identificar a dinâmica entrelaçada nos atos de ensinar e aprender e procura explicar a relação entre o conhecimento pré-existente e o novo conhecimento. Neste sentido, a disciplina de Psicologia da Educação busca fornecer tais ensinamentos em sua ementa aos acadêmicos de Licenciatura em Química (PRADO NETTO; COSTA, 2017). Durante a disciplina de Psicologia da Educação, oferecida pela UDESC-CCT, os alunos aprendem diversas teorias de aprendizagem, mas o destaque está na teoria construtivista e a influência de Jean Piaget para a educação. Através dessa abordagem os futuros professores podem compreender melhor como o desenvolvimento cognitivo dos alunos é construído. Para isso, é proposto um trabalho em que os estudantes realizam experiências de Piaget com algumas crianças – de acordo com a idade cronológica - para avaliar em qual estágio de desenvolvimento intelectual o aluno se encontra. Após isso, essas análises são apresentadas em sala de aula para a professora e os demais acadêmicos, estabelecendo um comparativo entre os aspectos teóricos das conclusões de Piaget e o que acontece na prática com as crianças na atualidade. Segundo as opiniões de alunos que já realizaram essa atividade, foi possível perceber que embora cada criança aprenda de uma forma diferente, geralmente as conclusões são muito semelhantes ao que Piaget encontrou na época de suas pesquisas. Outros acadêmicos, ao apresentarem suas considerações, percebem como interessante o fato que cada aluno confeccionar seu próprio material para realizar as experiências. Além disso, percebem que algumas crianças com a mesma idade cronológica podem apresentar diferentes níveis de desenvolvimento cognitivo. Outros acadêmicos, ainda, opinaram que em suas práticas pedagógicas futuras, em sala de aula, será possível perceber quais os pontos devem ser enfatizados para resgatar o que cada aluno não conseguiu aprender, garantindo, assim, uma melhor aprendizagem. Através da realização das experiências de Piaget, os estudantes de Psicologia da Educação conseguem analisar em qual nível de desenvolvimento cognitivo o aluno se encontra e, dessa maneira, entender que todas as pessoas possuem o seu próprio ritmo de aprendizagem. Sendo assim, os acadêmicos e futuros professores poderão adaptar sua forma de ensino respeitando as características dos seus alunos.

Referências

- CUNHA, M. B. Jogos no ensino de química: considerações teóricas para sua utilização em sala de aula. *Química Nova na Escola*, São Paulo, v. 34, n. 2, p. 92-98, 2012.
- PRADO NETTO, A.; COSTA, O. S. A importância da psicologia da aprendizagem e suas teorias para o campo do ensino-aprendizagem. *Fragmentos de Cultura*, Goiânia, v. 27, n. 2, p. 216-224, 2017.

Área: EDU

Nº de Inscrição: 01140

O uso de Weblog para a publicação do Jornal Momento Químico

Carlos E. Rocha (IC),¹ Daniela Stöhr (IC),¹ Karoline S. Tarnowski (PG),¹ Lara L. da Silveira (IC),¹ Lucas Kunicki (IC),¹ Gustavo B. de Oliveira (IC),¹ Rebeca Benkendorf (IC),¹ Lucas Speranza (IC),¹ Brenno R. M. Oliveira (PQ),¹ Fabiola S. F. Sell (PQ),¹ Tatiana Comiotto (PQ)¹.

carloosedurocha10@gmail.com

¹Departamento de Química, Udesc - CCT.

Palavras Chave: Weblog, Química, Mídia Digital, Jornal, Divulgação Científica

Highlights

The use of Weblog for the publication of the Jornal Momento Químico. Momento Químico has its primal function at the democratization of the scientific knowledge, and Scientific dissemination in a blog.

Resumo/Abstract

Weblog ou sua abreviação mais corriqueira *Blog*, significa registro eletrônico na Internet. Os *blogs* são caracterizados por uma página da *Web* (rede mundial de computadores), onde são apresentados blocos de texto chamados de *posts* (mensagens), sendo escritos pelo autor do *blog* ou convidados (BARRO, et al. 2008). O estudo sobre a utilização de *blogs* na educação vem crescendo nos últimos anos. Gomes e Silva (2006) apud Barro (2009) destacam que o "*blog* educacional", tem um caráter mais abrangente em sua utilização, e é empregado como recurso educativo adicional. Nesse sentido, Barro (2009), afirma que o *blog* tem função de possibilitar a autoria individual ou múltipla, assim como constitui-se de uma ferramenta de comunicação, através de comentários. O *blog* Momento Químico – www.jornalmomentoquimico.wordpress.com –, faz parte de um programa de extensão intitulado "Jornal Momento Químico", da Universidade do Estado de Santa Catarina, campus Joinville-SC, e tem como sua principal função a democratização do conhecimento científico, podendo propiciar um recurso adicional para os visitantes da página. No geral, o programa de extensão tem por principal objetivo a divulgação científica voltada para a química. Diante disso, o objetivo deste trabalho é de analisar a receptividade dos internautas em relação ao uso do *blog* e acesso às informações nele divulgadas. Os resultados obtidos através da plataforma *Wordpress*, para o *blog* Momento Químico, apresentaram uma crescente visualização das postagens, sendo que no ano de seu início (em 2015) foram 210 visualizações. Já em 2018, obteve-se 7.503 visualizações. Durante todo o período de 2015 a 2018 o *blog* foi visualizado 16.247 vezes, com 8.993 visitantes. A publicação com maior destaque foi a "Química Alimentar e a Reação de Maillard" – <https://bit.ly/2PsJmJ> –, tendo um total de 1.163 visualizações. O *blog*, também, é acessado em vários países, sendo a maior parte de acesso vindo do Brasil, com 13.110 acessos, seguido pelo Estado Unidos com 2.346 e posteriormente por Portugal, com 365 acessos. Atualmente o *blog* publicou 76 *posts* que são os textos completos da edição bimestral do Jornal Momento Químico. A plataforma de mídia digital *blog* propicia divulgação de textos científicos de maneira rápida e dinâmica, uma vez que estes textos podem ser comentados, editados e alterados. O *blog* apresentou uma grande busca, por parte dos usuários, para certos conteúdos como a reação de Maillard. Esta publicação é importante para incentivar o estudo na área de química de alimentos e instigar a curiosidade daquele que busca por textos bem embasados de química. Espera-se futuramente realizar um estudo mais amplo acerca dos conhecimentos adquiridos pelos visitantes do *blog* a partir da leitura das matérias produzidas pela equipe do Jornal Momento Químico.

Agradecimentos/Acknowledgments



Referências:

- BARRO, Mario R.; FERREIRA, Jerino Q.; QUEIROZ, Salete L. Blogs: Aplicação na Educação em Química. Química Nova na Escola. n. 30, p. 10, nov. 2008.
- BARRO, Mario R. Blogs como ferramenta de apoio ao ensino presencial em uma disciplina de comunicação científica para graduandos em química. 2009. 200 f. Dissertação (Mestrado em Ciências - Química Analítica) - Instituto de Química de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2009.

Avaliação de metodologias sintéticas para obtenção de conjugados quinolonotriazólicos

Pedro F. Regufe (IC)¹, Vanessa G. Oliveira (PG)¹, Fernanda C. S. Boechat (PQ)¹, Maria Cecília B. V. de Souza (PQ)¹
pedroregufe@gmail.com

¹Universidade Federal Fluminense, Departamento de Química Orgânica - Instituto de Química – CEG – Outeiro de São João Batista-s/nº - Valonguinho - 24020-150 - Niterói – RJ

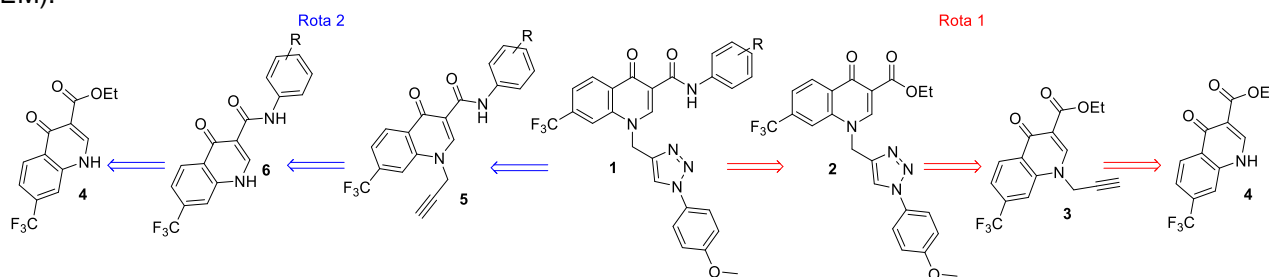
Palavras Chave: Quinolona, Triazol, Carboxamida, Conjugados Quinolonotriazólicos

Highlights

Evaluation of synthetic methodologies for the synthesis of quinolonotriazole conjugates. Non-classical activity of quinolones.

Resumo/Abstract

Muitos derivados 4-quinolônicos são utilizados na clínica como antibacterianos. Ao longo dos anos, diversas modificações foram realizadas nesse núcleo, levando a substâncias com atividades biológicas ditas não clássicas, tais como antitumoral, antiparasitária, dentre outras. Cabe destacar que as quinolonas possuem grande versatilidade biológica e sintética. Nesse trabalho foi sintetizada uma série de conjugados quinolonotriazólicos do tipo **1** explorando-se inicialmente duas rotas sintéticas. O alvo sintético **1a** (R=H) foi escolhido para o estudo de otimização das rotas. Na rota sintética 1, **1a** (R=H) foi obtido através de reação de substituição nucleofílica à carbonila do éster **2a**, sintetizado a partir da reação de cicloadição entre o p-metoxi-azidobenzeno e a quinolona propargilada **3** proveniente da N-alkilação do derivado quinolônico **4** obtido por metodologia descrita na literatura. Na rota sintética 2, **1a** (R=H) foi preparado a partir da reação de cicloadição entre a quinolonocarboxamida do tipo **5** e o p-metoxiazidobenzeno. A quinolona **5** em questão foi resultante da propargilação do composto **6**, obtido reagindo-se a quinolona **4** com anilina. Observou-se que com o emprego da rota 2 o conjugado **1a** foi obtido com melhores rendimentos referentes às etapas individuais, e de forma exclusiva na etapa de cicloadição (95 % após recristalização em etanol). Na rota 1, a etapa de conversão do éster **2a** no composto alvo **1a**, se deu em condições de alta temperatura (250 °C), utilizando-se difeniléter como solvente, levando ao isolamento do produto com 9 % de rendimento. Esta mesma metodologia foi aplicada na primeira etapa da rota 2, sendo o intermediário **6** isolado puro, com rendimento de 60 %. Concluiu-se que a etapa que foi determinante quanto à melhor rota sintética foi a de substituição nucleofílica na carbonila do grupo éster. Tendo sido determinada a melhor rota sintética, esta foi empregada para a obtenção dos demais conjugados desejados. Os novos conjugados e os intermediários de síntese foram caracterizados por métodos espectroscópicos (IV, RMN de ¹H e de ¹³C, EM).



R= H; 3-Cl; 4-Cl; 3-CH₃; 4-CH₃; 3-OCH₃; 4-OCH₃; 3-Br; 4-Br; 3-I; 4-I; 3-F; 4-F; 3-NO₂; 4-NO₂

Esquema 1: Retrosíntese 1 e 2

Agradecimentos/Acknowledgments

Os autores agradecem a CAPES, CNPQ, CNPQ-PIBIC, FAPERJ, PPGQ-UFF e PPGCAPS-UFF. O presente trabalho foi realizado com apoio da Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior - Brasil (CAPES) - Código de Financiamento 001. Agradecemos ao prof. Dr. Pedro Netto Batalha pelas sugestões dadas no decorrer do trabalho.

42ª Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química: Eixos Mobilizadores em Química

Área: EDU

Nº de Inscrição: 49294

Tenda da Ciência: Ampliar os meios de ensino alternativos para a comunidade

(IC)* Maria Luiza dos Santos¹, (PQ) Tatiana Comiotto², (IC) Mariana Pellense Ignácio, (IC) Manoella de Lima, (IC) William Slominski;

*Marialuiza.santos.mlds41@gmail.com

¹Departamento de Química

²Comiotto.Tatiana@gmail.com

Palavras Chave: (Ensino, Comunidade, Feira, Química).

Highlights

Booth of Science: Expand the means of alternative education for the Community

This abstract has the main objective to expose the different ways in which efficient teaching resources can be evidenced, which in turn has the potential to help the teacher in the classroom. Our project aims at this artifice as a valuable teaching method, for this, we use didactic games made by students of the university and improved in the Project.

Resumo/Abstract

Em setembro de 2018 o projeto Materiais didáticos pedagógicos para o Ensino de Ciência do laboratório LAPSI – laboratório de psicologia da educação para o ensino de ciências, realizou juntamente com os demais projetos da UDESC a Tenda da Ciência, quatro escolas estaduais de ensino médio visitaram juntamente com seus professores, houve também visitas de pessoas da comunidade, assim como na figura 1.



Figura 1: Tenda da Ciência

A equipe do projeto levou o jogo da memória com o tema elementos químicos, que ajuda a memorizar o que do nosso cotidiano está associado aos elementos da tabela periódica, também o baralho químico onde pode-se aprender de uma forma diferente a nomenclatura de compostos inorgânicos e o grude da química em que o aluno pode montar estruturas de hidrocarbonetos através de dicas.

Foram feitas algumas demonstrações dos jogos, expondo suas regras, as áreas da química utilizadas em cada jogo e incentivando aos participantes que jogassem breves partidas dos jogos para que assim se familiarizassem e transmitissem suas opiniões, o que obtivemos de retorno desses alunos é que entendem que suas aulas se tornariam mais divertidas com esse complemento de aula, já os professores relataram que esse método ajudaria e muito nas aulas, pois por diversas vezes é difícil manter a atenção dos alunos e desenvolver atividades em grupo.

O que o projeto visa levando seus jogos a eventos como tenda da ciência é conscientizar a comunidade de que existem outros meios de ensino além dos que já estamos habituados, frisamos sempre que os jogos são complementos para a aula e não substituição, são meios também que os alunos aprendem matérias complexas como é a química e acabam tendo um maior interesse pela área.

Acknowledgments



Área: ORG

(Inserir a sigla da seção científica para qual o resumo será submetido. Ex: ORG, BEA, CAT)

Nº de Inscrição: 01143

(Inserir o número de inscrição do autor que fez a submissão)

Synthesis of *N*-triazolyl-4-oxoquinoline derivatives as potential antitumor agents

Nathalia M. de C. Tolentino (PG),^{1*}Thiago M. do Vale (IC),¹João Henrique Ferreira (IC),¹Ronaldo da Costa Ferraz (TM),¹Pedro Netto Bathalha (PQ),¹Maria Cecília B. V. Souza (PQ),¹Fernanda da C. S. Boechat (PQ).¹

nathy_tolentino@hotmail.com; thiagomota_tm@hotmail.com

¹Departamento de Química Orgânica, UFF

Keywords: quinolones, triazole, cancer

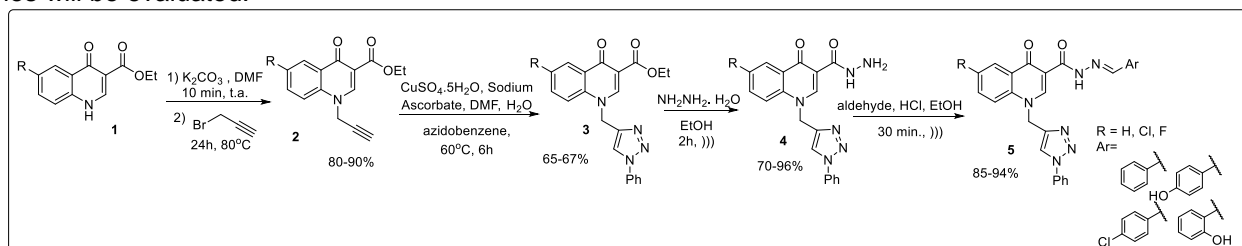
Highlights

N-triazolyl-4-oxoquinoline derivatives were designed and synthesized potential antitumor agents. They were obtained in 31-54% global yield and were fully characterized using spectroscopic analysis.

Resumo/Abstract

4-oxoquinoline derivatives are a well-known class of antibacterial heterocycles very explored in medicinal chemistry for the synthesis of drug candidates. Besides the already known antibacterial activity, other biological activities are also described in the literature for quinolones, such as antitumor activity, for example.¹ Our research group works with structural modifications at different positions of 4-oxoquinolines in order to obtain derivatives with potential antitumor activities in the search for new anticancer agents. As part of our ongoing research, in this work we describe the synthesis of new 4-oxoquinoline derivatives derivatives **5**, containing the triazole unity at the *N*-1 position of the oxoquinoline nucleus and the acylhydrazone moiety at the C-3 position, and subsequent biological evaluations of their antitumor activity.

In order to obtain derivatives **5**, 4-oxoquinolines **1** were submitted to a *N*-alkylation reaction using potassium carbonate, DMF as the solvent and propargyl bromide as the alkylating agent, leading to *N*-propargyl-4-oxoquinoline derivatives **2**, which undergone cycloaddition reaction with azidobenzene under copper (I) catalysis to afford *N*-triazolyl-4-oxoquinolines **3**. Derivatives **3** were submitted to carbonyl substitution reaction using hydrazine monohydrate as nucleophile and ethanol as solvent.² The obtained carbohydrazide derivatives **4** were reacted with different aldehydes, using HCl as catalyst and ethanol as solvent to give the desired compounds **5**, in a range of 31-54% global yield.³ All the substances synthesized were fully characterized by spectroscopic methods. The antitumor activity of derivatives **3**, **4** and **5** against different cell lines will be evaluated.



Scheme 1: Synthetic route for the obtention of *N*-triazolyl-4-oxoquinoline derivatives.

Acknowledgments

CAPES, CNPq, FAPERJ. This study was financed in part by the Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior - Brasil (CAPES) - Finance Code 001.

References

- Ramos, P. O. *Síntese de novos 1-H-tetrazolil-quinolonocarboxamidas e prospecção de sua atividade anticâncer*. Dissertação de Mestrado. Universidade Federal Fluminense. 2015
- Tolentino, N.M.C. *Síntese de novas N-(triazolil)metil-sulfonilidrazidoquinolonas com potencial atividade biológica*. Dissertação de Mestrado. Universidade Federal Fluminense. 2015
- Rangel, A.C.N. *Síntese de novos derivados quinolônicos ribonucleosídeos contendo grupamewnto acilhidrazona em c-3: Potenciais antivirais*. Monografia de Conclusão de Curso. Universidade Federal Fluminense. 2016

Área: EDU

Nº de Inscrição: 01144

Construção de equipamentos de laboratório com materiais alternativos para aulas experimentais de separação de misturas.

Manoel L. Lopes Júnior (PQ),^{1*} Gisele Beatriz O. Dantas (FM),¹ Williams S. Ribeiro (PG),¹ Steven S. Paes (PG),¹ Marivaldo J. C. Corrêa (PQ),¹ Solange B. Quaresma (IC),¹ Railda Neyva M. Araújo (PG),¹ Luely O. Silva (PG),¹ Oscar Augusto S. Romero (PQ),¹ Lourivaldo S. Santos (PQ).¹

manoelleaolopes@gmail.com

¹Programa de Pós-Graduação em Química, Universidade Federal do Pará – UFPA. Belém – PA

Palavras Chave: Separação de misturas, Materiais alternativos, Experimentação.

Highlights

Construction of laboratory equipment with alternative materials for experimental classes. Experimental classes of separation of mixtures. Alternative and low cost materials.

Resumo

Experimentos realizados em laboratório possibilitam aos alunos vivenciarem e construir conhecimentos específicos em diferentes assuntos, considerando que uma aula experimental auxilia na construção de uma prática pedagógica significativa, pois facilita a visualização e compreensão de fenômenos, além de despertar o interesse (ASSUMPCÃO et al., 2010). A elaboração de equipamentos alternativos de baixo custo e de fácil acesso para o laboratório, surge como uma forma de viabilizar as experiências em escolas com ausências de equipamentos específicos para a prática (CARVALHO et al., 2012). Neste sentido, este trabalho teve como objetivo a construção de equipamentos, utilizando materiais alternativos em uma aula experimental tendo como tema “Métodos de separação de misturas”, com a finalidade de proporcionar a realização de aula prática, bem como a avaliação desta. A pesquisa foi realizada com cento e doze alunos do primeiro ano do ensino médio na Escola Estadual de Ensino Fundamental e Médio do Outeiro, localizada na região metropolitana de Belém-PA. Para a coleta de dados, em um primeiro momento foi realizada a observação participativa com finalidade de diagnosticar o conhecimento e o interesse dos alunos pela disciplina, em seguida foram utilizados dois questionários que foram aplicados antes e depois da realização da aula experimental, e também foi realizada uma entrevista com o professor de química responsável, onde foram tomadas as opiniões dos alunos e do professor, a fim de avaliar o efeito da experimentação com materiais alternativos. Os resultados obtidos por meio de questionários e entrevistas mostraram que a experimentação com materiais alternativos possui valor pedagógico relevante, pois relaciona a teoria vista em sala de aula com o cotidiano, motivando os alunos e impactando de forma positiva o processo ensino/aprendizagem.



Conclui-se após a realização deste trabalho a importância de aulas experimentais em química com materiais alternativos, como um recurso de ensino válido para ser inseridos em sala de aula, pois os materiais são de baixo custo e de fácil reprodutibilidade, acessíveis para a realização de aulas experimentais, contribuindo para o processo de ensino e aprendizagem em química.

Referências:

ASSUMPCAO, M. H. M. T. et al. Química (UNESP. Araraquara. Impresso), v. 35, p. 133- 138, 2010.
CARVALHO, Renata. F. et al. XVI Encontro Latino Americano de Iniciação Científica. XIV INIC, 2012, São Paulo. Anais do XVI Encontro Latino Americano de Iniciação Científica, 2012.

Agradecimentos

CAPES, CNPq, PPGQ/UFPA.

42ª Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química: Eixos Mobilizadores em Química

Síntese de β -hidróxi aldol opticamente ativo utilizando diferentes organocatalisadores

Mariana C. O. Tibes (IC),¹ Cristiane Pilissão (PG),¹

marianatibes@alunos.utfpr.edu.br;

¹Departamento de Química e Biologia (DAQBi), UTFPR.

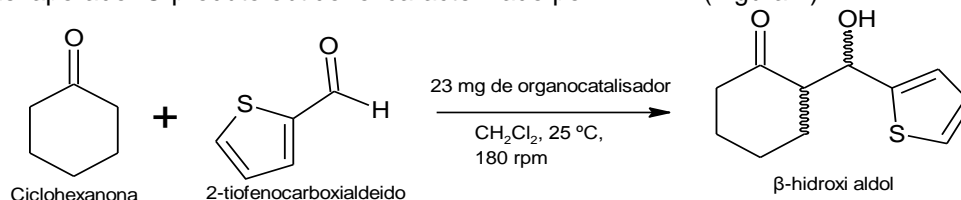
Palavras Chave: Organocatálise, Reação Aldólica, Aminoácidos, Estereosseletividade.

Highlights

Synthesis of optically active β -hydroxy aldol using different organocatalysts. Organocatalysts are asymmetric catalysts with many advantages such as low toxicity and low cost. The use of organocatalysts in the Aldol Reaction was evaluated using cyclohexanone and 2-thiophenecarboxaldehyde on the synthesis of β -hydroxy aldol, resulting in high conversion and diastereoselectivity.

Resumo/Abstract

A organocatálise é uma área de investigação promissora devido a facilidade na obtenção do organocatalisador, sendo estes facilmente estocáveis, atóxicos, e de custo reduzido. As reações de adição aldólica organocatalisadas apresenta uma alternativa interessante para a síntese de β -hidróxi aldol opticamente ativos que podem ser aplicados na síntese de fármacos, e na agroquímica.^[1,2] Este trabalho tem como objetivo avaliar a eficiência catalítica de diferentes aminoácidos, tais como, a L-Prolina, L-histidina, L-Leucina e Lisina (20mol%) nas reações de adição aldólica usando o 2-tiofenocarboxialdeído (1 mmol) e a ciclohexanona (5 mmol) em 1,5 mL de diclorometano, esta mistura reacional foi mantida sob agitação a temperatura ambiente por 120 horas (Esquema 1). Ao término da reação o catalisador foi removido e o solvente rotaevaporado. O produto obtido foi caracterizado por ¹H RMN (Figura 1).



Esquema 1: Síntese do β -hidróxi aldol utilizando aminoácidos como catalisador.

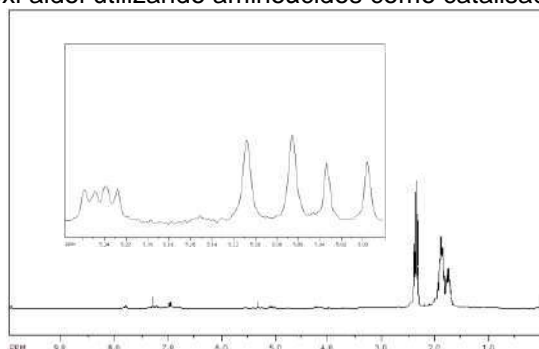


Figura1: RMN da região referente ao diastereoisômeros.

Observa-se o aparecimento de dois quartetos, um em $\delta = 5,04$ ppm referente ao isômero trans e outro em $\delta = 5,24$ ppm referente ao isômero cis. Conclui-se assim que a reação foi diastereosseletiva sendo que o produto que foi obtido predominante foi o trans, com 74% de conversão.

Agradecimentos/Acknowledgments

CNPq, CAPES, DAQBi-UTFPR, PPGQ-UTFPR.

[1] KON, K.; KOHARI, Y.; MURATA, M. *Tetrahedron Lett.* 60, 5, **2019**, 415–418.

[2] LIST, B.; LERNER, R. A.; BARBAS, C. F. *J. Am. Chem. Soc.* 122, 10, **2000**, 2395–2396.

42ª Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química: Eixos Mobilizadores em Química

Área: ORG

(Inserir a sigla da seção científica para qual o resumo será submetido. Ex: ORG, BEA, CAT)

Nº de Inscrição: 01146

(Inserir o número de inscrição do autor que fez a submissão)

Synthesis of water-soluble quinolone derivatives containing acylhydrazone/1,3,4-oxadiazole groups as potential anticancer agents.

Ana Paula C. Rocha (IC),^{1*} Mariana de P. Batista (IC),¹ Pedro N. Batalha (PQ),¹ Fernanda da C. S. Boechat (PQ),¹ Maria Cecília B. V. de Souza (PQ).¹

anapaulacaetanorocha@gmail.com

¹Departamento de Química Orgânica, Instituto de Química, Campus do Valonguinho, Universidade Federal Fluminense

Palavras Chave: quinolone, acylhydrazone, 1,3,4-oxadiazole, water-soluble, anticancer agents

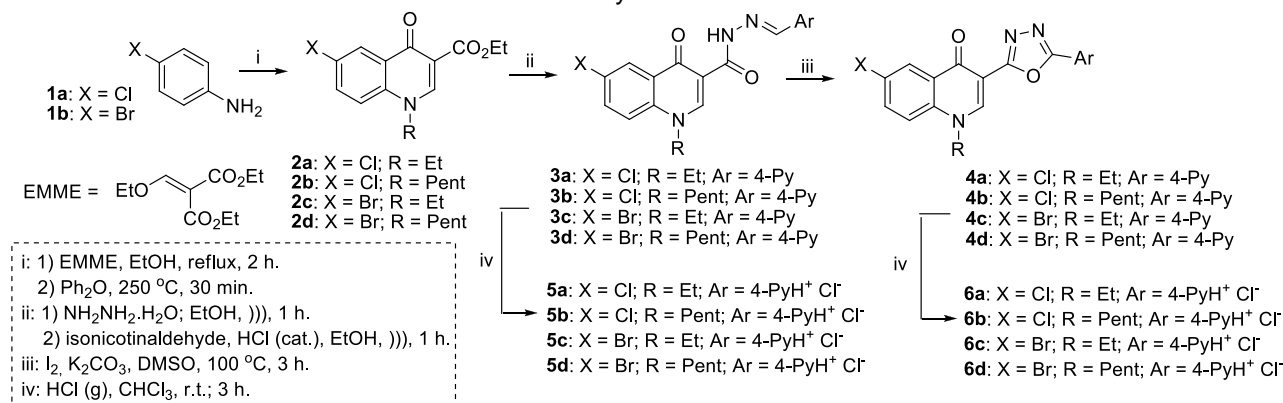
Highlights

Quinolone derivatives as potential anticancer agents. Water soluble derivatives with expected increased bioavailability. Presence of acylhydrazone and 1,3,4-oxadiazole groups as pharmacophores.

Resumo/Abstract

Cancer is a multifactorial disease of complex nature and difficult treatment, which afflicts a large number of people around the world. Chemotherapy is one of the most used clinical strategies against this disease. Despite this, it is associated with several limitations such as high cost, side effects due to low selectivity in relation to normal cells and the emergence of primary and secondary resistance. The development of new anticancer substances with improved selectivity in relation to healthy cells, therefore, becomes urgent. The strategy of combining different structural frameworks present in substances with known antineoplastic activities in a single structure is a well explored tool in Medicinal Chemistry as a way of planning new substances with an even more efficient bioactive profile, in order to increase the arsenal available against cancer. In this regard, a series of 4-oxoquinoline containing in their structure acylhydrazone and 1,3,4-oxadiazole groups bonded to a pyridinium chloride moiety were planned and synthesized in order to possibly act as anticancer agents with good bioavailability.

N-alkylated quinolone esters (**2**), prepared through the Gould-Jacobs method, were converted into their respective acylhydrazones (**3**) through treatment with hydrazine monohydrate followed by condensation with isonicotinaldehyde. Acylhydrazones **3** were treated with iodine and potassium carbonate in order to obtain oxadiazoles (**4**), through oxidative cyclization. Derivates **3** and **4** were solubilized in chloroform and converted into the respective hydrochloric salts (**5** and **6**), by injection of hydrochloric acid gas (**Scheme 1**). Substances **6** and **7** will have their anticancer activity evaluated.



Agradecimentos/Acknowledgments

O presente trabalho foi realizado com apoio da Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior - Brasil (CAPES) - Código de Financiamento 001; CNPq; FAPERJ

Área: EDU

Nº de Inscrição: 01147

THE DETERMINATION OF THE ETHANOL CONTENT IN COMMON GASOLINE AS AN EXPERIMENTAL ACTIVITY FOR THE TEACHING OF CHEMISTRY IN EDUCATION OF YOUTH AND ADULTS

Carlos César da Silva (FM),^{1*} Eulália Cristina Rodrigues Ficks (FM)²

ccezasa@gmail.com; fickseulalia@hotmail.com

¹Departamento de Áreas Acadêmicas, IFG – Câmpus Jataí; ²Secretaria de Estado de Educação - MT

Palavras Chave: (Teaching of Chemistry, Experimental Activity, Youth and Adults).

Highlights

A teaching strategy involving experimental activity based on daily situation as calculation of ethanol content in gasoline was analyzed for the teaching of chemistry in the EJA, in particular separation of materials, fuels and energy.

Abstract

Introducion

This study, included in the theoretical framework in Chemistry, aimed to promote learning in the Teaching of Chemistry in the Education of Young and Adults (EJA)¹ through the use of a Teaching Strategy (EE) for experimentation². In order to do so, was created, whose title "Determination of the alcohol content of gasoline" sought to promote the relationship between the student's previous knowledge and the construction of scientific knowledge in relation to the concepts of chemistry present in social everyday life such as separation of materials, fuels and energy.

Methodology

The activity was carried out with the 1st year of the Secondary Education Course of Young Adults Education (EJA), the class was divided into six work groups and the activity was distributed in two classes of ninety minutes each based on the three pedagogical moments³ and adaptation of methodology⁴. Two samples of common gasoline, 50 mL beakers, 10 percent solution and sodium chloride in water were used. The instrument of data collection used in this study were questionnaires applied before and during the experimental activity. The questions dealt with the presentation and discussion of the theme, and students' perceptions about the chemical aspects involved from manufacturing to making decisions about the type of fuel to be used and their social and environmental implications.

Results an discussion

The results obtained not only attested to the participation and interest of the group but also pointed out the relevance of the use of the experimental activities in the teaching of Chemistry, since such activities encourage dialogue between popular and scientific knowledge, considering that chemical events are constitutive parts of society. The greatest difficulty was found in intermolecular interactions, especially hydrogen bonds, which require greater knowledge and concepts of chemical bonds of chemical formulas, although it allowed the discussion and perception about the scientific concepts essential for the positioning in front of this theme. The activity, although very simple, presented potential for the EJA and if adapted can be applied to other teaching modalities.

Conclusion

The activity involved daily life in a scientific perspective, taking into account the popular knowledge for appropriation of the chemical concepts of density, separation of materials and fuels.

References

¹SANTOS, J. P. V. O Ensino de Química na Educação de Jovens e Adultos do Ensino Médio no Município de Itumbiara - GO. 2016. Tese (Doutorado em Educação em Química), Pós-Graduação em Química, Universidade Federal de Uberlândia, Uberlândia, 2016.

²GONÇALVES, F. P.; BRITO, M. A. Experimentação na educação em química: fundamentos, propostas e reflexões. Florianópolis: Editora da UFSC, 2014.

³DELIZOICOV; ANGOTTI; PERNAMBUCO. Ensino de ciências: fundamentos e métodos. São Paulo, Cortez, 2011.

⁴MORTIMER, E. F.; MACHADO, A. H. Química: ensino médio. 2. ed. São Paulo: Scipione, 2014.

Acknowledgments

Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia de Goiás (IFG) – Câmpus Jataí, Programa de Pós-Graduação em Educação para Ciências e Matemática.

Área: MAT

Inscrição: 01149

Microwave assisted time-efficient green synthesis of upconverting NaGdF₄:Yb³⁺,Tm³⁺ material

Luidgi Giordano (PG),¹ Lucas Carvalho Veloso Rodrigues (PQ)¹

luidgi@iq.usp.br; lucascvr@iq.usp.br

¹Instituto de Química – USP

Palavras Chave: green synthesis, microwave, upconversion, luminescence

Highlights

Green synthesis of a material with luminescent properties. Infrared to visible light conversion. Microwave assisted synthesis. Synthesis optimization.

Resumo/Abstract

Up-conversion is a luminescence process in which absorbed photons have less energy than the emitted ones. It may be related to the material vibronic levels, but it is commonly related to different mechanisms in which two or more photons are absorbed normally in the infrared range and a single one with higher energy (UV-vis) is emitted. ¹

NaGdF₄ is recognized as a great material for up-conversion luminescence, specially in its hexagonal phase (β-NaGdF₄), when doped with Yb³⁺ and Ho³⁺/Tm³⁺/Er³⁺, while also retaining paramagnetic properties related to Gd³⁺ unpaired electrons. ² The usage of Tm³⁺ as a dopant in NaGdF₄ is also of great interest as Tm³⁺ ¹I₆ excited state is able of transferring energy to Gd³⁺ ⁶P_{7/2} state, which emission (~312 nm) is usually only obtained with UV excitation. This energy transfer from Tm³⁺ to Gd³⁺ also facilitates the energy migration inside the solid, as Gd³⁺ is abundant in it, and to another materials attached to it. ³

This work presents the synthesis of this material using a domestic microwave oven as reactor, with low synthesis times (ca. 20 min) in up to 300W. This saves energy when compared to the more traditional solvothermal or co-precipitation methods, with long times in high temperatures for similar materials^{4,5}, yielding particles with ca. 1 μm with little contamination from the cubic phase.

1. Auzel, F. Upconversion and Anti-Stokes Processes with f and d Ions in Solids. *Chem. Rev.* **104**, 139–173 (2004).
2. Baziulyte-Paulaviciene, D. *et al.* Synthesis and functionalization of NaGdF₄: Yb, Er@NaGdF₄core-shell nanoparticles for possible application as multimodal contrast agents. *Beilstein J. Nanotechnol.* **8**, 1815–1824 (2017).
3. Wang, F. *et al.* Tuning upconversion through energy migration in core-shell nanoparticles. *Nat. Mater.* **10**, 968–973 (2011).
4. Wang, F., Deng, R. & Liu, X. Preparation of core-shell NaGdF₄ nanoparticles doped with luminescent lanthanide ions to be used as upconversion-based probes. *Nat. Protoc.* **9**, 1634–1644 (2014).
5. Laihinen, T., Lastusaari, M., Pihlgren, L., Rodrigues, L. C. V. & Hölsä, J. Thermal behaviour of the NaYF₄:Yb³⁺,R³⁺ materials. *J. Therm. Anal. Calorim.* **121**, 37–43 (2015).

Synthesis of mesoporous silica of type MCM - 41 functionalized with amines for CO₂ adsorption

Luciene da Silva Castro (PG),^{1*} Ana Paula de Carvalho Teixeira (PQ),² Arilza de Oliveira Porto (PQ),²

lucienecastro@hotmail.com

¹Departamento de Engenharia Química, UFMG; ²Departamento de Química, UFMG

Keyword: MCM - 41; AMINE; ADSORPTION.

Highlights

Mesoporous sílica (MCM - 41) functionalized with amine. CO₂ adsorption efficiency.

Abstract

Carbon dioxide (CO₂) derived mainly from burning fossil fuels, is one of the main factors that causes global warming which is responsible for major environmental problems. These problems lead to the research and development of for new technologies to capture CO₂. . In this work it was investigated the CO₂ adsorption capacity of mesoporous silica - MCM - 41 functionalized with different amines such as diisopropylamine (DIPA), n - benzoyl n - phenylhydroxylamine (BPHA), naphthylamine (NPA), diphenylamine (DPA) and quinoline (QN) and evaluated the adsorption capacity of CO₂. MCM-41 was synthesized via sol-gel method using cetyltrimethylammonium bromide (CTAB) as surfactant, tetraethylorthosilicate (TEOS) as the silica source, sodium hydroxide (NaOH) as catalyst and water as solvent ¹. The amine functionalization of MCM-41 was carried out by the wet impregnation method and the thermal stability of these impregnated materials was studied by thermal analysis² and all materials showed good thermal stability. The CO₂ adsorption efficiency of these materials was also evaluated by thermogravimetric analysis (TG). For this study the impregnated material was annealed at 105°C and at 10°C/min for 90 minutes in N₂ atmosphere to remove moisture as well as CO₂ adsorbed from the atmosphere. After thermal annealing the adsorbent was exposed to a CO₂ atmosphere at 35°C, 10°C/min with a flow rate of 50 mL/min. CO₂ adsorption capacity was calculated by using TG curves, Fig. 1, and the obtained values were in mg/g (mg of adsorbed CO₂/g of adsorbent): 26.33, 17.20, 18.57, 18.03, 21.78 for DIPA, BPHA, NPA, DPA and QN, respectively. These values were lower than the adsorption capacity of the mesoporous silica functionalized with polyamines such as diethylenetriamine (DETA), tetraethylenepentamine (TEPA), pentaethylenehexamine (PEHA)² and polyethylenimine (PEI)³ but comparable aminopyridine, methylaminopyridine and guanidine⁴.

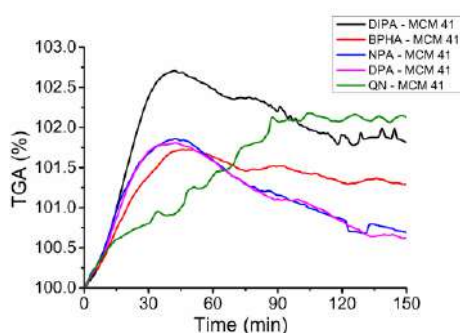


Figure 1 – TGA curves in CO₂ atmosphere.

¹ Martins, A. R. *et al.*, Environ. Sci. Pollut. Res. 24, 5991–6001 (2017).

² Liu, Z. *et al.* J. Energy Chem. 24, 322–330 (2015).

³ Xu, X. *et al.*, Microporous and Mesoporous Mater. 62, 29–45 (2003).

⁴ Santos, T. C. *et al.*, Phys. Chem. Chem. Phys. 17, 11095–11102 (2015).

Acknowledgments

CNPq, CAPES, FAPEMIG, INCT Midas, Departamento de Química e de Engenharia Química – UFMG e Programa de Pós – Graduação da Engenharia Química da UFMG.

Study of the interaction between valsartan and salicylic acid: Mechanochemical synthesis, and characterization by TG-DTA, DSC, XRPD and FTIR

Larissa L. Dinhani (IC)^{1*}, Aniele de Moura (PG)², Laura T. Ferreira (PG)², Flávio J. Caires (PQ)^{1,2}

lari.dinhani@gmail.com; caires.flavio@fc.unesp.br

¹UNESP- São Paulo State University, Institute of Chemistry, Araraquara, SP, Brazil

² UNESP- São Paulo State University, School of Sciences, Chemistry Department, Bauru, SP, Brazil

Key words: Mechanochemical synthesis, Eutectic, thermal analysis.

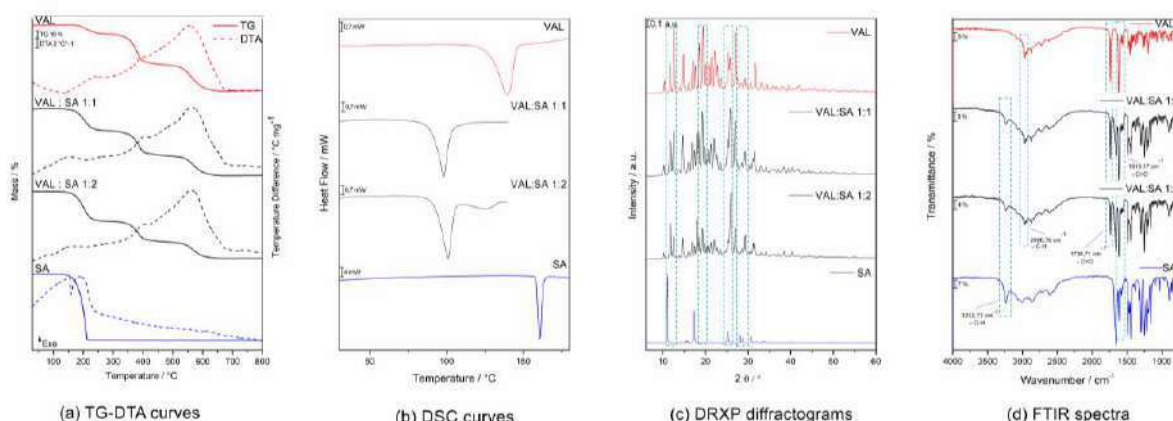
Highlights

- Mechanochemical synthesis between Valsartan and Salicylic acid.
- Studies and characterization by TG-DTA, DSC, XRPD and FTIR.
- Possible formation of a eutectic mixture.

Abstract

In the pharmaceutical co-crystallization technique, two neutral constituents are used to form a multicomponent crystal, an API (active pharmaceutical ingredient) and a conformer, a nontoxic molecule that is pharmaceutically acceptable, as vitamins. The nature of the components and type of interactions between them allows the formation of a multicomponent compound, such as eutectics, co-crystals, solid solutions, and salts. This new solid form can improve the solubility of API. Eutectics are defined as multicomponent crystalline solid formed from two solids mutually miscible with liquids and have a tendency to show a lamellar structure. The objective of this work was to study the interaction between Valsartan (VAL) and salicylic acid (SA) to obtain a new solid form of this drug. The synthesis was carried out by the mechanochemical method, using Valsartan and Salicylic acid in the respective proportions 1:1 and 1:2 using 15 μ L ethanol. Through the TG-DTA curves (Fig. 1.a), it is noted that Val is thermally stable until 159°C and decomposes in three steps of mass losses, corresponding to exothermic events in the DTA curve. The conformer SA is thermally stable until 125 °C, the endothermic peak in DTA at 159 °C it is referent to a melting process followed by evaporation of the compound. The mixture VAL: SA (1:1) is thermally stable until 127 °C and decomposes in three steps of mass losses. The DSC curves of the VAL (Fig. 1.b) and SA (Fig. 1.b) shows an endothermic peak at 140 °C (VAL) and at 161 °C (SA), which is associated to the compounds melting. The mixtures DSC curves (Fig.1.b) have shown an endothermic peak at 98 °C and 101 °C, referent to a melting process. Besides this on the VAL:SAL 1:2 DSC curve is observed an endothermic peak at 124 °C after the melting which is associated to the compound partial evaporation. The mixtures diffractograms VAL: SA 1:1 and VAL: SA 1:2 (Fig. 1.c) shows only the combination of the diffractograms of its pure components. The same has been observed in the FTIR mixtures spectrum (Fig. 1.d), had not seen new absorptions or displacements of bands. These results suggest the formation of a eutectic mixture in both molar proportions.

Figure 1. a) TG-DTA curves, b) DSC curves, c) XRPD diffractograms and d) FTIR spectra of the pure compounds, the VAL:SA (1:1) and (1:2) systems.



Acknowledgements

The authors wish to thanks PROEX- FC UNESP; CAPES (proc. 024/2012 Pro-equipment), and FAPESP (processes: 2018/24378-6, 2018/12463-9; 2017/14936-9 and 2017/08820-8), for financial support

¹ Ganduri, R., Cherukuvada, S., Row, T. N. G Multicomponent adducts of pyridoxine: An evaluation of the formation of eutectics and molecular salts. *Cryst. Growth*, v.15, p. 3474-34800, 2015.

Área: EDU

Nº de Inscrição: 334851

A experimentação como metodologia ativa de ensino-aprendizagem em Química no Ensino Médio

Adelina Verenice Hudzinski (IC),¹ Jamille Valéria Piovesan (PQ).^{1*}jamillepiovesan@gmail.com¹Universidade Estadual do Paraná - Campus de União da Vitória - Centro de Áreas das Ciências Exatas e Biológicas - Colegiado de Química.

Palavras Chave: Ensino de química, Experimentação, Metodologias ativas.

Highlights

Experimentation as an active teaching-learning methodology of Chemistry in Secondary School

- In this work a comparative study was carried out between two classes of 1st year of Secondary School.
- The results showed that the use of experimentation promotes learning in Chemistry.

Resumo/Abstract

Atualmente, muito tem se falado sobre a importância de se estimular a aprendizagem significativa nos alunos de Ensino Médio, fazendo uso das mais diversas estratégias pedagógicas e diferentes mecanismos de ensino. Neste contexto, vêm ganhando destaque as metodologias ativas de aprendizagem, mais comumente traduzidas como “Problematização” e “Aprendizagem Baseada em Problemas (ABP)”, as quais se propõem a romper com os métodos tradicionais de ensino-aprendizagem. O principal objetivo deste modelo de ensino é incentivar os alunos para que aprendam de forma autônoma e participativa, a partir de problemas e situações reais. A proposta é que o estudante esteja no centro do processo de aprendizagem, participando ativamente e sendo responsável pela construção de conhecimento. No que tange as aulas de Química, uma das estratégias utilizadas como metodologia ativa são as aulas práticas, pois considera-se que os experimentos podem facilitar a compreensão do conteúdo assim como tornar mais dinâmicas e interessantes as aulas. Deste modo, o presente trabalho fez uma análise das contribuições destas atividades experimentais nas aulas de Química, mais precisamente no ensino aprendizagem do conteúdo ácidos e bases, realizando um comparativo da abordagem desse tema em aulas experimentais e em aulas não experimentais (essencialmente teóricas), bem como, diagnosticou se esta é uma metodologia capaz de promover uma aprendizagem mais significativa. Para isto, as atividades propostas foram realizadas com duas turmas de 1º ano do Ensino Médio da Escola Estadual Rodolfo Ziperrer, localizada no Bairro Campo d'Água Verde, no município de Canoinhas-SC. O desenvolvimento do trabalho em âmbito escolar, envolveu a realização de aulas experimentais na turma A e aulas teóricas na turma B, para ambas o conteúdo proposto foi ácidos e bases e como forma de verificação do método, nas duas turmas aplicou-se um questionário investigativo acerca do conhecimento dos alunos sobre o conteúdo que foi trabalhado e da importância das atividades práticas nas aulas de Química. No decorrer das aulas experimentais, percebeu-se que os alunos demonstraram interesse em participar, dinamismo e entusiasmo nos grupos, enquanto as aulas teóricas se mostraram maçantes e cansativas. Foi possível notar que as atividades diferenciadas, desenvolvidas nas aulas, chamaram a atenção dos alunos trazendo a motivação necessária para a construção dos conceitos de forma investigativa. Os experimentos foram muito válidos para a abordagem dos conteúdos, pois os alunos demonstraram curiosidade em saber o porquê das alterações que aconteciam. Estes apontamentos acerca da aprendizagem ficaram ainda mais evidentes na análise dos questionários avaliativos, onde foi possível verificar que as aulas práticas contribuíram significativamente no processo de ensino-aprendizagem, uma vez que os alunos da turma A obtiveram melhor desempenho que os demais.

Agradecimentos/Acknowledgments

Os autores agradecem à direção, equipe pedagógica, professores e alunos do Colégio Estadual Rodolfo Ziperrer, pela disponibilidade em participar deste trabalho de pesquisa.

Chemical study of *Erythricium salmonicolor*, fungal phytopathogen of citrus

Luciano S. Pinto (PG),¹ Fernanda Amaral Faria (IC),¹ Daniele Fernandes da Silva (PQ),¹ Moacir Rossi Forim (PQ),¹ João Batista Fernandes da Silva (PQ),¹ Maria Fátima G. F. da Silva (PQ).^{1*}

lucianosilva58@gmail.com

¹ Department of Chemistry, UFSCar – Federal University of São Carlos

Key-Words: Citrus; *Erythricium*; Rubelose; Phthalic Derivatives; Bactericidal Activity.

Highlights

- Phthalic acid derivatives from *E. salmonicolor* with bactericidal activity.
- Study of interaction fungus/plant as a tool to develop new fungicides and bactericides.
- A search of mechanism to control of Rubelose on *Citrus*.

Abstract

Several diseases affect the production of citrus culture, such as the pink disease, or Rubelose, which is caused by *Erythricium salmonicolor* fungus. This disease became a serious problem in Brazil, reducing the citrus production up to 10%. Thus, knowing the chemical profile of this fungus is very important. Tests with the isolated compounds will show which ones are responsible for the symptoms of Rubelose. In the future knowing the enzymes involved in the biosynthesis of these compounds will facilitate the search of inhibitors for them; or fungicides with higher specificity. The growth of this fungus was evaluated in several culture media and what led to a better development and with more varied chemical profile was in malt extract.



Figure 1 - Production scheme of Phthalic acid derivatives.

New phthalic acid derivatives (**Figure 1**) have been identified from *E. salmonicolor* with the known tyrosol and fatty acids. The identification of compounds was supported by NMR 1D and 2D analysis and by UPLC-DAD-HRMS. The extract and isolated compounds were submitted to bactericidal activity against *Xanthomonas citri*, showing promising results. The causal agent of Citrus bacterial canker disease is *Xanthomonas campestris* pv. *Citri*, and field observations show that when there are symptoms of Rubelose there are no bacteria, suggesting that the fungus *E. salmonicolor* has bactericidal compounds. Thus, new assays with pure compound are in development.

Acknowledgment

The authors thank the Brazilian agencies of the CNPq- National Council for Scientific and Technological Development, FAPESP- São Paulo Research Foundation and the CAPES-Higher Education Improvement Coordination for their support.

Layered double hydroxides as catalysts for the borylation of aryl halides

Lorena C.L.L.F. Silva (IC),¹ Vinícius A. Neves (PG),² Vitor S. Ramos (PG),³ Raphael S.F. Silva (PQ),⁴ José B. de Campos (PQ),³ Alessandro A. da Silva (PQ),⁵ Luiz F.B. Malta (PQ),² Jaqueline D. Senra (PQ).^{5*}

lorennaconti97@gmail.com; jdsenra@gmail.com

¹Escola de Química, UFRJ; ²Instituto de Química, UFRJ; ³Faculdade de Engenharia, UERJ; ⁴Instituto Federal do Rio de Janeiro, IFRJ; ⁵Instituto de Química, UERJ

Palavras Chave: *Layered Double Hydroxides, Borylation, Boronic Esters*

Highlights

Boronic esters were synthesized using Cu/Al layered double hydroxides as co-catalysts
LDHs were prepared by co-precipitation and characterized by XRD, TGA and FTIR
LDH has potential for aryl borylation.

Resumo/Abstract

Organic derivatives of boron such as boronic esters and acids are important precursors for a wide range of environmental, energy and health applications. However, mild and selective synthesis of these compounds still represent a challenge. In the present work, we propose the synthesis of boronic esters using an inexpensive catalytic system based on Cu/Al layered double hydroxides (LDH) in the presence of Na₂PdCl₄. A set of conditions was varied to accomplish the synthesis of the Cu/Al LDH [1]. After these experiments, the LDH was synthesized by the simultaneous addition of solutions of Cu(NO₃)₂·3H₂O/ Al(NO₃)₃·9H₂O and Na₂CO₃/ NaOH to a solution of pH=8. After washing with ethanol and acetone, it was characterized by XRD, TGA and FTIR. The Rietveld-refined XRD pattern is shown in Fig. 1 with hydrotalcite as the main phase.

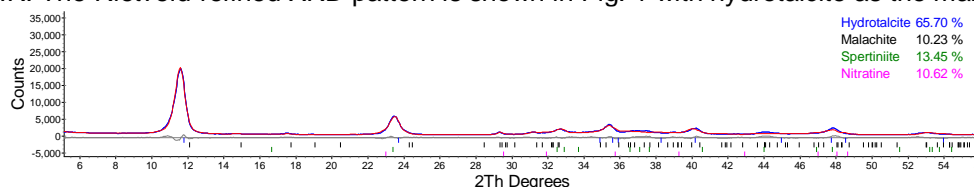
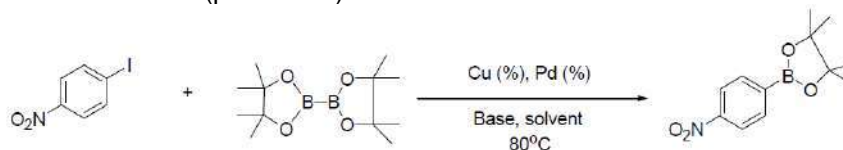


Figure 1: Rietveld-refined XRD pattern.

To evaluate the effect on borylation reaction, catalytic tests were carried out by using malachite and LDH as catalysts. The reaction between bis(pinacolato)diboron and 1-iodo-4-nitrobenzene was taken as a model [2].



Initially, purified Cu/Al LDH and malachite were evaluated as catalysts with acetonitrile as solvent and it was possible to confirm that malachite did not show catalytic activity towards the borylation reaction. In order to see the effect of copper and palladium in the reaction, different loadings of each one were tested. With the aim of evaluating the effect of non-coordinating solvents, THF and dioxane were also tested. Remarkably, the addition of 2 mol% Na₂PdCl₄ in the presence of LDH (30 mol% Cu) in acetonitrile allowed a yield of 98% of the expected product, that was characterized by GCMS and NMR ¹H.

These preliminary results demonstrated that the catalytic system can be efficiently used for the borylation of an aryl iodide. The scope of the methodology by using different aryl halides is underway in our lab.

Agradecimentos/Acknowledgments

CAPES, FAPERJ and CNPq.

[1] Neves, V.A. *et al.* J. Therm. Anal. Calorim. 2017, v. 2017, 1. DOI: 10.1007/s10973-017-6411-4.

[2] Ratniyom, J. *et al.* Eur. J. Org. Chem. 2014, 1381.

A new low cost methodology for the analysis of oil binders present in art work paintings and cultural heritage by potentiometric titration

Lino Meurer (IC),^{1,2}Bruno Szpoganicz (PQ),¹Antônio S. Mangrich (PQ),¹ Thiago G. Costa* (PQ)^{1,2}

linom60@gmail.com; thiago_floripa@hotmail.com

¹Lab.de Equilíbrio Químico, Departamento de Química, UFSC; ²LabMat Fundação Catarinense de Cultura, Fpolis-SC

Keywords: applied chemistry, cultural heritage, potentiometric titration, FTIR, Best 7

Highlights

- 1) Potentiometric titration is proposed to distinguish types of oils used in oil paints;
- 2) The oils were hydrolyzed and the products characterized by FTIR before titration;
- 3) The amounts of fatty acids were calculated by the Best7 program after the titration;
- 4) The molar ratio of the fat acids was used to determine the type of oil;
- 5) Low-cost method is describing to the identification the materials constituting the cultural heritage.

Resumo/Abstract

The practices of conservation and the study of the materials constituting art works and cultural heritage are using scientific methods of analysis to guarantee the safeguarding of these historical and cultural objects. In this way, commercial oil binding and inks were used to realize the feasibility of applying the potentiometry for determination of the fatty acids; the traditional method uses GC-MS. The binder and inks were hydrolyzed by the method of Salimon et. al.¹ with slight modifications. The products was characterized by FTIR and submitted to potentiometric titration. Figures 1a e 1b shows the FTIR spectra of pure linseed oil and two commercial cobalt blue oil ink and their hydrolysis products. The displacement of 40 to 50 cm⁻¹ of the carbonyl band and the out-plane stretch around 925 cm⁻¹ of –OH group shows the formation of the fatty acids for titration.

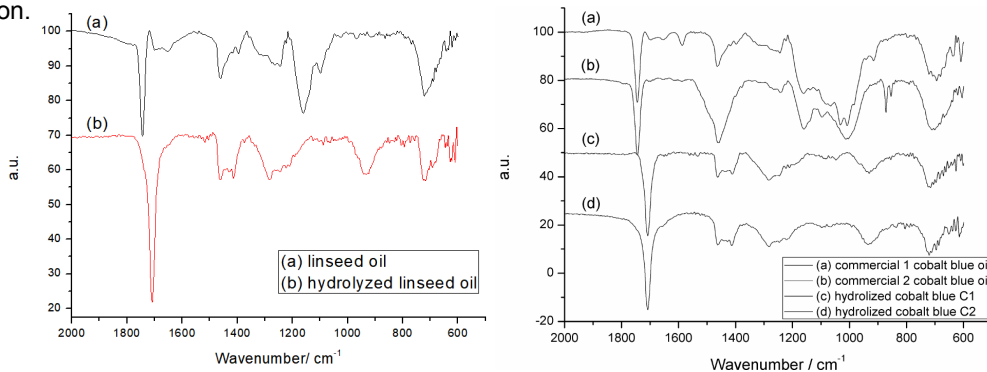


Figure 1. A) FTIR spectra of linseed oil and the hydrolyzed products B) FTIR spectra of commercial cobalt blue oil and this hydrolyzed products.

The relationship between palmitic and stearic (C₁₆/C₁₈) acids provides the type of oil used in the paintings.² The preliminary titration show five equivalent points at pH 4,90; 5,56; 6,75; 8,30 and 9,34, and may be characteristic of palmitic, stearic, oleic, linoleic and linolenic acids resulting from the hydrolysis of the oil, and the Best7 program showed the P/S ratio 1,54 for linseed oil. Several results reported in the literature show that the relationships between C₁₆ and C₁₈ for linseed oil are between 1.3 and 1.9. Therefore, the preliminary value obtained for the free binder is in agreement with that detected by other analytical methods described in the literature. Thus, the potentiometric titration has until now demonstrated a high potential for use in the determination of linseed oil through the hydrolysis products.

Ref.: 1.Salimon et al. *Chemistry Central Journal* 5:67, 2011. 2.Kanicky and Shah. *Coll. Interface Science* 256, 2002.

Agradecimentos/Acknowledgments

The authors would like to thank FAPESC/SC for the scholarship awarded to Lino Meurer and CNPq - National Council of Scientific and Technological Development - Brazil, process number 153276/2018-5.

Área: ELE

Nº de Inscrição: ID: 01159

Determination of isoamyl alcohol in fusel oil using a sensor based on electropolymerized molecularly imprinted polypyrrole modified with reduced graphene oxide and gold nanoparticles.

Thiago de Moraes Mariano (PG)*¹, Maísa Azevedo Beluomini (PQ)¹, Nelson Ramos Stradiotto (PQ)^{1,2,3}.

maisa.beluomini@unesp.br; tmmariano@usp.br

¹ Institute of Chemistry, São Paulo State University (UNESP), Araraquara, SP, Brazil.

² School of Industrial Engineering Metallurgical, Fluminense Federal University (UFF), Volta Redonda, RJ, Brazil.

³ Bioenergy Research Institute, São Paulo State University (UNESP), Rio Claro, SP, Brazil.

Palavras Chave: *Molecularly imprinted polymer, Reduced graphene oxide, Gold nanoparticles, Isoamyl alcohol, Fusel oil.*

Highlights

A sensor of isoamyl alcohol was proposed. RGO combined with AuNP amplifies the surface and the number of imprinted cavities. The sensor displays high affinity and selectivity for the target molecule.

Abstract

The production of bioethanol generates byproducts such as fusel oil, obtained after fermentation and distillation of biomass, composed mainly of higher alcohols. The fact that higher alcohols present in fusel oil are considered natural products provides these alcohols high commercial values. Thus, the quantification of this compound is of great importance for agroindustry. For this, the aim was to construct and apply a highly sensitive and selective sensor for the monitoring of isoamyl alcohol (IA) in oil fusel, based on molecularly imprinted polymers (MIP) modified with reduced graphene oxide (RGO) and gold nanoparticles (AuNPs). The development of the MIP on the modified surface was carried out via electropolymerization of the pyrrole in the presence of the IA, in acetate buffer of pH = 3.6, using a conventional three-electrode system. The technique employed for the application of the sensor was differential pulse voltammetry (DVP) in potential range of 0.0 to + 0.60 V and the electrochemical probe used to monitor the signal was $\text{Fe}(\text{CN})_6^{3-/4-}$ in 0.1 mol L⁻¹ of KCl. The analytical data were obtained based on the variation of the current (ΔI), which was calculated taking into account the oxidation peak currents obtained before and after the combination of the cavities formed with the IA molecules. The MIP-AuNPs-RGO/GCE presented wide linear range and low detection limit. The selectivity, important parameter for sensors based on MIP, was evaluated with the aid of the analogs isobutanol and propanol, where the period of 120 s was taken into consideration for the rebinding of the molecule. For the MIP sensor, an excess of 10-fold of the interferents isobutanol and propanol practically did not change the signal of the peak current in relation to the sensor tested only with IA. This experiment shows that the sensor developed has good selectivity for IA even when used in the presence of analogous molecules. To investigate the reproducibility of MIP-AuNPs-RGO/GCE, three electrodes were prepared for the detection of 1.0 × 10⁻⁶ mol L⁻¹ of IA by DPV. According to the peak current obtained, the relative standard deviation (RSD) calculated was 3.7 %. For three successive detections on a single modified electrode, the RSD was 2.4 %; indicating that the sensor is stable. The electrode was stored in a dry place, protected from light and at room temperature for 10 days. After this period, 78 % of its initial current was observed. In order to examine the applicability of the proposed sensor, the standard addition method was used to determine the concentration of IA in the samples. The sample was obtained from a sugar and alcohol plant in the region of Araraquara-SP/Brazil and was diluted in acetate buffer solution. The concentration of IA applied in this work ranged from 2.5 × 10⁻⁷ to 1.0 × 10⁻⁶ mol L⁻¹. All measurements were conducted in triplicate. The concentration of 255.7 ± 12.32 g was found for IA per liter of fusel oil. The recoveries in standard solutions ranged from 97.1 % to 109.4 %, with SDs ranging from 1.2 - 3.9 %. This demonstrates that the method presents excellent degree of accuracy. The applicability potential of the MIP for the selective recognition of IA renders it excellent alternative to chromatographic methods. The MIP-AuNPs-RGO/GCE reported in this study is a faster method, free of interferents and does not require pre-preparation of the sample, being suitable for the determination of IA in fusel oil.

Acknowledgments

FAPESP (process 2017/23529-6), CAPES and CNPq.

Evaluation of chemical interaction in binary talc mixtures with drugs by thermal analysis

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

larissavelasco2012@gmail.com

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

Key words: Excipient, Phenylephrine Hydrochloride, Paracetamol, Chlorpheniramine Maleate, Thermogravimetry, Differential Scanning Calorimetry

Highlights

Evaluation of chemical interactions in binary mixtures between drugs and excipient by thermal analysis as a preliminary study to the development of the final formulation.

Resumo / Abstract

Phenylephrine hydrochloride (PHE), paracetamol (PAR), and chlorpheniramine maleate (CPM) are marketed in combination with different excipients for the treatment of cold and flu symptoms.¹ The talc excipient acts as an anti-corrosion agent, glidant, diluent and lubricant.² Here, we evaluate the chemical interactions in the 1:1 (m/m) binary mixtures of talc with PHE, PAR and CPM provided by *GeoLab Indústria Farmacêutica Ltda.* by thermal analysis. The TGA/DTG curves were performed in a α -Al₂O₃ crucible and with temperature variation (ΔT) of 25-1000 °C, and the DSC curves performed in aluminum crucible with perforated cap and ΔT of 25-250 °C. The techniques were performed in 50.0 mL min⁻¹ of N₂, at 20 °C min⁻¹ and in Mettler Toledo models TG/SDTA 851e and DSC 822e. The DSC curves of the CPM, PHE and PAR show an endothermic peak with an initial temperature of 130 °C, 135 °C and 170 °C respectively, characteristic of the melt (Fig. 1A).³ The DSC curve of the talc shows that it is thermally stable under the conditions employed (Fig. 1A). The mentioned curves are in agreement with the respective TGA/DTG curves. The melting point of binary talc mixtures with PHE, PAR, CPM are similar to those of the corresponding drugs (Fig. 1B). Therefore, we found that there is no indication of chemical interaction between the excipient and the drugs studied.

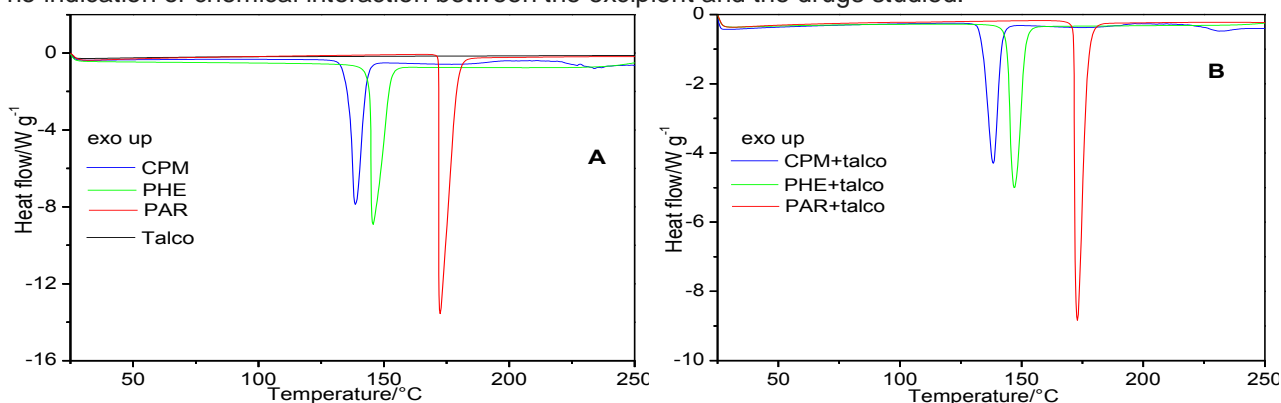


Fig.1 DSC curves: **A)** drugs and excipient; **B)** binary drug-excipient mixtures.

¹ de Oliveira, G.G.G. et al. Compatibility study of paracetamol, chlorpheniramine maleate and phenylephrine hydrochloride in physical mixtures. *Saudi Pharmaceutical Journal*, 2017, 25, 99–103

² Rowe, R. C.; Sheskey, P. J.; Quinn, M. E. *Handbook of pharmaceutical excipients*. 6th edition. London. Chicago: Pharmaceutical Press, 2009, 1-917.

³ ANVISA-Agência Nacional de Vigilância Sanitária. *Farmacopeia brasileira*, vol. 2. 5^a ed. Brasília 2010.

Agradecimentos / Acknowledgments

LAMES/UFMG, GeoLab Indústria Farmacêutica Ltda and FUNAPE

Study on morphology of plasma-treated cellulose acetate membranes

Wellen Stieven (IC),¹ João.Victor J. Hoffmann (IC),¹ Paola Egert (PQ),^{1*} Heloisa R.T.Silva (PQ),¹ Rachel F.Magnago (PQ),¹ Deise R. Consoni (PQ),² Allan Seeber (PQ).³

st.wellen@gmail.com; paola.ortiz@unisul.br

¹Universidade do Sul de Santa Catarina/UNISUL; ²Universidade Federal de Santa Catarina/UFSC; ³Universidade Federal do Pampa/UNIPAMPA

Palavras Chave: *Polymer membranes, Celulose acetate, Plasma process.*

Highlights

Applications of polymer membranes are increasing. The study shows superficial changes of membranes treated in plasma process. The membranes hydrophilicity might be improved with the plasma treatment.

Abstract

The interest in developing products polymer base in health area is due to the biocompatibility, low toxicity and favorable pharmacokinetics, highlighting pharmaceutical applying, as controlled release and encapsulation of drugs and wound dressings [1]. Although polymer applying is growing, performance improvements are achieved whether physical-chemical properties are controlled. A way of control perform of polymer characteristics is submit them to plasma treatments [2]. The study shows superficial changes of cellulose acetate membranes treated in plasma.

The cellulose acetate membranes were prepared and then plasma-treated. The plasma process (75%N₂+25%H₂) was ensured by an electric pulsed direct current (DC) discharge. Different conditions of time (varying from 15min to 35min) and temperature (varying from 50°C to 100°C) were used in the plasma treatment of membranes. After treatments, the membranes were studied by scanning electron microscopy(SEM), atomic force microscopy (AFM), contact angle measurements and zeta potential.

The realization of the study allows an understanding of surface changes in cellulose acetate membranes. The surface modification in the membranes, resulting from the plasma interaction, can be evidenced in the images below.

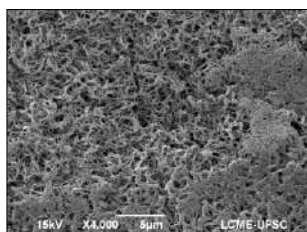


Fig.1. Electronic micrograph of cellulose acetate membranes,4000x, **without treatment** . Top surface.

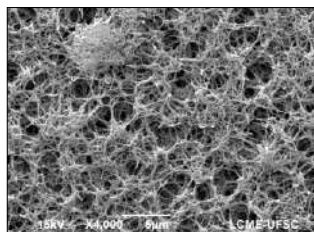


Fig.2. Electronic micrograph of cellulose acetate membranes, 4000x. Plasma treated of N₂-H₂, 1.4 Torr, **15 min, 90°C**. Top surface.

The results show that variations in time and temperature result in modifications in the surface morphology of the membranes. Increasing the treatment time results in different characteristics on the membrane surface. The surface treated in the greater time presents a greater number of cavities than the treated membrane at lower times. When the treatment temperature is increased, different characteristics are also evidenced therein. Lower temperatures result in less attacked surfaces.

The surface analyzes of the membranes, using the sessile drop method, demonstrate that variations in the times and temperature of the plasma treatment result in modifications in the surface morphology of the membranes. The untreated membrane has an higher angle of contact with the drop, compared to the treated membrane, due to the increase in membrane hydrophilicity with plasma treatment.

Therefore, results indicate relationship between resulting morphology and material wettability, increased with time and temperature rise. The membranes hydrophilicity might be improved with the plasma treatment used.

References

- [1] D.Puppi, F. Chiellini, A. M. Piras A and E. Chiellini, Progress in Polymer Science, 35, 403–440, (2010).
- [2] P.M.L. Perez et al., Journal of Materials Chemistry, 17, 4064-4071, (2007).

Acknowledgments

This work had scholarship by the Institutional Program of Scientific Initiation Grants (PIBIC), by National Council for Scientific and Technological Development (CNPq).

ADSORÇÃO DO CORANTE VERMELHO ÁCIDO EM RESÍDUO INDUSTRIAL A BASE DE BENTONITA

Giancarlo Franzoi Guenther (IC), Ivonete O. Barcellos (PQ)*.

E-mail: gfguenther@furb.br; *iob@furb.br

¹Departamento de Química. CCEN/FURB. Rua Antônio da Veiga, 140, CEP 89012-900 Blumenau, SC

Palavras Chave: Adsorção, corante ácido, resíduo da indústria de alimentos, tratamento de água

Highlights

Adsorption of acid red dye in industrial waste based on bentonite. Textile industries produce amount of effluents of dyes that are extremely toxic for nature. Food industries can produce a lot waste of clarification (RC) of oil that have a extremely potential in adsorption methods. In this study, the potential of RC for adsorption of acid class dyes is evaluated.

Resumo/Abstract

Um dos problemas mais alarmantes da atualidade é a falta de água. A busca por métodos para a purificação de efluentes têxteis, veem crescendo cada dia mais. Desta forma foi testado um resíduo de bentonita da indústria Bunge, oriundo da clarificação de óleo vegetal, na adsorção do corante ácido erionyl red A-3G (Figura 1). A metodologia para adsorção do corante ácido está descrito na figura 2. Os resultados mostram que a eficiência variou de 83.63% a 92.08% (figura 3) nas temperaturas entre 25°C-50°C, (Figura 4 e 5), o que significa que não há uma grande influência da temperatura. Com os estudos cinéticos e de adsorção, que estão sendo realizados, será possível definir a ordem de cinética, bem como a natureza da adsorção.

Figura 1: Análise de infravermelho do corante ácido erionyl vermelho A-3G.

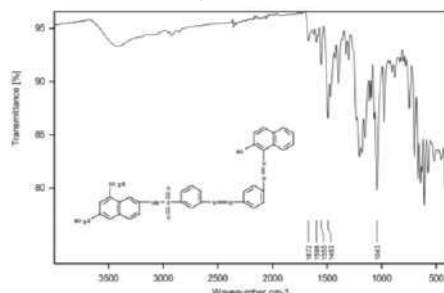


Figura 2: Fluxograma da metodologia.

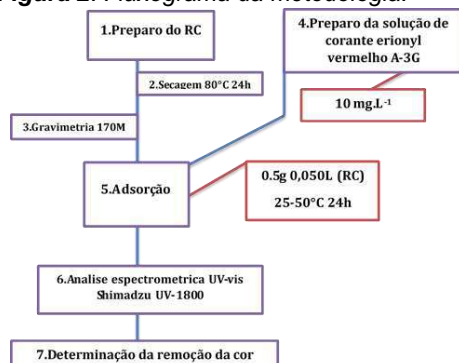


Figura 3: (a) solução de corante antes da adsorção; (b) solução de corante depois da adsorção.

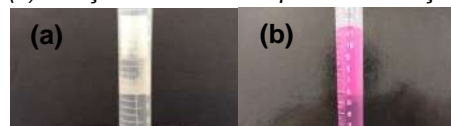


Figura 4: Espectro UV-vis da solução de corante antes e depois da adsorção em diferentes temperaturas.

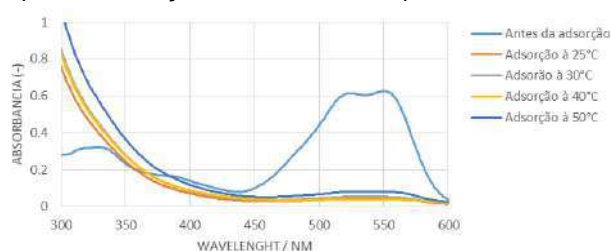
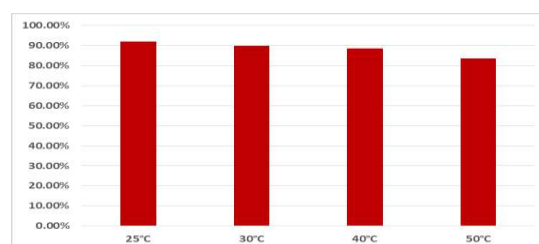


Figura 5: Eficiência na remoção de cor da solução mãe do corante.



Agradecimentos/Acknowledgments

PIBIC

Antibiotics from resistance genes as elicitors of the biosynthesis of Natural Products in *Burkholderia thailandensis*

João Luiz Baldim (PQ),¹ Diego Magno Assis (PQ),² Daniela Aparecida Chagas-Paula (PQ),³ Marisi Gomes Soares (PQ),³ João Henrique Ghilardi Lago (PQ)¹

jotaelebaldim@gmail.com

¹Centro de Ciências Naturais e Humanas, UFABC-SP; ²Bruker do Brasil; ³Universidade Federal de Alfenas, UNIFAL-MG

Palavras Chave: Antibiotic Resistance Genes, *Burkholderia thailandensis*, Secondary metabolites elicitors.

Highlights

Antibiotic resistance genes of *B. thailandensis* pointet to small molecules as promising elicitors to the biosynthesis of NPs.

The threshold between resistance/susceptibility of these compounds provided ideal conditions to generate chemical stress in *B. thailandensis*.

The chemical stress caused by the influence of Ciprofloxacin resulted in the overproduction of Bactobolin A, a polyketide-peptide antibiotic.

Abstract

Microorganisms are a rich source of important small molecules widely used as pharmaceuticals.¹ However, obtaining secondary metabolites from microbial sources can be challenging, due to the cost, correct stimulation, culture conditions, and concentration of a given compound.² In this context, small-molecule elicitation of microbial secondary metabolites are promising.³ As a new strategy in this scenario genome-guided investigation on the resistance profile of *Burkholderia thailandensis* lead to several small molecules that could be promising elicitors to the biosynthesis of natural products. Design of specific genome-based culture media were proceeded and the obtained extracts were investigated using metabolomic approaches based on LC-HRMS experiments. The preliminary results confirm that antibiotic resistance genes are efficient to provide elicitors of the secondary metabolism, as in the case of bactobolin A (Figure 1).

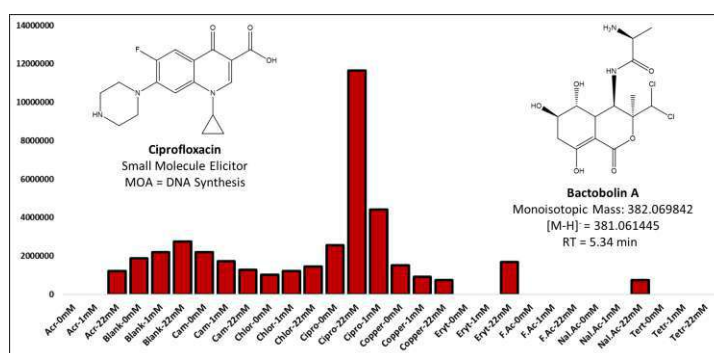


Figure 1. Influence of the elicitor Ciprofloxacin on the production of Bactobolin A, a polyketide-peptide antibiotic, by *B. thailandensis*.

Acknowledgments



1. Demain, A. L. *Internat. Microbiol.* v.1:259-264, 1998
2. Trivella, D. B. B.; Felicio, R. *mSystems* v.3:1-5, 2018
3. Pettit, R. K. *Microbiol. Biotechnol.* v.4:471-478, 2011

DNA denaturation for the study of a cobalt complex/DNA interaction

Monica M. de Souza (PG),¹ Luana Carol de Camargo (IC),¹ Karine Priscila Naidek (PQ).¹

monicamds30@gmail.com

¹Departamento de Química, Universidade do Estado de Santa Catarina (UDESC)

Palavras Chave: Complex/DNA, Denaturation, Temperature of melting.

Highlights

Elucidation for complex/DNA interaction through UV-spectroscopic thermal denaturation studies. Comparison between denaturation of DNA alone and complex/DNA for the evaluation of mode of interaction of the latter. Cobalt (3+) complex having ethylenediamine and catechol ligand for the study of the interaction with a double stranded DNA using thermal denaturation studies.

Resumo/Abstract

It is well known the critical role nucleic acids play in life; it contains essential information required for the function and structure of living organisms. Metal ions are important for the maintenance and regulation of some process in the organism, and it can interact with nucleic acids affecting its structure and stabilizing it. The stabilization observed after the interaction between DNA and a metal complex can be an indicative of the type of interaction that takes place. A thermal experiment can be used to demonstrate the stabilization that a metal complex gives to DNA. Temperature of melting or, also called, midtransition (T_m) is the study of denaturation of DNA; it means the temperature where the DNA structure is a half folded and unfolded. Calculation of T_m of complex/DNA is compared with the value for DNA alone to find the extend of the interaction, and then the probable type of it. Therefore, we present an UV-vis spectroscopic thermal denaturation experiment for DNA and complex/DNA, where the complex in the study is a cobalt (3+) complex with ethylenediamine and a catechol ligand (1,2 – dihydroxybenzene), and the DNA is double stranded. The complex was fully characterized by NMR ^1H and ^{13}C , IR, UV-vis and single X-ray diffraction. UV-vis spectroscopic titration studies showed a hypochromic effect (generally assigned to an intercalation mode through π - π stacking) and a K_b value in the order of 10^4 . Denaturation data analysis presented a temperature difference of $5,5\text{ }^\circ\text{C}$; value generally representing a non-intercalative mode of interaction. Thus, once the results are in contradiction, more experiments are been in progress to try to find which mode of interaction occurs between the complex in the present study and DNA.

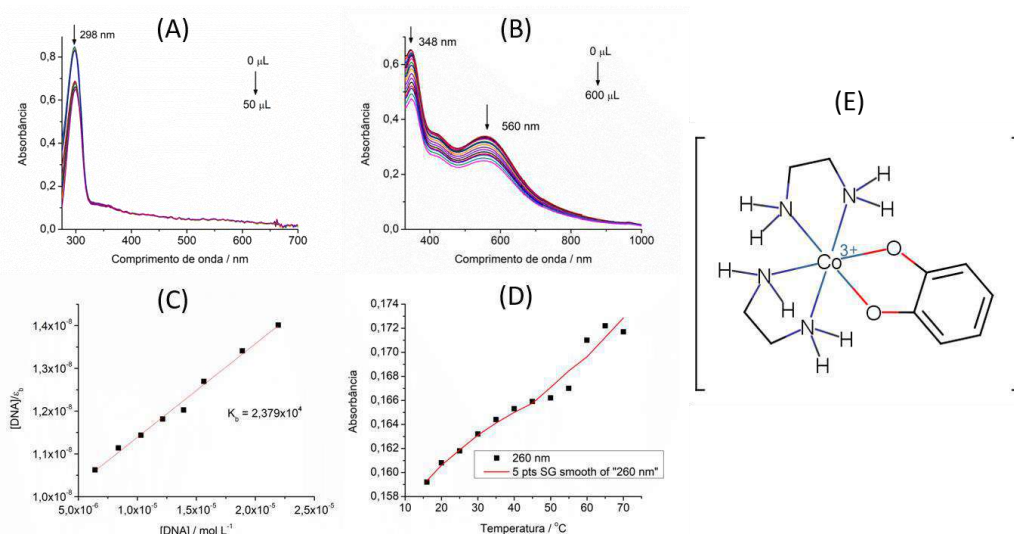


Figure 1: (A) and (B) Titration of the complex with DNA; (C) Calculation of K_b ; (D) Calculation of T_m ; and (E) Structure of the studied complex.

Agradecimentos/Acknowledgments

FAPESC, CNPq, CAPES, UDESC, UFPR.

Área: ELE

Nº de Inscrição: 01166

Study of the electrochemical behavior of the Malathion insecticide on gold electrode.

Ana Layla Carvalho de Lima (IC)^{1*}, Lucia Codognoto (PQ)¹, Eliana Maíra A. Valle (PQ)¹.

analaylac.lima@gmail.com

¹ Universidade Federal de São Paulo – Instituto de Ciências Ambientais, Químicas e Farmacêuticas, UNIFESP – campus Diadema

Palavras Chave: malathion, voltametria cíclica, eletrodo de ouro.

Highlights

Study of the electrochemical behavior of the Malathion insecticide on gold electrode.

There are few studies about the electrochemical behavior of Malathion. In the studies carried out, a peak at -0.360 V was observed referring to the reduction of malathion under a gold electrode, characteristic of an irreversible process.

Resumo/Abstract

Malathion is an organophosphate insecticide used for agricultural, domestic and commercial purposes¹. The US Environment Protection Agency (USEPA) has classified it as class III at the toxicity level². Electrochemical techniques are a good alternative for the study of pesticides³, therefore, using cyclic voltammetry, a study of the electrochemical behavior of the malathion under gold electrode, was carried out.

The measurements were carried out from dilution of the malathion stock solution $1.0 \times 10^{-3} \text{ mol L}^{-1}$ in acetonitrile. The electrochemical analyzes were carried out on a Potentiostat/Galvanostat AUTOLAB PGSTAT128N with three compartments. Gold electrode as working electrode, Ag/AgCl (KCl sat.) as reference electrode and a platinum plate as auxiliary electrode. The support electrolyte used was a $0,1 \text{ mol L}^{-1}$ KCl solution.

Initially a study of its response in $0,1 \text{ mol L}^{-1}$ KCl was performed, where the pesticide presented a reduction peak at -0.360 V with characteristics of an irreversible process. To evaluate the influence of the pH of the medium on the electrochemical response of the insecticide, measurements were performed in a pH range of 2 to 12, where it was observed that even with the pH variation of the medium, there is no displacement of the potential of Malathion, indicating that this process is not dependent on pesticide protonation. Scan rate measurements were also performed. It was observed an increase in a current of the reduction peak and a displacement of the peak potential to fewer positive regions. These studies indicated that the process is controlled by the adsorption of the species to the surface of the electrode.

References:

¹ CHATTERJE, S.; DAS, S.K.; CHAKRAVARTY, R.; CHAKRABARTI, A.; GHOSH, S.; GUHA, A.K. *Interaction of malathion, an organophosphorus pesticide with Rhizopus oryzae biomass*. **Journal of Itazardous Materials**, v.174, n.1-3, p.47-53, 2010.

² U.S. EPA. Office of Pesticide Programs, 1988. Pesticides in ground water data base: interim report. Washington, DC.

³ VALLE, E. M.; SANTAMARÍA, C.; MACHADO, S.A.; FERNÁNDEZ, J.M. *Thiram and Picloram as Entrapping Agents for Lead Depicted by Electrochemical Methods*. **J. Braz. Chem. Soc.**, v.21, n.6, p.1052-1059, 2010.

Agradecimentos/Acknowledgments

Capes, CNPq and Fapesp (Processo nº 2018/11310-4).

Enantioselective Synthesis of Endocyclic Enelactams *via* Heck-Matsuda reactions

Ingredy B. Braga (PG),¹ Emilio C. de Lucca Jr. (PQ),¹ Carlos Roque D. Correia (PQ).^{1*}

ingredybbraga@gmail.com; croque@unicamp.br

¹Chemistry Institute, University of Campinas – Unicamp, Campinas – SP, Brazil

Palavras Chave: Heck-Matsuda reaction, Enantioselectivity, Arylation.

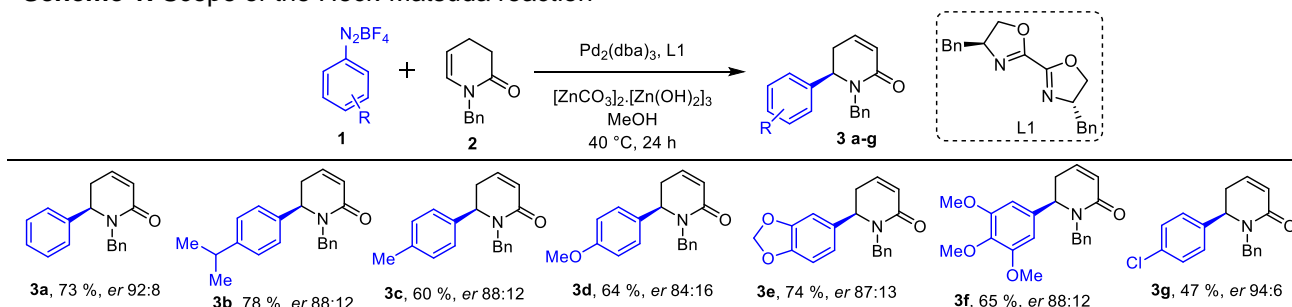
Highlights

Herein, we disclose a new Pd-catalyzed methodology to access chiral α,β -unsaturated δ -arylated lactams with good yields and enantiomeric excesses.

Abstract

The development of new synthetic routes for the construction of chiral lactams is of great importance, as these compounds are found in several natural products and drugs.^{1,2} We can highlight NK1 antagonist receptor used for nausea and vomiting treatment associated with chemotherapy.² In addition, these compounds are precursors to benzo[a]quinolizidine, with promising physiological activities.³ For example, emetine with antiparasitic and emetic activities^{3,4} and carmegliptin used in type 2 diabetes treatment.^{3,5} Our main interest was centered in the development of an effective and low cost enantioselective method for the synthesis of δ -arylated lactams. We have developed a new enantioselective synthesis of α,β -unsaturated δ -arylated lactams in an operationally simple manner that provided the desired Heck products in good yields and high enantioselectivities. After optimization, by varying solvent, ligand, catalyst loading, temperature, and base, we found that compound **3a** could be isolated in 73 % yield and *er* = 92:8 (Scheme 1). We then explored the scope of this new Heck-Matsuda reaction, varying the arenediazonium salts (Scheme 1). The presence of electron-donating groups, such as *i*-Pr (**1b**), Me (**1c**), and MeO (**1d**), as well as polysubstituted arenediazonium salts (**1e** and **1f**), and electron-withdrawing groups (**1g**) provided the corresponding products in good yields and enantiomeric excess. This method constitutes a new entry for such organic frameworks.

Scheme 1. Scope of the Heck-Matsuda reaction



Conditions: $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$ (2.5 mol%), L1 (5 mol%), **1** (0.1 mmol), **2** (0.15 mmol), $[\text{ZnCO}_3]_2 \cdot [\text{Zn}(\text{OH})_2]_3$ (0.1 mmol), MeOH (0.1 M). Isolated yield. *er* determined by chiral SFC.

References

¹ Takada, K. *et al.* *J. Am. Chem. Soc.* **2004**, 126, 187. ² Yuan, Q. and Sigman, M. S., *J. Am. Chem. Soc.* **2018**, 140, 6527. ³ Pashev, A. S.; Burdzhev, N. T.; Stanoeva, E. R. *Org. Prep. Proced. Int.* **2016**, 48, 425. ⁴ Akinboye, E. and Bakare, O. *The Open Natural Products Journal* **2011**, 4, 8. ⁵ a) Abrecht, S. *et al.* *Org. Process Res. Dev.* **2011**, 15, 503. b) Mattei, P. *et al.* *Bioorg. Med. Chem. Lett.* **2010**, 20, 1109.

Acknowledgments

We thank the financial support of the FAPESP, CNPq, CAPES, and University of Campinas. This study was financed in part by the Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior - Brasil (CAPES) - Finance Code 001.

Caramboxin analysis in unripe fruits of Star Fruit (*Averrhoa carambola*)

Pâmela R. R. Pereira (PG),¹ Norberto P. Lopes (PQ).^{1*}

pamelarodriguesrp@gmail.com; npelopes@fcrp.usp.br

¹Departamento de Química e Física, FCFRP-USP

Palavras Chave: Caramboxin, LC-MS, Mass spectrometry, Star fruit, Unripe fruit.

Highlights

Caramboxin (star fruit neurotoxin) is present from the early stages of fruit development.

Resumo/Abstract

In recent years caramboxin (CBX), a neurotoxin found in low concentrations in carambola (*Averrhoa carambola*), has been studied due to its relation with patients intoxication cases with chronic kidney disease¹. Different factors can influence as much the metabolites total amount as in relative proportion of these metabolites produced and among these factors can be included the development stage and maturation of plants/fruits². Therefore, in this work, immature fruits of star fruit were analyzed to verify if there variation in amount of CBX according to the fruit development. The star fruits were collected downtown of Ribeirão Preto – São Paulo and separated into five groups (G₀ – G₄). Then, methanolic extracts of the groups were prepared which were analyzed by HPLC-MS. Among the analyzed samples, only in the G₀ group could not detect the CBX presence, thus showing that star fruit presents this neurotoxin even in the early stages of development.



Figure 1 - Unripe star fruits groups

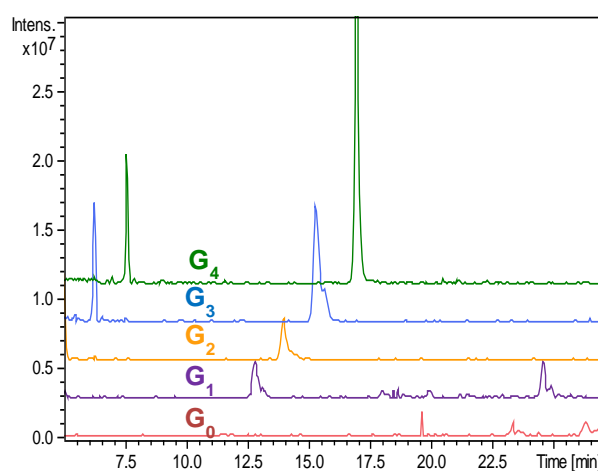


Figure 2 - Extracted Ion Chromatograms of ion m/z 256 (CBX)

BIBLIOGRAPHIC REFERENCES

1. CHUA, C. B. et al. Association of renal function and symptoms with mortality in star fruit (*Averrhoa carambola*) intoxication. *Clinical Toxicology*, v. 55, n. 7, p. 624-628, 2017.
2. GOBBO-NETO, L; LOPES, N. P. Plantas medicinais: fatores de influência no conteúdo de metabólitos secundários. *Quim. Nova*, v. 30, n. 2, p. 374-381, 2007.

Agradecimentos/Acknowledgments

CAPES, CNPq, FAPESP

Simple and mild three-step synthesis of cyclopropylidene- γ -lactams from γ,δ -epoxymalonate

Adrielle Patricio Maximiano (PG),¹ Marcelo Volpato Marques (TC),² Marcus Mandolesi Sá (PQ)^{1,*}

adriellemaximiano@gmail.com; marcus.sa@ufsc.br

¹Departamento de Química, UFSC; ²Instituto Federal Catarinense, Campus Fraiburgo

Keywords: Epoxide, Cyclopropane, N-Heterocycle, Cyclopropylidenelactam, γ -Lactams, Iminosugars

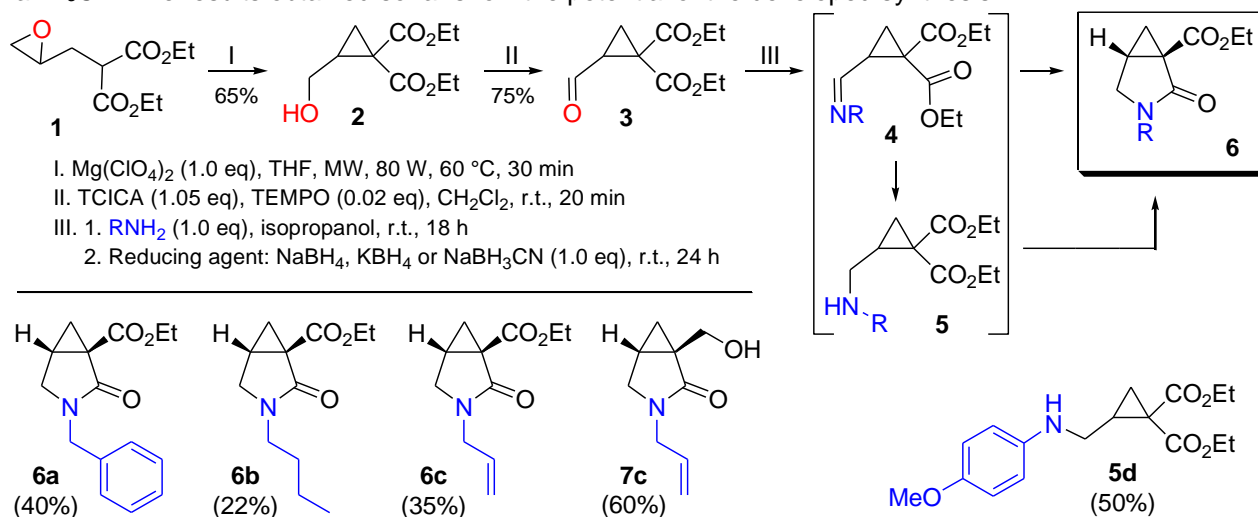
Highlights

This work describes the three-step synthesis of cyclopropylidene- γ -lactams from a simple epoxide under mild reaction conditions with moderate overall yields and high atom economy.

Abstract

Nitrogen heterocyclic compounds present a great variety of chemical and biological properties, so it is of great interest to search for novel heterocycles and new synthetic methodologies that are simple, efficient, economically viable, and environmentally friendly. For instance, the compound *boceprevir*, used in the treatment of hepatitis C, illustrates the potential of fused bicycles containing nitrogen.¹

Herein, we present a three-step synthesis of cyclopropylidene- γ -lactams **6** from γ,δ -epoxymalonate **1** (Scheme). Initially, epoxide **1** was treated with $Mg(ClO_4)_2$ to provide a three-membered ring rearrangement resulting in cyclopropane 1,1-diester **2**. A simple and facile oxidation² of alcohol **2** gave aldehyde **3**, which underwent imination, reduction, and cyclization in a one-pot process to furnish cyclopropylidene- γ -lactams **6**. The overreduction of the ester carboxyl group in **6** was also observed in some cases, generating bicyclic alcohols such as **7c**, which possess an interesting structure related to iminosugars.³ The use of a less nucleophilic aromatic amine, as in the case of *p*-anisidine, did not lead to the expected bicycle **6** due to the low propensity of the cyclopropane-amine intermediate **5d** to undergo cyclization, being isolated as the sole product from the reaction medium. The optimization of the one-pot synthesis of cyclopropylidene- γ -lactams **6** from aldehyde **3** is under study, in particular the effect of the reducing agents such as $NaBH_4$, KBH_4 , and $NaBH_3CN$. The results obtained so far show the potential of the developed synthesis.



Scheme. Synthesis of cyclopropylidene- γ -lactams **6**.

References:

- [1] Kallam, S.R. et al. *Tetrahedron* **2017**, 73, 4285-4294.
 [2] De Luca, L. et al. *Organic Letters* **2001**, 19, 3041-3043.
 [3] Compain, P., Martin, O. R. *Iminosugars: From Synthesis to Therapeutic Applications*. Wiley-VCH: Weinheim, Germany, **2007**.

Acknowledgements: UFSC, CNPq, CAPES, INCT-Catalysis.

Chemoselective reductions of the 2- and 4-nitrophenyl groups in functionalized 2-iminothiazolidines using SnCl₂ under mild conditions

Daniela P. Gouvêa (PQ), Misael Ferreira (PQ), Marcus M. Sá (PQ)*

daniela_gouvea@hotmail.com; marcus.sa@ufsc.br

Departamento de Química, Universidade Federal de Santa Catarina, Florianópolis, SC 88040-900

Keywords: Allylic bromides, 2-Iminothiazolidines, Nitro reduction, Spiroquinolones, Chemoselectivity

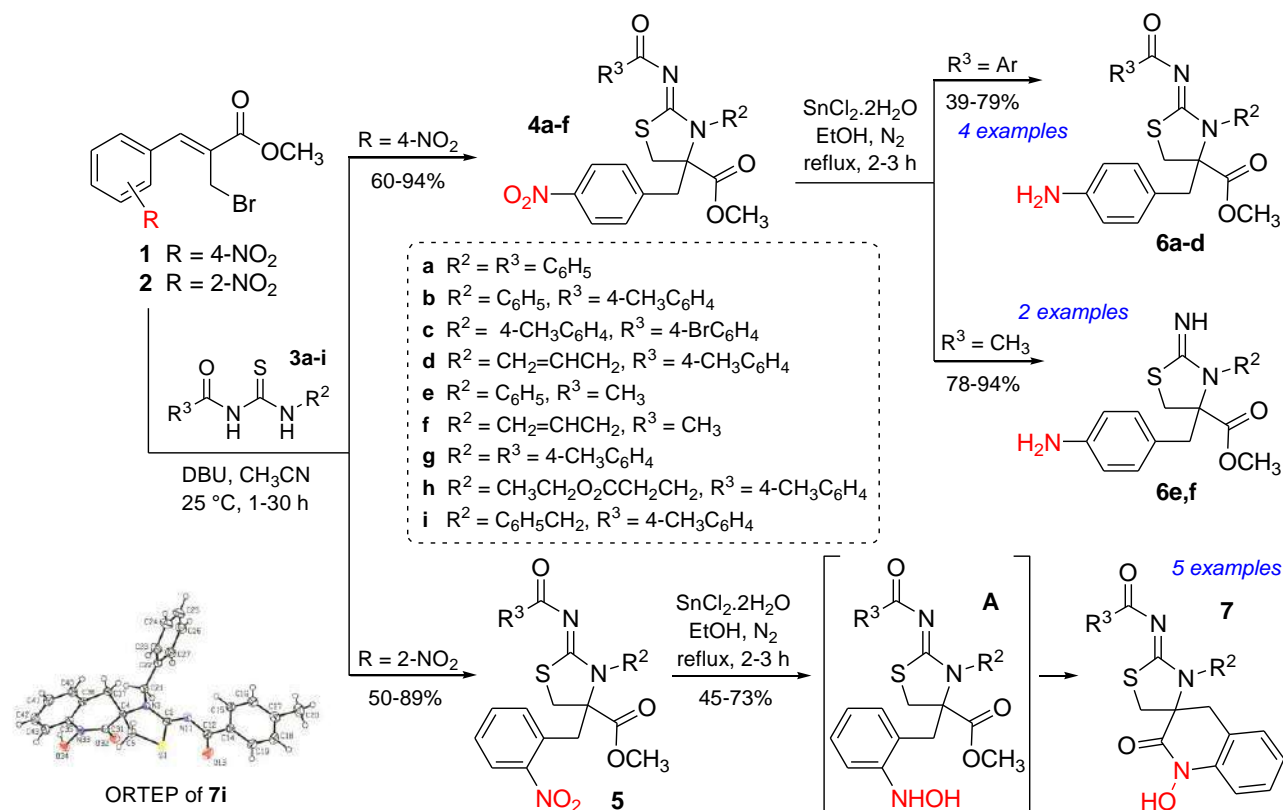
Highlights

Efficient reduction of nitro groups from 2-iminothiazolidines was developed with SnCl₂. Synthesis of amino-substituted 2-iminothiazolidines and spiroquinolones was achieved under mild conditions.

Abstract

Recently, we developed a mild and simple domino process for the synthesis of 2-iminothiazolidines through a base-mediated [3+2] annulation involving substituted thioureas and allylic bromides bearing nitroaryl groups.¹ In order to explore the synthetic applicability of these multifunctional heterocycles, herein we report the results involving chemoselective reductions of the nitro group to give amino derivatives. In this regard, the known¹ 2-iminothiazolidines **4a-f** and **5b,i**, as well as the novel analogues **5a,g,h**, were prepared from the corresponding allylic bromides **1** and **2** in good yields (50-94%) through the domino process consisted of nucleophilic displacement followed by intramolecular *anti*-Michael addition under mild conditions. Next, the nitro reduction was performed with SnCl₂·2H₂O in ethanol under reflux to give 4-aminophenyl-substituted 2-iminothiazolidines **6a-f** (Scheme). For the particular case of the *N*-acetyl-substituted thiazolidines **4e,f**, the observed products were the unsubstituted NH imines **6e,f**, which would come from the simultaneous cleavage of the acetyl group under the reaction conditions. On the other hand, partial reduction of the nitro group at the 2-position in **5a,b,g-i** was followed by cyclization of the pre-formed hydroxylamino intermediate **A** to deliver the spiroquinolones **7** in moderate-to-good yields (45-73%).

[1] Ferreira, M.; Sá, M. M. *Advanced Synthesis & Catalysis* **2015**, *357*, 829.



Scheme. Synthesis of amino-substituted 2-iminothiazolidines.

Acknowledgements: UFSC, CNPq, CAPES, INCT-Catalysis.

Área: TEO

Nº de Inscrição: 01173

***Ab-initio* Study of Catalytic Activity of Two-Dimensional Tungsten Dichalcogenides in CO₂ Reduction**

Henrique A. B. Fonseca (IC)¹, Augusto C. H. Da Silva¹, and Juarez L. F. Da Silva¹

henrique.alves.fonseca@usp.br; guto_chs@hotmail.com; juarez_dasilva@iqsc.usp.br

¹*Departamento de Físico-Química, Instituto de Química de São Carlos (IQSC), USP;*

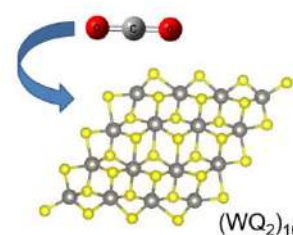
Palavras Chave: Two-dimensional, Tungsten, Dichalcogenides, Reduction, Quantum, Chemistry.

Highlights

The reduction of CO₂ has a high energy of activation, requiring catalysts. Transition Metals Dichalcogenides (TMDs) shows up as good candidates for having abundant surface atoms and low coordination.

Abstract

Modern global climate change is main caused by anthropogenic actions, like burning fossil fuels, affects the atmospheric composition, causing global climate change and uncalculated disasters in the future.^[1] A short-term solution is the withdrawal of the atmospheric CO₂ and transform it in most useful molecules from electrocatalytic reactions. Two-dimensional (2D) nanosheets of layered Transition Metal Dichalcogenides (TMDs), could be use as catalysers, because they have abundant surface atoms with low coordination and are semiconductors, applicated in photoelectrochemical cells, photodetection and catalysis, for example, besides having some electronic and optical properties that changes according to spatial conformation.^{[2][3]} To study these materials, was used the FHI-aims package, that is based on the first principles Density Functional Theory (DFT), which the energy of a system of several electrons from its electronic density is calculated. The application of DFT has been growing up, showing it as the better method to calculus some electronic and structural fundamental states properties of some atoms, molecules and solids systems.^[4] Previously, was made some Molecular Orbital Diagrams of all of molecules that are involved in CO₂ reduction and then, some structures of these Two-Dimensional Tungsten Dichalcogenides (WQ₂)_n with n=16 and Q=S, Se and Te, were mapped in FHI-Aims to optimize these geometries and structures. Was used the Perdew-Burke-Ernzerhof exchange-correlation functional (PBE) and was made PDoS study of 30 structures, including the three options mencioned (Q = S, Se and Te) to analyse the band gap of frontier orbitals (HOMO and LUMO) energy level, the bond between d orbitals of the W atoms and p orbitals of the Q atoms and the representation of all orbitals. All of these informations will allow the study of how the CO₂ molecule binds with these TMDs systems, which orbitals are related and some energetic properties and the studying of dopping effects in those systems from metallic atoms addition.



[1] S.J. Davis, K. Caldeira, and H. D. Matthews. Future CO₂ emissions and climate change from existing energy infrastructure. *Science*, 329(5997):1330-1333, sep 2010.

[2] Efthymia Ioanna Koytsoumpa, Christian Bergins, and Emmanouil Kakaras. The CO₂ economy: Review of CO₂ capture and reuse technologies. *The Journal of Supercritical Fluids*, 132:3-16, feb 2018.

[3] Chunfeng Song, Qingling Liu, Na Ji, Shuai Deng, Jun Zhao, Yang Li, Yingjin Song, and Hailong Li. Alternative pathways for efficient CO₂ capture by hybrid processes-a review. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, 82:215-231, feb 2018.

[4] Vianna, J. *Teoria quântica de moléculas e sólidos*. São Paulo: Livraria da Física, 2004.

Acknowledgments

Grant 2018/17462-0, São Paulo Research Foundation (FAPESP).

Any opinions, findings, and conclusions or recommendations expressed in this material are those of the author(s) and do not necessarily reflect the views of the FAPESP.

Aromatic profile of top-fermented beers submitted to the dry hopping process: effect of dry hopping time and hop processing type

Duan Ceola (IC)^{1,2}, Ricardo D. Huelsmann (PG)², José Augusto da Col² (PQ) e Edmar Martendal² (PQ)

edmar.martendal@udesc.br; duanceola@gmail.com;

¹Instituto Superior de Cerveja e Malte, Rua Elsbeth Feddersen, 72 - Salto Norte, Blumenau - SC; ²UDESC – Universidade do Estado de Santa Catarina – Centro de Ciências Tecnológicas (CCT) – Departamento de Química. Rua Paulo Malschitzki, s/n, Zona Industrial Norte, Joinville – SC

Keywords: *dry hopping, hop varieties, dry hopping time, pelletization, hop aromas.*

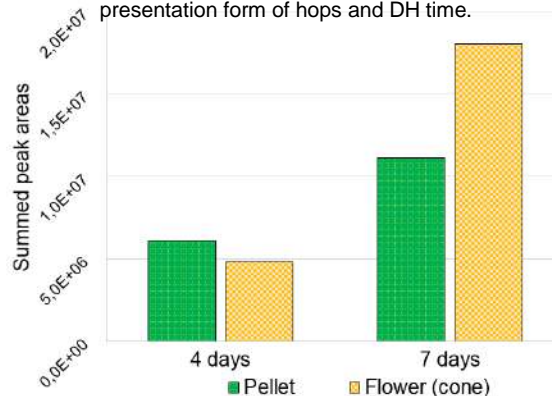
Highlights

The effect of dry hopping (DH) variables such as the use of whole cone flowers or pelletized hops, different hop varieties and DH time on beer volatile composition was studied and discussed. The use of headspace-solid phase microextraction (HS-SPME), gas chromatography-mass spectrometry (GC-MS) and multivariate analysis allow the identification of differences between the group of variables studied.

Abstract

Beer is a widely consumed beverage over all the world, being embedded in the culture of many countries¹. One the most important raw material of beer is hop (*Humulus lupulus*). It is formed only by female plants, secreting resins and essential oils into the bracts or bracteoles as a defensive mechanism. Hops provides beer a bitter taste and a characteristic aroma. This aroma is caused by thousands of compounds, depending on origin and quality of hops, and the way it is introduced in the beer recipe production². The hops are generally used in the boiling process, to give the bitter taste, but the high temperatures expel the low molecules, important for the aroma. In this sense, another way of hop addition (a cold one, namely DH) can be applied to imparting beer s strong hop aroma. This work analyses the impact of the pelletizing processes and the contact time of hops with top-fermented beer samples on its aroma, produced with DH technique. One base beer was made without any addition of hops during the boiling process. This base was used to produce eight different samples, varying the hop variety (Cascade or Columbus), DH times (4 and 7 days) and two different commercial forms (pellets or whole flowers). The volatile fraction of the beers was analysed using HS-SPME, followed by GC-MS. Almost one hundred compounds were identified with the help of Kovats retention index, injection of standards, and comparison with mass spectra of the NIST library. The large data volume was studied with principal component analysis. The results have shown that pelletizing process and DH time influenced in different extensions the concentration of some compounds. For instance, beers with 4-days DH showed more pleasant characteristics, with more compounds like humulene; the 7-days beer were associated with unpleasant sensory perception (such decanal and nonanal). The total organic acid was also increased comparing 4 to 7 days beer (Figure 1). The volatile profile in beers were not enough to understand a significative difference between the use of hop in the form of pellet or whole flower. We consider this work a starting point to future researches, which could analyze other hop varieties, application forms, DH temperatures, verifying what happens with beer volatile fraction.

Figure 1. Summed peak areas for organic acids and aldehydes, showing differences as a function of presentation form of hops and DH time.



Acknowledgments

The authors are very thankful to CNPq and FAPESC for the financial support.

¹Schwarz, R. SYMPOSIUM ON BREWING Brewing Processes. Ind. Eng. Chem. 27, 1031–1037 (1935). ²Almaguer, C., Schönberger, C., Gastl, M., Arendt, E. K. & Becker, T. *Humulus lupulus* – a story that begs to be told. A review. J. Inst. Brew. 120, 289–314 (2014).

Efeito da incorporação de polipirrol em sensores baseados em nanoestruturas de hidróxido de níquel

Fernando H.C. Miguel* (PG),¹ **Roberto M. Torresi** (PQ),¹ **Susana I.C. de Torresi** (PQ),¹

fernando.miguel@usp.br

¹Instituto de Química da Universidade de São Paulo (IQUSP)

Palavras Chave: hidróxido de níquel, polipirrol, sensor, glicose

Highlights

Effect of the incorporation of polypyrrole on nickel hydroxide nanostructures sensors. Nanoparticles of nickel hydroxide with and without polypyrrole were synthesized and immobilized on electrodes by EPD. They were then subjected to several glucose detection and the results showed that the incorporation of the polymer in the structure increases the sensitivity and the repeatability.

Resumo/Abstract

Nanopartículas de hidróxido de níquel foram obtidos através de sonoquímica e imobilizados sobre eletrodo de platina pela técnica de eletroforese em filmes finos, sendo então analisados os efeitos do doping com pirrol durante a síntese das nanopartículas. A primeira publicação do trabalho já sugeria que a presença do polímero durante a síntese conferia ao filme maior ciclabilidade[1]. Pensando nisso, empregou-se o filme na detecção de glicose em solução. Resultados preliminares indicam que, devido ao fato do polipirrol aumentar a ciclabilidade do filme, observa-se que a sensibilidade do material também tende a ser não tão somente aumentada como também confere uma maior repetibilidade ao material, sendo observado uma menor queda, como mostra a figura 1.

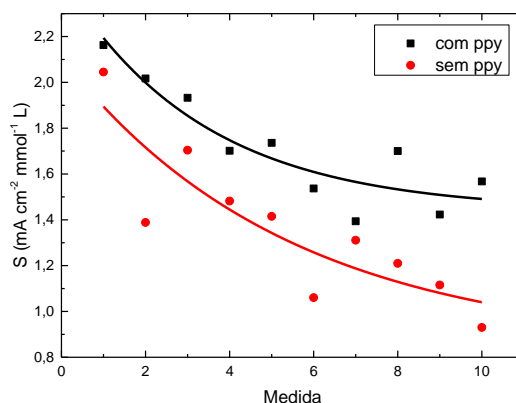


Figura 1- Sensibilidade dos sensores com e sem o doping de polipirrol em detecções sequenciais

Agradecimentos/Acknowledgments

Agradecimentos às agências de fomento, principalmente ao CNPQ por financiar a presente pesquisa (141243/2015-5) e à FAPESP pelo financiamento do projeto temático do laboratório (2015/26308-7)

[1] MIGUEL, F., BENEDETTI, T., TORRESI, S., TORRESI, R., QCM-D studies of polypyrrole influence on structure stabilization of β phase of Ni(OH)₂ nanoparticles during electrochemical cycling, *Electrochemistry Communications* 48, 2014, 164-168

Investigating synergistic effect in gold nanoparticles and CeO₂ nanorods for photocatalytic production of imines

Mauricio S. Homsí (IC),¹ Rafael S. Geonmonond (PG),¹ Guilherme F. S. R. Rocha (IC),¹ Ingrid F. Silva (PG),² Edman Tsang,³ Pedro H. C. Camargo (PQ),¹ Ivo F. Teixeira (PQ).¹

mauriciosamuel.homsí@usp.br; ivofreitasteixeira@gmail.com

¹Instituto de Química, Universidade de São Paulo, Av. Prof. Lineu Prestes, 748, São Paulo-SP, Brazil.

²Departamento de Química, Universidade Federal de Minas Gerais, Av. Antônio Carlos 6627, Belo Horizonte-MG, Brazil

³Wolfson Catalysis Centre, ICL, Department of Chemistry, University of Oxford, Oxford, OX1 3QR UK.

Keywords: CeO₂; Photocatalytic Mechanism; Photocatalysis; Gold; Nanoparticles; Plasmonic Catalysis.

Highlights

- Gold nanoparticles supported on CeO₂ nanorods acts synergistically increasing the hole generation (vacancies) at the nanorods surface;
- A new mechanism for photooxidation catalysed by Au/CeO₂ was demonstrated.

Abstract

Herein, it was studied the photocatalytic mechanism of imines formation from benzyl alcohol (BA) and aniline by the influence of supporting gold nanoparticles (NPs) into CeO₂ nanorods. It was prepared photocatalysts with different loads of Au NPs and different CeO₂ morphologies. The Au/CeO₂ were completely characterized by SEM, HRTEM, XRD, Phosphorous NMR (P³¹-ssNMR), ICP, XPS, BET, UV-Vis and Raman spectroscopy.

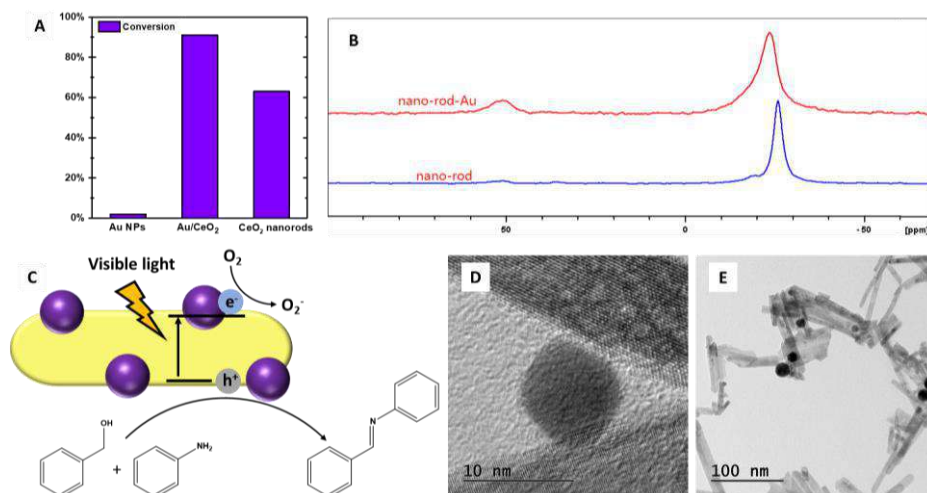


Figure 1. A) Conversion of benzyl alcohol in the photocatalytic formation of imine (97% selectivity to imine); B) P³¹-ssRMN of CeO₂ nanorods and Au/CeO₂ using TMP as probe molecule; C) Schematic representation of the photocatalytic mechanism; D and E) Au/CeO₂ TEM.

By various catalytic tests (using electron and hole scavengers, controlling light and reaction atmosphere) combined with advanced surface characterization techniques (P³¹-ssNMR, XPS, etc) it was possible to prove a new reaction mechanism synergistic effect in Au/CeO₂ photocatalysts (Fig 1. C). Furthermore, the catalytic tests reveal that are necessary the role of O₂ at the reaction is to capture electrons and avoid the e⁻/h⁺ recombination and no reaction occurred when oxygen vacancies were

trapped, what is consolidated by the shift for more electronic density at Au/CeO₂ P-ssRMN result (Fig 1. B), proving that the synergistic effect is caused by increment of the hole generation (vacancies) at the nanorods surface when Au NPs are supported.

Thus, the photocatalytic mechanism (Fig 1. C) goes starts when visible light irradiated on Au NPs generate an e⁻/h⁺ pair, which induce an oxygen vacancies density rise on the rods surface accelerating the oxidation of BA to benzaldehyde, which spontaneously couples with aniline shifting the reaction equilibrium. The electron from NPs produces O₂⁻ avoiding the e⁻/h⁺ recombination.

Acknowledgments

FAPESP, CNPq, Serrapilheira and CAPES are acknowledged for financial support.

¹ M. Tamura, & K. Tomishige, (2015). *Angewandte Chemie*, 127(3), 878-881.

² M. S. Homsí, R. S. Geonmonond, G. F. S. R. Rocha, E. Tsang, P. H. C. Camargo, I. F. Teixeira. *Chem*, submitted.

42ª Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química: Eixos Mobilizadores em Química

Aspectos Pedagógicos em artigos da seção “Experimentação no Ensino de Química” da QNEsc: de 2014 a 2018

Caian C. Receputi (PG)¹, Thairara M. Pereira (PG)¹ e Daisy B. Rezende (PQ)^{1,2}

dbrezend@iq.usp.br

¹USP, Programa de Pós-Graduação Interunidades em Ensino de Ciências, São Paulo; ²USP, Instituto de Química, Departamento de Química Fundamental, São Paulo.

Palavras Chave: Experimentação; Pressupostos Pedagógicos; Revista QNEsc.

Highlights

Aspectos Pedagógicos em artigos da seção “Experimentação no Ensino de Química” da QNEsc: de 2014 a 2018. Os artigos identificados, relatam experimentos que apresentam cunho demonstrativo-investigativo.

Resumo/Abstract

Esse trabalho relata os resultados de uma investigação que buscou identificar quais perspectivas sobre experimentação predominam no discurso dos artigos da seção “Experimentação no Ensino de Química” da Revista Química Nova na Escola (QNEsc). Obtiveram-se 22 artigos publicados nessa seção entre os anos 2014 a 2018. A escolha da revista se justifica pela sua importância, seu objetivo e sua influência na comunidade acadêmica e profissional dos químicos¹. A partir da identificação desses documentos, foi elaborada uma ficha descritiva para orientar a análise dos artigos, inspirada em Oliveira², que se trata de uma revisão da literatura. Todos os artigos foram lidos na íntegra, realizando-se uma análise das informações coletadas, inspirada nas proposições da Análise de Conteúdo³. Os aspectos que auxiliam na classificação da abordagem experimental presente nos artigos, bem como os resultados dessa análise, são apresentados no Quadro 1.

Quadro 1 – Características dos artigos analisados.

| Papel do professor | Papel do aluno | Roteiro do Experimento | Número de artigos | Posição que o Roteiro ocupa na aula | Abordagem |
|---|--|--|-------------------|---|--|
| Executar o experimento e fornecer explicações | Observar o experimento e sugerir explicações | Fechado, estruturado e de posse do professor | 3 | Central para ilustração (6) ^a | Demonstrativo-Verificativo (14) ^a |
| Fiscalizar a atividade dos alunos | Executar o experimento e sugerir explicações | Fechado e estruturado | 18 | Após a abordagem do conteúdo (5) ^a | |
| Orientar as atividades | Pesquisar, planejar e executar a atividade | Ausente ou não estruturado | 1 | A atividade pode ser a própria aula (11) ^a | Investigativo (8) ^a |

^a Número de artigos, dentre o total de 22.

A análise do Quadro 1 mostra uma associação entre o papel do professor, o papel do aluno e o roteiro da atividade experimental. Essa associação somada à posição que o roteiro ocupa na aula caracteriza a abordagem da atividade experimental, permitindo compreender a perspectiva da experimentação presente nesses artigos. Dentre os 22 artigos analisados, 14 apresentam características de atividades experimentais de demonstração ou verificação, em que o aluno ocupa papel distinto do que o exercido nas atividades investigativas. Em contrapartida, 8 dos 22 artigos analisados apresentam características de atividades experimentais de cunho investigativo.

Pode-se concluir que na seção “Experimentação no Ensino de Química” ainda é relativamente pequeno o número de trabalhos que apresentam uma atividade experimental de cunho investigativo, abordagem experimental que é consensual na bibliografia da área para o ensino de Química e Ciências.

Agradecimentos/Acknowledgments

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

Referências

- SCHNETZLER, R. P. Pesquisa em Ensino de Química no Brasil: Conquistas e Perspectivas. **Química Nova**, v.25, suplemento 1, 2002. p.14-24.
- OLIVEIRA, J. R. S. Contribuições e abordagens das atividades experimentais no ensino de ciências: reunindo elementos para a prática docente. **Acta Scientiae**. v. 12, n. 1, p. 139-153, 2010.
- BARDIN, L. **Análise de conteúdo**. Lisboa: Edições 70, 2011.

An Effective Heck-Matsuda strategy for the synthesis of indoles from β,β -substituted methyl acrilates.

Rebeca Monique Capitão (PG),¹ Renan do Canto Borges de Almeida (PG),¹ Nathália Moreno Cury (PG),² José Andrés Yunes (PQ),² Carlos Roque Duarte Correia (PQ).^{1*}

rebecacapitao@gmail.com; croque@unicamp.br

¹Chemistry Institute, University of Campinas – Unicamp, Campinas – SP, Brazil; ² Centro Infantil Boldrini, Campinas – SP, Brazil.

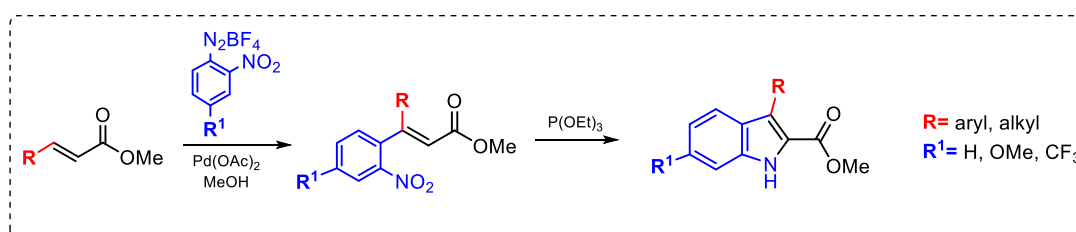
Keywords: Indol, Heck-Matsuda, leukemia.

Highlights

- Synthesis of β,β -substituted methyl acrilates by Heck-Matsuda arylations.
- Indole synthesis by an effective Cadogan-Sundberg reductive cyclization promoted by P(OEt)₃.
- Evaluation of antileukemic activity.

Abstract

Indoles are extensively explored heterocyclic ring systems with a wide range of pharmacological applications. Of the various pharmacological activities associated with indole derivatives it can be cited their anticancer, antimicrobial, antiviral, anti-inflammatory, antidepressant, anticholinergic, anti-migraine, anti-hypertensive, etc.^{1,2} Indoles are chemically important frameworks and their interesting molecular architecture makes them suitable candidates for the drug development. The method we used for the synthesis of polyfunctionalized 2-carboalkoxy-3-aryl-indoles was the reductive cyclization reaction of substituted 3,3-diaryl cinnamates containing an *o*-nitro group. Several diaryl cinnamates were synthesized as starting materials for the synthesis of the target molecules by a route consisting of Heck-Matsuda arylations of α,β -unsaturated carbonyl systems using different arenediazonium salts and palladium acetate in methanol.³ With effective reductive cyclization promoted by P(OEt)₃, it was possible to obtain several functionalized indoles in good overall yields. This route also allows the synthesis of indole derivatives containing alkyl groups at the C3-position using alkyl substituted methyl acrylates. Evaluation of antileukemic activity was investigated for all indoles synthesized.



Scheme 1. Synthesis of C3 substituted indole.

REFERENCES

1. Chadha, N.; Silakari, O. *Eur. J. Med. Chem.* **2017**, 134, 159-184.
2. Sravanthi, T.V.; Manju, S.L. *Eur. J. Pharm. Sci.* **2016**, 91, 1-10.
3. Taylor, J. G.; Correia, C. R. D., *J. Org. Chem.* **2011**, 2035-2038.

Acknowledgments

We thank the financial support of the FAPESP, CNPq, CAPES, and University of Campinas. This study was financed in part by the Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior - Brasil (CAPES) - Finance Code 001.

Área: AMB

(Inserir a sigla da seção científica para qual o resumo será submetido. Ex: ORG, BEA, CAT)

Nº de Inscrição: 01179

(Inserir o número de inscrição do autor que fez a submissão)

Thermal stability of Mg-buserite-type material using Mn mining residues from Carajás Province (Amazon Region)

Kássia Lene L. Marinho (PG),^{1*} Renata de S. Nascimento (PG),¹ Bruno A. M. Figueira (PQ),¹ Thays C. C. Lavra (PG),² José M. R. Mercury (PQ)²

kassialene@gmail.com; brunoufopa@hotmail.com

¹Pós-Graduação em Sociedade, Ambiente e Qualidade de Vida, UFOPA; ²Pós-Graduação em Engenharia de Materiais, IFMA

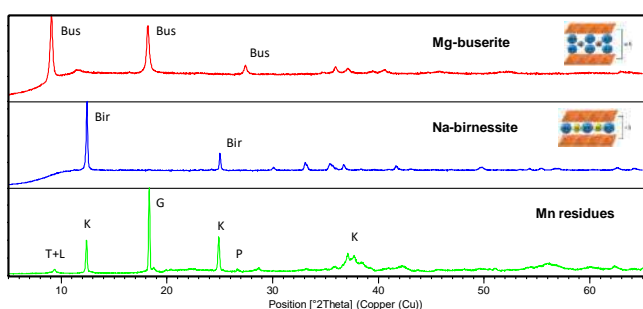
Keywords: Mn mining residues, Amazon, Synthesis, Characterization, Mg-buserite.

Highlights

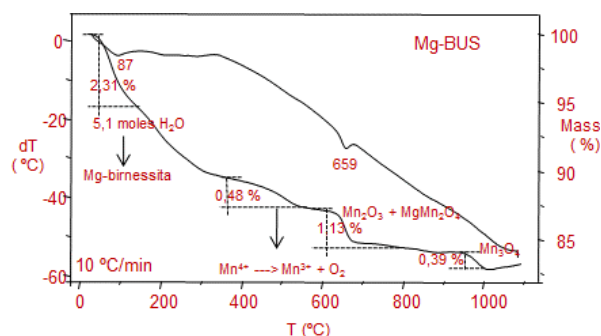
Layered manganese oxide was synthesized by hydrothermal and ion exchange routes employing Mn mining residues from Carajás Province.

Abstract

We report the synthesis of octahedral layered buserite-type phase with Mg^{2+} as interlayer cation (Mg-OL-2) from manganese residues at mining site from Carajás Mineral Province (Pará State, northern Brazil). Firstly, the synthetic route employed dissolution of Mn residues followed by re-precipitation of the birnessite-type phase with Na^+ interlayer, which was ion exchanged with an aqueous solution of Mg^{2+} at room temperature while stirring overnight. The X-ray diffraction patterns clearly showed the conversion of Mn residues into manganese oxide octahedral layer with basal spacing around 9.05 Å and orthorhombic structure. The unit cell parameters were calculated as: $a = 17.49$ (8) Å, $b = 30.69$ (7) Å and $c = 10,201$ (1) Å, as well as average crystallite size (26.9 nm) by Scherrer Equation. Raman spectrum of the products revealed diagnostic bands around 639, 592, 514, 410 and 280 cm^{-1} and could be assigned to the layered framework structure. After thermal treatment up to 650 °C, the X-ray diffraction analysis showed the transformation to $MgMn_2O_4$ having (I4/m) tetragonal structure.



Bir = birnessite, Bus = buserite, K = kaolinite, L = Lithiophorite, P = pyrolusite, T = todorokite



Acknowledgments

This work was supported by National Council for Scientific and Technological Development (No. 420169) and Coordination for the Improvement of Higher Education Personnel (No. 88881.160695), LAMIGA laboratory (UFPA) and UFOPA.

One-Pot Synthesis of α -Diazo carbonyl Compounds from Functionalized Allylic Bromides in a Water-Isopropanol Medium

Theo V. C. Russo (PG), Marcus M. Sá (PQ)*

theorusso.1990@gmail.com; marcus.sa@ufsc.br

Departamento de Química Universidade Federal de Santa Catarina, UFSC

Keywords: One-pot, Allylic bromide, Aqueous medium, Diazo transfer reaction, Acyl cleavage, α -Diazo carbonyl

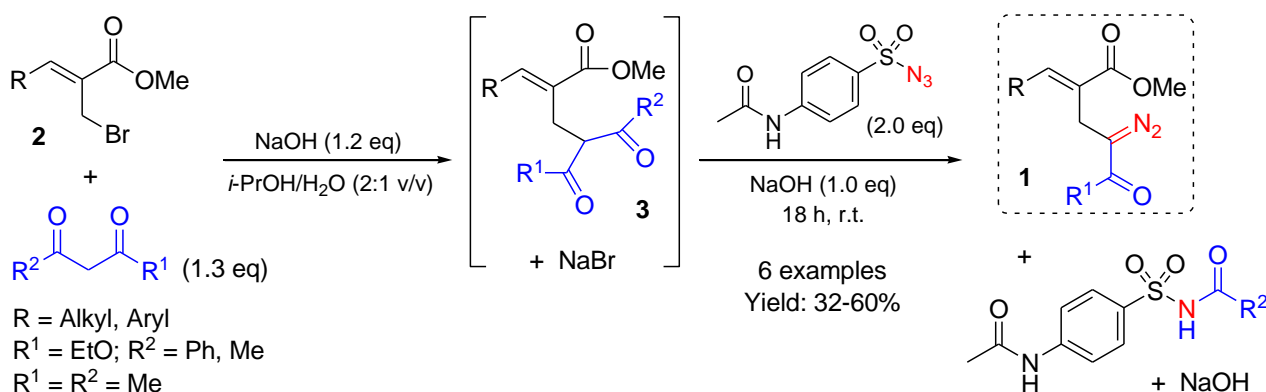
Highlights

This work describes the *one-pot* synthesis of α -diazocarbonyl compounds **1** from functionalized allylic bromides **2** through an allylation/diazo transfer reaction/acyl cleavage process in aqueous medium.

Abstract

Diazo compounds are widely used in organic synthesis, mainly because of the diverse chemical transformations that the diazo functional group can undergo.^{1,2} Herein, we report the *one-pot* synthesis of novel allylic α -diazo carbonyl compounds **1** through the base-mediated allylation of a 1,3-dicarbonyl compound using allylic bromide **2** (derived from Morita-Baylis-Hillman adducts) followed by a base-catalyzed diazo transfer reaction with acyl cleavage of the resulting intermediate **3** (Scheme). Initially, ethyl acetoacetate ($R^1 = \text{EtO}$, $R^2 = \text{CH}_3$) was chosen as the 1,3-dicarbonyl compound, but its activated methylene group is relatively reactive and suffer competitive diazo transfer reaction, generating the corresponding diazo as a side product, which is difficult to separate from the expected diazo product **1**. In order to avoid the formation of this side product, the amount of ethyl acetoacetate was reduced to 1 equiv, but under these conditions the allylation step was compromised due to the loss of efficiency. However, replacing ethyl acetoacetate with ethyl benzoylacetate ($R^1 = \text{EtO}$, $R^2 = \text{Ph}$) avoided the formation of side products, and the expected diazo compounds **1** ($R^1 = \text{EtO}$) were obtained with high purity in low-to-moderate yields. Similarly, the related diazo ketones **1** ($R^1 = \text{CH}_3$) were obtained from the corresponding 1,3-diketone ($R^1 = R^2 = \text{CH}_3$). While this work is still in progress, some positive aspects can already be highlighted: the reaction steps occur in one-pot, minimizing the waste associated with the work-up and purification of intermediates; the reaction conditions are simple to carry out; inexpensive, readily available and low toxic reagents, as well as green solvents, are used. Thus, novel and multifunctionalized α -diazo carbonyl compounds **1** are being readily obtained as versatile building blocks for further synthetic transformations.

- [1] Ford, A.; Miel, H.; Ring, A.; Slattery, C. N.; Maguire, A. R.; McKervery, M. A. *Chem. Rev.* **2015**, *115*, 9981.
 [2] Costin, T. A.; Dutra, L. G.; Bortoluzzi, A. J.; Sá, M. M. *Tetrahedron* **2017**, *73*, 4549.



Acknowledgments

UFSC, CNPq, CAPES, INCT-Catalysis

Área: MAT

Nº de Inscrição: 01181

Avaliação da energia de superfície em sistemas terciários de blendas poliméricas e partículas condutoras

Ermelinda S. Junckes (IC),^{1*} Daniel F. Pietezak (IC)¹, Fábio Andrés Silva Vega (PG)², Daniela Becker (PQ)²; Carla Dalmolin (PQ).¹

ermelindasilvana@gmail.com

¹Departamento de Química, UDESC/CCT.

²Programa de Pós-Graduação em Ciência e Engenharia de Materiais –PPGCEM, UDESC.

Palavras Chave: *Blendas Poliméricas, Energia de superfície, Sistemas terciários, Polianilina, Nanotubos de Carbono.*

Highlights

Evaluation of surface energy in tertiary systems of polymeric blends and conducting particles PS/PMMA blends with cocontinuous structure were used as a polymeric matrix to produce composites with Pani or Carbon nanotubes with electrical properties
Surface energy of each phase was calculated from contact angle measures in order to evaluate the preferred phase for particles position based on thermodynamic factors
Scanning electron microscopy were used to access the morphology of both composites and localize particles
Thermodynamic and experimental data were compared, indicating that kinetic parameters also influence particle behavior

Resumo/Abstract

A produção de um material multifuncional, caracterizado por um sistema híbrido ternário composto por dois polímeros de estrutura co-contínua e uma nanopartícula é uma estratégia para conferir propriedades como a condutividade elétrica em todo o volume do material, mas restringindo a posição da partícula condutora em apenas uma fase. Assim, as nanopartículas possuem um caminho para percolar as propriedades elétricas. Para tal, utilizou-se uma blenda polimérica de poliestireno (PS) e polimetilmetacrilato (PMMA) nas proporções 50/50 e partículas de nanotubo de carbono (NTC) ou polianilina (Pani). As blendas foram obtidas através do método de intercalação no estado fundido, utilizando um reômetro de torque Thermo Scientific Haake Reomix 600, à 180°C, 100 rpm, durante 10 minutos. Em seguidas foram moídas e prensadas obtendo-se filmes finos de blenda de PMMA/PS/NTC e PMMA/PS/Pani. Estes filmes foram caracterizados através do ângulo de contato com um goniômetro e-hart Ram, aplicando-se 3 gotas de água deionizada e diiodometano. Também foram produzidas pastilhas de cada blenda, que passaram por processo de quebra criogênica e corte para análise da morfologia através de microscopia eletrônica de varredura. Através dos dados do goniômetro obteve-se as tensões interfaciais entre o PS e o PMMA e entre cada polímero e a nanopartícula do filme em questão. Com as tensões interfaciais foi possível calcular os valores do coeficiente de molhabilidade para cada filme. Tanto no caso do filme de PMMA/PS/NTCPM quanto no filme de PMMA/PS/Pani os coeficientes de molhabilidade indicam uma preferência das nanopartículas pela fase do PS. As imagens de microscopia de varredura indicam esse comportamento para o filme com Pani, mas o filme com NCT mostra uma preferência pela fase do PMMA. Esse resultado indica que, para o caso de compósitos com NTC, há um efeito cinético que influencia a dispersão da nanopartícula na matriz polimérica.

Agradecimentos/Acknowledgments

Esse trabalho foi financiado em parte pela Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior – Brasil (CAPES) – código 001. Os autores ainda agradecem ao CNPq e FAPESC pelos auxílios recebidos.

Síntese e caracterização de um novo complexo polipiridínico de rutênio(II) derivado da 1-metil-indol-2,3-diona com alta luminescência

Pedro H. L. da Silva (PG),¹ Maria C. R. Freitas (PQ),² Fabio da S. Miranda (PQ),^{1*}

pedrohls@id.uff.br; fsmiranda@id.uff.br

¹Instituto de Química, UFF; ²Instituto de Química, UFRRJ.

Palavras Chave: Rutênio Polipiridínico, Luminescente, Quinazolinona, 1,10-fenantrolina.

Highlights

Synthesis and characterization of a new high luminescent ($\Phi_{em}=0.13$ and $\tau_{em}=1.1\mu s$) ruthenium(II) polypyridyl complex derived from 1-methyl-indol-2,3-dione.

Resumo/Abstract

Complexos de rutênio polipiridínicos têm sido largamente estudados nas últimas décadas.¹ Grande parte do interesse no desenvolvimento de novos compostos desta classe está relacionado com suas propriedades fotofísicas e fotoquímicas e consequentes aplicações. Tais compostos de coordenação apresentam potencial para aplicação em diversas áreas de pesquisa como a química medicinal, fotocatálise, entre outras.^{2,3,4} Neste trabalho, um novo ligante polipiridínico foi sintetizado a partir da condensação da 5,6-diamina-1,10-fenantrolina e 1-metil-indol-2,3-diona formando o 11-metilquinazolino[3',4':1,2]imidazo[4,5-f][1,10]fenantrolina-10(11H)-ona (mqip), que foi coordenado com $Ru^{II}(bpy)_2Cl_2$ resultando no complexo $[Ru^{II}(bpy)_2(mqip)](PF_6)_2$. A luminescência do complexo obtido tem um rendimento quântico superior ao $[Ru(bpy)_3]^{2+}$, com $\Phi_{em}=0.13$ e $\tau_{em}=1.1\mu s$. Esse aumento de rendimento quântico na luminescência é resultado da interação do $Ru(II)$ com o novo padrão heterocíclico. O espectro de emissão do complexo está apresentado na Figura 2.

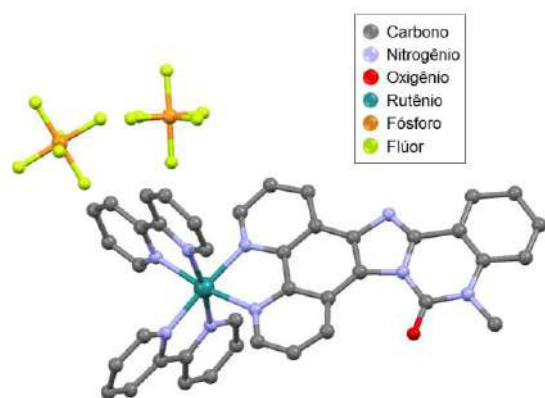


Figura 1. Estrutura do complexo $[Ru^{II}(bpy)_2(mqip)](PF_6)_2$ obtida por DR-X de monocristal (os átomos de hidrogênio foram omitidos para melhor visualização).

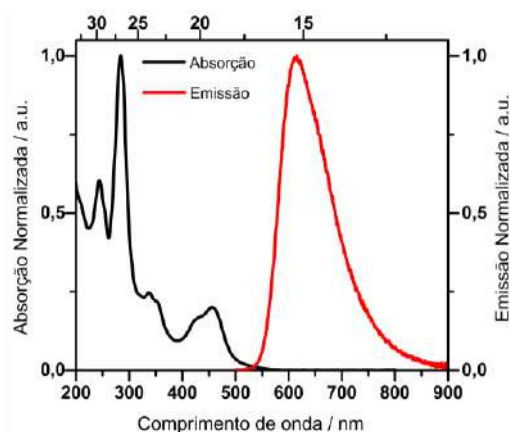


Figura 2. Espectros de absorção e emissão do complexo $[Ru^{II}(bpy)_2(mqip)](PF_6)_2$ em acetoneitrila.

[1] KREITNER, C., et al., *Inorg. Chem.*, **2015**, 54, 11088-11104.

[2] LI, X., et al., *Coord. Chem. Rev.*, **2018**, 375, 134-147.

[3] CHOU, C., et al., *Angew. Chem.*, **2011**, 123, 2102-2106.

[4] PRIER, C. K., RANKIC, D. A., MACMILLAN, D. W. C., *Chem. Rev.*, **2013**, 113, 5322-5363.

Agradecimentos/Acknowledgments

Agradecemos às agências de fomento CAPES, FAPERJ (Processos: E-26/202.719/2018, E-26/203.225/2015) e CNPq, e ao laboratório LDRX-UFF.

Área: **MAT**Inscrição: **01183**

Development and improvement of metallic nanoparticles with plasmon resonance properties for sensing applications

Renan Tostes Couto* (PG),¹ Alexandre de Resende Camara (PQ),² Juliana Fonseca de Lima (PQ)¹

renantostesc@gmail.com

¹Departamento de Química Geral e Inorgânica, Instituto de Química – UERJ, Campus Maracanã, Rio de Janeiro.;

²Departamento de Eletrônica Quântica, Instituto de Física Armando Dias Tavares – UERJ, Campus Maracanã, Rio de Janeiro.

Palavras Chave: Metallic nanoparticles, Gold, Localized surface plasmon resonance (LSPR), Sensing applications.

Highlights

- Metallic nanoparticles for sensing application;
- Localized surface plasmon resonance (LSPR) of gold nanoparticles;
- Construction of optical fibers containing Au nanoparticles with LSPR effect;
- Optical fibers as an instrument to detect pollutants.

Resumo/Abstract

The great applicability of nanoparticles creates a lot of publications in diverse scientific areas, from catalytic purpose because of its large surface area, to solar cells application increasing the light absorption in the device.¹ Recently, nanoparticles applications in the sensing area have increased because of an optical effect known as localized surface plasmon resonance (LSPR). This effect allows the sensing of several interesting molecules, even in low concentration, because it has a high sensitivity.² In this work, the objective is to synthesize gold nanoparticles with plasmon resonance properties with ideal size and shape to be applied in optical fiber to detect pollutants molecules. Gold nanoparticles aqueous suspensions were obtained using tetrachloroauric(III) acid as starting material, sodium citrate as reducing agent, and vigorous stirring and heating to the boiling point for 10 minutes. The nanoparticles were characterized by UV-Visible electronic spectroscopy, transmission and scanning electron microscopy, and dynamic light scattering. In Figure 1, UV-Vis spectrum implies the formation of spherical nanoparticles with 25 nm. The optical fibers were previously cleaned and silanized with Piranha solution and (3-mercaptopropyl)-trimethoxysilane respectively. The nanoparticles were deposited in optical fibers by the immersion method and the efficiency concerning the LSPR effect was evaluated by UV-Vis spectroscopy. Furthermore, the optical fibers ability to sensing organic dye degradation was evaluated applying LSPR effect.

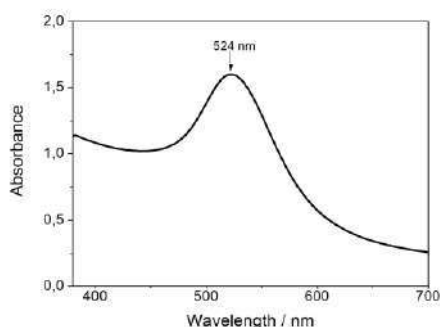


Figure 1: UV-Vis spectrum for Au nanoparticles aqueous suspension.

1. Santos, J. F. L. *et al. Quim. Nova* **39**, 1098–1111 (2016).
2. Mohammadzadeh-Asl, S., Keshtkar, A., Ezzati Nazhad Dolatabadi, J. & de la Guardia, M. *Biosens. Bioelectron.* **110**, 118–131 (2018).

Synthesis and characterization of a novel Ru(II) complex containing a dipyrido[3,2-a:2',3'-c]phenazine(dppz)-coumarin conjugate as ligand

Mikaelly O. B. de Sousa (PG)^{1*}, Maria D. Vargas (PQ)¹, Fabio S. Miranda (PQ)¹

mikaellysousa@id.uff.br

¹ Instituto de Química, Universidade Federal Fluminense, Campus do Valonguinho, 24020-150, Niterói-RJ, Brasil.

Palavras Chave: Ru(II) complex, Dipyrido[3,2-a:2',3'-c]phenazine (dppz), Coumarin

Highlights

In donor-acceptor (D-A) structures, an intense charge transfer (CT) process occurs resulting in a $\Phi_{em} \approx 10\%$. Complex **1a** allows CT between Ru(II) and L1 (coumarin (D) and dppz (A)).

Abstract

The novel ligand was obtained^{1,2} in 49% yield and the complex **1a** was prepared using PF₆⁻ as counterion, in 53% yield. Both compounds were characterized by spectroscopic techniques.

The ¹H NMR spectrum of the ligand L1 (TFA-d, 500 MHz) exhibits typical signals of the dppz and coumarin aromatic hydrogens in the δ 10.5-7.7 range. The spectrum of **1a** (CD₃CN, 500 MHz) displays all 31 hydrogens associated to L1 and to the bipyridines in the expected regions, including a singlet in δ ~11.5 associated to the -NH amide group. The IR spectrum of **1a** (ATR, 4000-600 cm⁻¹) shows the ν (C=O) band at 1710 cm⁻¹, a strong band at 828 cm⁻¹ (PF₆⁻) and a band at 555 cm⁻¹ attributed to the Ru-N bond, evidencing formation of the complex. The mass spectrum obtained in methanol displays the molecular ion peak of **1a** at m/z (M²⁺) = 441.54 (calc. = 441.5795), further confirming the presence of the compound.

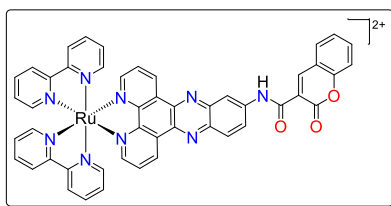


Fig. 1. Structure of **1a**.

Emission data were obtained by excitation of the two absorption bands of **1a** at λ_{max} . 410 and 450 nm (argon, CH₃CN, 1.64x10⁻⁵ mol/L) and both excitations resulted in emissions at λ_{max} . 630 nm. Excitation and

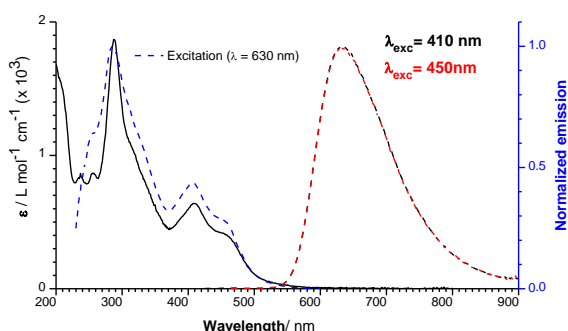


Fig. 2. Absorption, emission and excitation spectra of **1a**.

absorption spectra display similar profiles, which confirms the purity of the compound and indicates that only one emissive state is present. The fluorescence quantum yield ($\Phi_f = 9.98\%$, calculated using [Ru(bpy)₃]²⁺ in H₂O as reference) is higher compared to [Ru(bpy)₂(dppz)]²⁺ ($\Phi_f = 3.1\%$, argon, CH₃CN)³, suggesting that the coumarin moiety acts as donor in this system. Furthermore, this result shows that despite being a non-rigid π -conjugate system, it is possible to overcome the low fluorescence that occurs frequently in less conjugated or with free rotation structures.⁴

Time-resolved fluorescence measurements gave the lifetime (emission decay) value for **1a** = 1.2 μ s. The emission spectra obtained by excitation at $\lambda = 315$ nm (absorption region typically associated to coumarin moieties) changed after the Nd:YAG laser pulses (5.6 mJ) and displayed an additional emission band around 350 nm. The longer the exposure to the laser beam, the more intense the emission at 350 nm and the less intense the band at 630 nm. The same was observed for $\lambda_{exc} = 410$ and 450 nm. The data suggest that fragmentation of the amide bond in **1a** occurred upon laser pulse, with the release of the coumarin fragment.

¹ Choi, C-S. *et al. J. Chem. Soc., Perkin Trans. 2*, **2000**, 243.; ² Wang, K. *et al. Spectrochim. Acta A: Mol. Biomol. Spectrosc.*, **2015**, 144, 235.; ³ Deraedt, Q. *et al. Inorg. Chem. Front.*, **2017**, 4, 91.; ⁴ Choi, C-S. *et al. Bull. Korean Chem. Soc.* **2006**, 27 (10), 1601.

Acknowledgments

CNPq, FAPERJ (E-26/202.719/2018, E-6/203.225/2015) and CAPES for financial support.

Área: INO

Nº de Inscrição: 01185

Estudo e caracterização do complexo trinuclear de rutênio com ligante anfífilo 1,3,4-oxadiazólico por espectroscopia de fluorescência

Elizangela Cavazzini Cesca* (PG)¹, **Herbert Winnischofer (PQ)**¹, **Eduard Westphal (PQ)**².

eliscesca@yahoo.com.br

¹Departamento de Química UFPR; ²Departamento Acadêmico de Química e Biologia UTFPR.

Palavras Chave: Rutênio, Cluster trinuclear, 1,3,4-Oxadiazol, Fluorescência, Langmuir-Blodgett.

Highlights

Study and characterization of the ruthenium trinuclear complex with 1,3,4-oxadiazolic amphiphilic ligand by fluorescence spectroscopy. The ruthenium cluster with amphiphilic ligand was characterized by spectroscopic and electrochemical techniques in solution and studied in a Langmuir-Blodgett Trough. The cluster emits at 546 nm when excited at 380 nm (MLCT band Ru→L1).

Resumo/Abstract

Sintetizamos o *cluster* trinuclear de rutênio [Ru₃O(CH₃COO)₆(py)₂L1]PF₆ = (**Ru₃OL1**) com o ligante anfífilo 2-(4-dodeciloxifenil)-5-(4-piridil)-1,3,4-oxadiazol = (**L1**), que na forma livre apresenta emissão em 381 nm com rendimento quântico de fluorescência de $\Phi = 0,79$, característica comum a derivados de 1,3,4-oxadiazol. O *cluster* foi caracterizado por ESI-MS, RMN de ¹H, FTIR, Raman, UV-vis, voltametria cíclica, espectroeletróquímica UV-Vis e fluorescência. A característica anfífilica do complexo permitiu o estudo na Cuba de Langmuir devido a formação de um filme auto organizado na interface água-ar possibilitando a transferência do filme para substratos de quartzo, ouro e FTO e posterior caracterização destes filmes de Langmuir-Blodgett por UV-Vis, IRRAS, Raman e voltametria cíclica. A característica do espectro de RMN de ¹H confirma a obtenção de um complexo assimétrico com carga total 1+, devido a não equivalência dos sinais dos hidrogênios dos acetatos, além dos sinais de ¹H do ligante piridina ficarem mais blindados em relação a piridina livre, devido a anisotropia paramagnética da unidade Ru₃O¹. Estas interpretações estão concordantes com os resultados de espectrometria de massas, que apresentou uma distribuição isotópica característica de complexos trinucleares de rutênio, com íon molecular com m/z M⁺ = 1240.1125, outra observação relevante é que a fragmentação do complexo se inicia pela perda do ligante piridina, indicando que a ligação do **L1** ao *core* do *cluster* é mais forte. A voltametria cíclica do **Ru₃OL1** apresentou quatro processos com valores de E_{1/2} = -1,03; 0,13; 1,15; 2,03 V vs EPH atribuídos aos pares de oxidação do *cluster* **Ru₃OL1** (-1/0; 0/1+; 1+/2+; 2+/3+ respectivamente). Nos ensaios de espectroscopia de fluorescência do complexo (a temperatura ambiente, em clorofórmio e desaerados com N₂) observamos fluorescência ao excitar na banda de absorção em 380 nm (atribuída a transição MLCT *cluster*→**L1**), com máximo de emissão da banda em 546 nm. Os *clusters* trinucleares de rutênio são conhecidos por promoverem o *quenching* de fluorescência de outros compostos devido ao estado excitado tripleto do *cluster* por transferência de energia ou transferência de elétrons no estado excitado (ET). Além disso, fatores como o caráter π-aceitador do ligante também influenciam à promoção do *quenching*². Os estudos para a compreensão da fluorescência do complexo **Ru₃OL1** ainda estão em andamento.

- (1) COTTON, A. F. *Inorg. Chem.* **1998**, 37 (22), 5710–5720.
- (2) Henderson, J.; Glover, S. D.; Lear, B. J.; Walker, D.; Winkler, J. R.; Gray, H. B.; Kubiak, P. J. *Phys. Chem. B* **2015**, 119, 7473–7479.

Agradecimentos/Acknowledgments

Ao Professor Hugo A. G. Olmedo, CAPES, CNPq, UFPR e UTFPR.

Determination of the Emission Quantum Yield of a Branched Polyethyleneimine-Porphyrin Conjugate

Érico M. de Souza (IC),¹ Adrian Kreuz (PG),¹ Gianluca C. Azzellini (PQ), 1*

emsouza@usp.br; akreuz@usp.br; gcazell@usp.br

¹ Instituto de Química, Universidade de São Paulo

Key Words: Porphyrin Photosensitizer; Branched Polymer; Photodynamic Therapy; Fluorescence

Highlights

Polyethyleneimine-Porphyrin Conjugate (PPC) has been synthesized aiming to photodynamic therapy applications and film formation; PPC shows solvent dependent fluorescence quantum yields

Resumo/Abstract

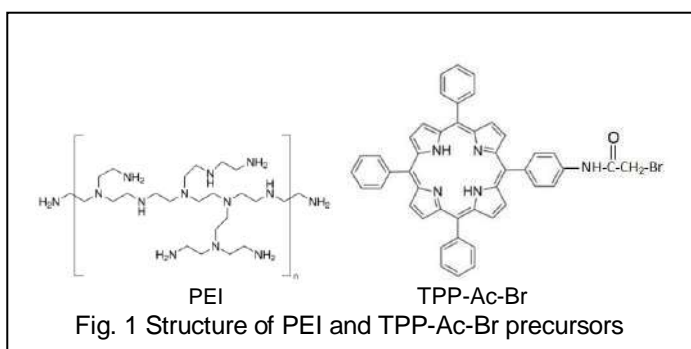
Polyethyleneimines (PEI) are an interesting class of polymers used in gene transfection, layer-by-layer film formation among other applications and enable functionalization by its primary amine residues. Porphyrins are remarkable photosensitizers in photocatalysis, energy conversion and photodynamic therapy (PDT).

In the present study a Polyethyleneimine-Porphyrin Conjugate (PPC) has been synthesized using a branched PEI ($M_n \sim 60,000$) and a porphyrin with an alkyl halide terminus (TPP-Ac-Br) that react with PEI primary amines (Fig. 1). In a first approach have been prepared conjugates with 1:1 PEI-Porphyrin molar ratio. The PPC is soluble in water, methanol (MeOH) and dichloromethane (DCM), indicating the capacity of the conjugate in solubilize the TPP-Ac-Br in water and MeOH.

The absorption spectra of the porphyrin in the PPC follow the porphyrin free base profile with a Soret band and four Q bands. The Soret band maxima is located about 420 nm in all tested solvents (H₂O, MeOH, DCM), but in water is observed a decrease of molar absorptivity as well an increase in the half band width, revealing a more complex vibronic structure.

The PPC shows fluorescence emission with roughly the same maxima in all tested solvents: 650 nm (Q₀₋₀) and 712 nm (Q₁₋₀). The fluorescence quantum yield (Φ_f) was calculated using the optical dilute method and TPP used as fluorescence standard ($\Phi_f = 0,13$).

The Φ_f of the porphyrin in PPC is decreased compared with TPP-Ac-Br in DCM (Table I).



| Table I Fluorescence Quantum Yields (Φ_f) | | |
|--|------------------|----------|
| Compound | Solvent | Φ_f |
| TPP-Ac-Br | DCM | 0,11 |
| PPC | DCM | 0,081 |
| PPC | MeOH | 0,093 |
| PPC | H ₂ O | 0,035 |

The lowest Φ_f is observed in water ($\Phi_f = 0,035$) reflecting a porphyrin microenvironment in the conjugate with strong interaction with solvent, probably due to the amine protonation in water.

In conclusion was prepared a promising conjugate for application in PDT and film formation and was carried out a preliminary spectroscopic characterization. Synthesis of PPC with greater porphyrin to PEI ration are in course as well studies concerning PDT such as singlet oxygen yield determination and cytotoxicity studies.

Acknowledgments: IQ - USP

Área: **EDU**Nº de Inscrição: **01187**

Sabão artesanal: uma proposta de educação ambiental sustentável para barracas da praia do Chapéu Virado, em Mosqueiro - PA

Luíz P. B. Freitas (IC),¹ Alan J. B. Sá (IC),^{1*} Gabriela M. S. Trindade (IC),¹ Carla R. O. Carneiro (IC),¹ Ionara A. Terra (PQ).¹

lpbf050897@gmail.com; alanjbs99@gmail.com

¹Departamento de Ciências Naturais, UEPA

Palavras Chave: Descarte de Óleo, Sabão Artesanal, Meio Ambiente, Desenvolvimento Sustentável

Highlights

Handmade soap: a proposal for sustainable environmental education for tents on the beach of Chapéu Virado, in Mosqueiro – PA. The problem with the discarding of oil has been constant in Mosqueiro in Pará. The project seeks environmental awareness to the owners of beach huts and improvement in the quality of the place.

Resumo/Abstract

Nas últimas décadas, a preocupação com o meio ambiente cresceu consideravelmente, principalmente quando se trata de descarte de resíduos, que degradam o meio ambiente. Para Strauch e Albuquerque (2008), a problemática dos resíduos tem como base o consumo e produção, que, por meio do desenvolvimento econômico, acabaram se agravando. Contudo, Jacobi (2003) propõe que a educação ambiental se faz essencial no combate a degradação socioambiental, pois promove um desenvolvimento sustentável, causando uma mudança de hábitos nos indivíduos. No meio desses resíduos sólidos e líquidos, está o óleo de cozinha, que, geralmente é descartado em pias e sanitários, e conforme Pitta et al (2009), o óleo de cozinha pode prejudicar tanto as tubulações e esgotos, dificultando o escoamento de dejetos, mas também prejudica os rios e mares que são seus destinos, podendo causar a morte de diversos organismos aquáticos. Tendo em vista os diversos problemas que o óleo de cozinha pode trazer no seu descarte irregular e a preocupação com os impactos ambientais, propôs-se aplicar oficinas de reutilização do óleo de cozinha para a produção de sabão artesanal, na praia do Chapéu Virado, em Mosqueiro-PA, local no qual encontra-se diversas barracas que produzem e comercializam alimentos. Para a realização das oficinas de sabão artesanal como prática pedagógica de educação ambiental, se faz necessário dividir a organização em quatro etapas, sendo que, a primeira etapa, já cumprida em dezembro de 2018, consistiu na visita de campo para a coleta de dados acerca dos pontos de vendas que comercializam produtos alimentícios (Figura 1), bem como, foi realizada entrevistas aos proprietários dos pontos comerciais, a fim de obter dados qualitativos e quantitativos. Notou-se, que a coleta do óleo de cozinha é viável, pois as barracas de comida já faziam descarte deste óleo em tonéis e esse recolhido por uma empresa privada, do qual não há qualquer ciência do destino do óleo. Além disso, a prefeitura municipal não oferece qualquer subsídio para os comerciantes, assim como, os funcionários demonstraram interesse na realização das oficinas. A segunda etapa é compreendida no planejamento da realização das oficinas, esta etapa está prevista para fevereiro de 2019. Na terceira etapa, após o planejamento das oficinas a serem desenvolvidas no primeiro semestre de 2019, compreende em promover a divulgação das datas através de banner, distribuição de panfleto e cartazes para todos dos pontos comerciais e comunidade ao entorno, prevista para março de 2019 e por fim, a quarta etapa, realização das oficinas de sabão artesanal. Assim, espera-se por meio desta proposta, contribuir para a diminuição de descarte irregular de óleo, amenizando assim os impactos ambientais, além do mais, contribuir de maneira significativa com os gastos com sabão industrial, de forma a promover um desenvolvimento sustentável na região da ilha do Mosqueiro.



Figura 1: Pontos de vendas de produtos alimentícios na praia do Chapéu Virado em Mosqueiro - PA

Agradecimentos/Acknowledgments

Aos proprietários das barracas, à Universidade do Estado do Pará, à Professora Doutora Ionara Antunes Terra, por nos proporcionarem apoio para a realização do projeto.

Determination of Sulfites in wine and food by gas diffusion microextraction: using espectrocolorimetric iron-phenantroline method

Lucas B. Pereira¹ (IC), Karen C. A. Francisco (PG), Arnaldo A. Cardoso (PQ)

Lucas.Bueno@unesp.br

¹Departamento de Química Analítica, Instituto de Química, UNESP, Araraquara-SP

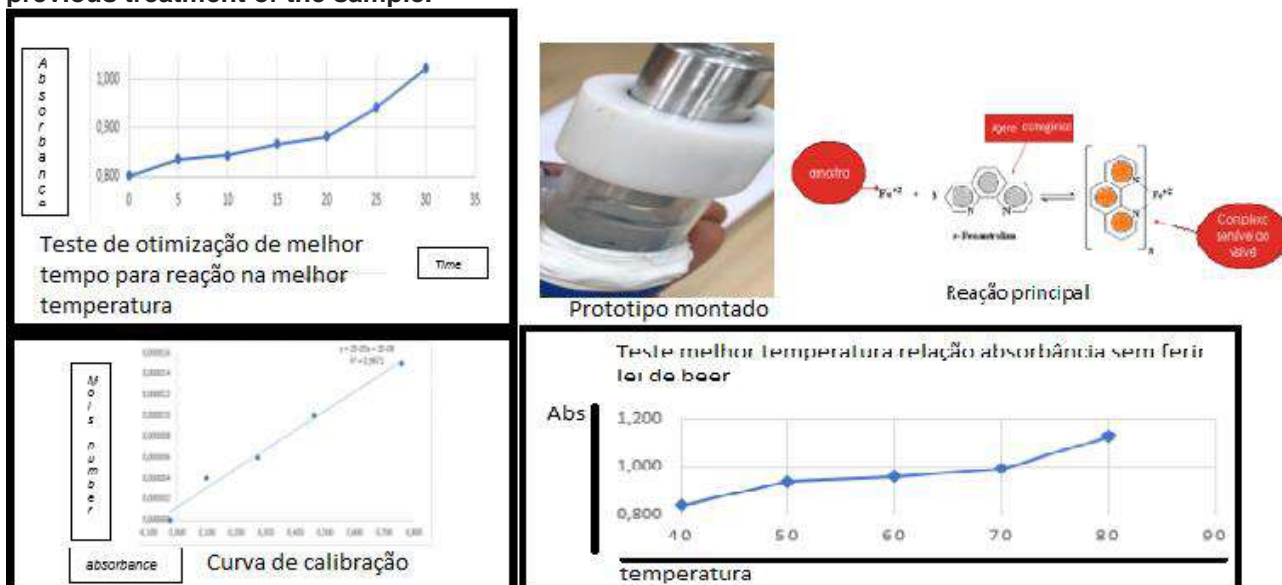
Palavras Chave: sulfite, gas diffusion, method development, microextraction, food analysis, wine

Highlights

Sulfites are a class of sulphurous acid derivatives that are present in salts and gases composition like SO₂. Developed mainly for foods and beverages industries, sulfites are used as antioxidants.

Resumo/Abstract

Chemical species of sulfur, like sulfur dioxide, sulfite and metabisulfite are preservatives of wine, fruit juices, beers, jams, dry fruits, fishes and sea food. Literature reports warn that ingestion of sulfite may lead to allergic processes, gastric irritation, nausea, headaches. Within this context, the determination of sulfite class compounds in food is a relevant analytical problem. Food and beverage matrices are complex with relatively high concentrations of organic compounds and ionic constituents. The method presented here is based on the reduction of Fe(III) by Sulfite and colorimetric determination of the Fe(II) o-Phen species, colored compound with maximum absorption at 510nm. It uses an initial step of converting sulfite to sulfur dioxide by the addition of phosphoric acid; for this purpose a chamber for the addition of the sample and a collector containing the reagents to react with the sulfur dioxide was made by reused materials. Phase change is a simple alternative to avoid problems of complex matrix interferers. Adequate analytical parameters for food analysis were evaluated. The results show that it is possible to use liquid and solid matrices without previous treatment of the sample.



Agradecimentos/Acknowledgments

Financial support for this work was provided by FAPESP (Process 2015/2326-5)

Área: **EDU**Nº de Inscrição: **01189**

Recurso Audiovisual: Uma Proposta Pedagógica para o Ensino de Química em uma Escola no Distrito de Mosqueiro-PA

Cíntia R. Barros (IC),¹ Carla. R. O. Carneiro (IC),¹ Gabriela M. S. Trindade(IC),¹ Joselina A. Carvalho(IC),¹ Ionara A. Terra (PQ).¹

cinthia_rb@yahoo.com.br; josy.carvalho@hotmail.com

¹Departamento de Ciências Naturais, UEPA

Palavras Chave: *Ensino de Química, Recurso audiovisual, Ludicidade.*

Highlights

Audiovisual resource: a pedagogical proposal for Teaching Chemistry in a school in the district of Mosqueiro-PA. This work intends to carry out actions with scientific perspectives through workshops using an audiovisual resource aimed at Teaching Chemistry at a school in the Island of Mosqueiro-PA.

Resumo/Abstract

Na perspectiva de Tunes, Tacca e Bartholo Júnior (2005, p. 693)¹, o ambiente escolar é compreendido como um espaço privilegiado de negociações e de produção de novos sentidos e significados a respeito, principalmente, dos diferentes conceitos escolares. Aliado a esses fatores, é de suma importância que o professor compreenda que o processo de ensinar implica em uma nova forma de conceber a sala de aula que deverá ser não apenas um local de transmissão, mas, em especial, um espaço de construção de conhecimento. Entretanto, para que isto ocorra, é necessário que o professor reveja seu modo de ensinar e de conceber o ensino. O processo de ensinar e aprender, é buscar informações, rever a própria experiência, adquirir habilidades, adaptar-se as mudanças, descobrir significado nos seres, nos fatos, nos fenômenos e nos acontecimentos, modificar atitudes e comportamentos (CLEMENTINA, 2011)². Desse modo, o presente trabalho tem como proposta realizar ações com perspectivas científicas, a partir da realização de oficinas utilizando recurso audiovisual voltado para o Ensino de Química na E.E.E.F.M. Aberlado Leão Condurú, localizada na Ilha de Mosqueiro-PA. Para a realização da prática pedagógica, se faz necessário quatro etapas de desenvolvimento, a primeira, já cumprida em dezembro de 2018, onde foi realizada a visita de campo para coleta de dados acerca do ambiente escolar, bem como, foi realizada uma reunião entre a coordenação pedagógica e professores de química da escola e a coordenação e membros da equipe do projeto a fim de abstrair dados quantitativos e qualitativos (Figura 1) para elencar possíveis temáticas e programação das oficinas. A segunda etapa se dará na apresentação de possíveis propostas de temas e conteúdos de Química, bem como o planejamento dos mesmos juntamente com a coordenação pedagógica e professores da escola que serão desenvolvidos durante as oficinas, esta etapa está prevista para fevereiro de 2019, Na terceira etapa após aprovação pela coordenação da escola das oficinas a serem desenvolvidas no primeiro semestre de 2019 se pretende promover a divulgação das datas e temas das oficinas através de banner, distribuição de panfletos e cartazes a toda a comunidade acadêmica, prevista para março de 2019 e por fim, a quarta etapa, realização das oficinas as quais serão mediadas por recursos de aprendizagens virtuais tais como: filmes e séries a fim de serem pontes para conectar a Química ao cotidiano e realidade do aluno. Os filmes e séries selecionados como alternativa para facilitar o ensino-aprendizagem tais temáticas em química foram: Perdido em Marte (Fox, 2015); Perdidos no Espaço (Netflix, 2018) e Fullmetal Alchemist (Bones, 2003) os quais trazem dentro de suas narrativas uma abordagem científica que possibilita uma forma lúdica e diferenciada ensinar Química. Assim, espera-se com esta proposta, estimular os alunos a debaterem e questionarem problemáticas presentes nos filmes e series, além de sensibilizá-los, de forma que seja aguçada a curiosidade e a reflexão crítica por meio de ferramentas audiovisuais que fazem parte de suas vidas cotidianas, promovendo a alfabetização científica.



Figura 1: Dependência externa da E.E.E.F.M. Aberlado Leão Condurú e reunião com membros da escola.

Agradecimentos/Acknowledgments

A E.E.E.F.M. Aberlado Leão Condurú, à Universidade do Estado do Pará, à Professora Doutora Ionara Antunes Terra, por nos proporcionarem apoio para a realização do projeto.

42ª Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química: Eixos Mobilizadores em Química

Thin films of nanocomposites between multi-walled carbon nanotubes and graphene oxide obtained in liquid-liquid interfaces

Cristian de Souza Pinto (PG),¹ Aldo J. G. Zarbin (PQ).¹

cris1994sp@gmail.com; aldozarbin@ufpr.br

¹Departamento de Química, UFPR.

Key Words: *Thin films, Carbon nanotubes, Graphene oxide, Nanocomposites, Liquid-liquid interface.*

Highlights

Thin films of carbon nanotubes and graphene oxide nanocomposites obtained by the liquid-liquid interface method; Continuous thin films of graphene oxide and carbon nanotubes; Self-organized thin films.

Abstract

Nanocomposite materials formed between two or more carbon nanostructures have been extensively studied due to the combination of different properties in a final material. In this work it was studied thin films materials composed by multi-walled carbon nanotubes (NTC-Fe) and graphene oxide (GO) that were prepared at liquid-liquid interfaces. The methodology of thin films preparation was developed by our research group (GQM-UFPR) and consists of dispersing carbon nanotubes in the organic phase and GO in the aqueous phase, mixing both dispersions and promote vigorous stirring to induce the materials migration to liquid-liquid interface. We achieved controlled properties of thin films by using NTC-Fe mass of 0.15, 0.25 or 0.30 mg, agitation time of 2, 24 or 65 h, and using different organic phases, toluene or n-hexane. Scanning Electron Microscopy (SEM) images showed that all films obtained are self-organized at the interface, with GO on the bottom and NTC-Fe on the top of the film (Figure 1). Sheet resistance values varied between 1.4 and 8.4 $\text{M}\Omega/\square$, and transmittance values at 550 nm between 70 and 80% depending on NTC-Fe mass used. Films prepared with toluene as organic phase, with shorter preparation times and higher NTC-Fe mass presented the most continuous GO layer and higher homogeneity of NTC-Fe, and films prepared with n-hexane as organic phase presented discontinuous GO layer and larger aggregates of NTC-Fe.

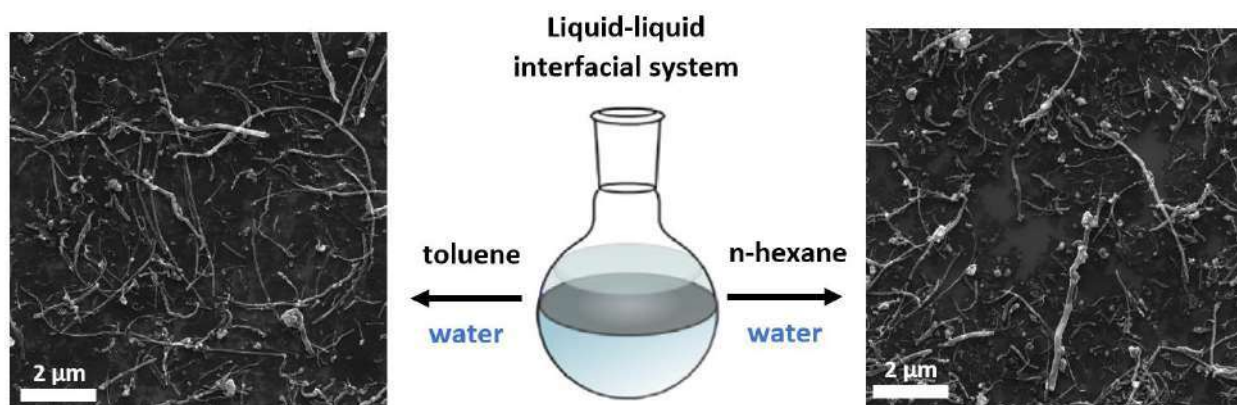


Figure 1. Schematic representation of the liquid-liquid interfacial system used, and SEM images of the thin films obtained using toluene and n-hexane as the organic phase.

Acknowledgments

The authors acknowledge to CNPq, CAPES and INCT-Nanocarbono for the financial support.

Área: EDU

Nº de Inscrição: 49347

TRATAMENTO DE RESÍDUOS DE DICROMATOMETRIA E PERMANGANIMETRIA COMO PROPOSTA DE AULAS PRÁTICAS DE QUÍMICA ANALÍTICA NA UFRRJ

Renan A. P. D'avila* (PG),¹ **Gabrielle B. S. Mello** (IC),² **Darven G. X. Junior** (IC),² **José Geraldo R. Junior** (PQ),¹ **Vanessa G. K. de Almeida** (PQ)¹

renandavila@ufrrj.br

¹Departamento de Química Analítica, UFRRJ; ²Departamento de Engenharia Química UFRRJ

Palavras Chave: Dicromato, permanganato, sustentabilidade, tratamento, universidade

Highlights

O tratamento dos resíduos das aulas práticas de Análise Quantitativa é apresentado como uma proposta de ensino na disciplina de Análise Qualitativa.

Resumo/Abstract

No Laboratório de Química Analítica da UFRRJ é realizado aulas práticas de Química Analítica Quantitativa, que apresenta os métodos de Dicromatometria e Permanganimetria para determinação do teor de Fe total, Fe^{2+} e Fe^{3+} (1). Uma quantidade significativa de resíduos tóxicos, contendo os íons Hg^{2+} , Cr^{3+} , Sn^{4+} , Mn^{2+} , além do pH fortemente ácido, é gerada ao final destas aulas. A disciplina de Química Analítica Qualitativa gera resíduos tóxicos de Cr^{3+} , $\text{Cr}_2\text{O}_7^{2-}$, Mn^{2+} , entre outros, durante a execução das marchas sistemáticas. A fim de reduzir a quantidade de resíduos tóxicos gerados neste laboratório e conscientizar os discentes quanto a necessidade de alternativas para reaproveitamento de resíduos químicos, este trabalho propõe uma metodologia para o reaproveitamento dos rejeitos da dicromatometria e permanganimetria nas aulas práticas de Análise Qualitativa. Dessa forma, ao cursarem a disciplina de Análise Qualitativa, os discentes utilizarão as técnicas e procedimentos adotados na execução das marchas analíticas dos cations do grupo III-A sobre os resíduos. O método de tratamento se baseia no isolamento e identificação de Cr^{3+} e do Mn^{2+} . O resíduo da dicromatometria, originalmente ácido, tem seu pH elevado até 8,0, com adição lenta de solução de NaOH 6,0 mol L^{-1} . Com a elevação do pH, os íons Cr^{3+} e Fe^{3+} são precipitados sob a forma de hidróxidos. Após a precipitação, é adicionado H_2O_2 , sob aquecimento e agitação, objetivando a oxidação do Cr^{3+} para CrO_4^{2-} . O sistema é deixado em repouso para separação do precipitado de $\text{Fe}(\text{OH})_3$ da solução contendo CrO_4^{2-} . Após a separação, é adicionado H_2SO_4 3,0 mol L^{-1} para obter o íon $\text{Cr}_2\text{O}_7^{2-}$. Nos resíduos da permanganimetria o processo é semelhante: adiciona-se NaOH sólido até ocorrer a precipitação dos íons Mn^{2+} e Fe^{3+} . Descarta-se o sobrenadante e adiciona-se solução de H_2SO_4 3,0 mol L^{-1} ao precipitado, para a dissolução do $\text{Fe}(\text{OH})_3$. O sistema é filtrado para a remoção do $\text{Mn}(\text{OH})_2$ e, em seguida, ao precipitado é adicionada solução de HCl 6,0 mol L^{-1} , até a completa solubilização do $\text{Mn}(\text{OH})_2$. A inserção desta metodologia deve vir acompanhada da exposição dos métodos de tratamento de resíduos, e visões de conscientização ambiental, com o intuito da prática de princípios da analítica qualitativa com uma nova abordagem, diferente da literature⁽²⁾. Cria-se no futuro um profissional com senso crítico de responsabilidade com todos os reagentes utilizados.

Agradecimentos/Acknowledgments

Agradeço a UFRRJ pelo suporte e por todas as pessoas que diretamente ou indiretamente contribuíram para este trabalho.

Referências: 1 Abreu, D. G., Costa, C. R., Assis, M. D., Iamamoto, Y., Uma proposta para o ensino da química analítica qualitativa, Química Nova, Vol. 29, 02, 2006

2 Nobre, A.L.R., Barra, C.M., Casartelli, E.A., Quintero, L.M.C., Lã, O.R., Apostila de Aulas Práticas, UFRRJ, 2002

Área: EDU

Nº de Inscrição: 01192

Formação Inicial de Professores de Química e o uso de Filmes no ensino de História e Filosofia da Química

Ednalva D. R. S. Duarte (PQ),¹ Francisco dos S. Panero (PQ),¹ Viviane de A. Cardoso (PQ),¹ Maria Lúcia Taveira (PQ),¹ Ricardo C. dos Santos (PQ),² Ricardo P. Moreno (PQ).³ ednalva.duarte@ufrr.br; francisco.panero@ufrr.br

¹Departamento de Química, UFRR; ² Insikiran, UFRR; ³ Colégio de Aplicação, UFRR.

Palavras Chave: Cinema, História da Química, Ensino de Química, Motivação da Aprendizagem.

Highlights

Initial Formation of Chemistry Teachers and the Use of Films in Teaching History and Philosophy of Chemistry

The use of films and the motivation of teaching and learning the History and Philosophy of Chemistry.

The films presented were Perfume: the story of a murderer and Fullmetal Alchemist.

Resumo/Abstract

O uso de filmes como estratégia de ensino e aprendizagem é bastante empregado e visa motivar os alunos para o estudo e debate de assuntos em diferentes áreas do conhecimento (SANTOS; AQUINO, 2011). Considerando o desinteresse e o alto índice de reprovação e evasão na área de Química nos diferentes níveis de Ensino, esse trabalho relata a experiência vivida na disciplina QA211 História e Filosofia da Química, do curso de licenciatura em Química da Universidade Federal de Roraima, semestre 2018.1, com os alunos do curso de modo a contribuir para essa motivação e sobre tudo despertar no futuro professor o gosto e capacidade para empregar estratégias inovadoras na sala de aula. Espera-se assim formar professores de química preocupados também em estimular o interesse do aluno, além de trabalhar a capacidade de atenção, análise, avaliação, discussão e integração. O objetivo desse trabalho foi empregar filmes como estratégia de ensino e aprendizagem na disciplina QA211. Nesse sentido, foram apresentados e discutidos os filmes: (1) Perfume: a história de um assassino e (2) Fullmetal Alchemist. Os filmes foram apresentados em duas sessões específicas, nos horários de aulas, em dias diferentes, como estratégia complementar para debater assuntos já trabalhados em sala de aula. Após a apresentação de cada sessão foi aberto ao debate sobre o que foi visto no filme e sua relação com os assuntos vistos na disciplina. Também foi solicitado que cada aluno elaborasse um texto sobre cada filme e a sua relação com os assuntos estudados. Os resultados mostraram que o uso de filme foi bem aceito pelos alunos, promoveu uma discussão pertinente em especial sobre a Alquimia. Por exemplo, em relação ao filme 1 foi possível discutir as técnicas de destilação para extração de óleos essenciais, além de possibilitar a reflexão sobre as condições de vida das pessoas na Idade Média e a discrepância dessa vida entre as classes sociais. O filme 2 possibilitou o aprofundamento e reflexão sobre os princípios fundamentais da Alquimia, a transmutação dos metais e o elixir da longa vida, além de chamar a atenção para os aspectos místicos, os tipos de materiais usados e técnicas empregadas pelos alquimistas, assuntos trabalhados na unidade de Alquimia, entre outros assuntos. Além de contribuir para compreensão da decadência do conhecimento alquímico. Mas também possibilitou a discussão relacionada a outras disciplinas, como por exemplo, Sociologia e Psicologia, contribuindo para refletir sobre as emoções, comportamentos e desejos das pessoas. De modo geral, a estratégia foi bem aceita pelos alunos, que também fizeram sugestões de como planejar e usar essa estratégia em aulas futuras nessa e em outras disciplinas do curso. Os resultados permitiram concluir que o uso de filmes como estratégia de ensino aprendizagem na disciplina de História e Filosofia da Química motivou os alunos e contribuiu para o debate do conhecimento dos alunos sobre os assuntos da disciplina, além de fomentar a escrita e o senso crítico dos alunos.

SANTOS, P. N.; AQUINO, K. A. A Utilização do Cinema na Sala de Aula: Aplicação da Química dos Perfumes no Ensino de Funções Orgânicas Oxigenadas e Bioquímica. **Química Nova na Escola**. v. 33, n. 3, p. 160-167, 2011.

Agradecimentos/Acknowledgments

Departamento de Química/CCT/UFRR

Advances on light storage materials: theory, mechanisms and applications

Lucas C.V. Rodrigues (PQ),^{1*} Miguel A.G.S. Barbará (PG),¹ Danilo O.A. Santos (PG),¹ Luidgi Giordano (PG),¹ Douglas L. Fritzen (PG),¹ Artur Aldi (IC),¹ Veronica C. Teixeira (PQ).²

lucascvr@iq.usp.br

¹Departamento de Química Fundamental, Instituto de Química, USP; ²Laboratório Nacional de Luz Síncrotron, CNPEM.

Palavras Chave: (persistent luminescence, light storage materials, defects, DFT, XEOL, Synchrotron Radiation).

Highlights

Fast green synthesis of materials. Bandgap effect on persistent luminescence. Co-doping effect revisited. Easy way to protect materials from hydrolysis. X-ray induced persistent luminescence.

Resumo/Abstract

Photosynthesis at night, photodynamic therapy in the dark, bioimaging without in-situ excitation sources (or radioactivity)... These applications may sound controversial, but can be achieved using light storage compounds, e.g. persistent luminescence (PeL) materials. These materials store energy in defects releasing it with the aid of thermal energy [1]. Since 1995, with the discovery of a new generation of these phosphors [2], a series of very efficient blue-green phosphors were developed, with 24+ hours persistent luminescence. However, efficient red-NIR materials are needed, specially on energy conversion (chlorophyll absorption) and *in-vivo* diagnostics (tissues/blood transparency). The majority of these PeL materials were discovered in a non-efficient, expensive and pollutant trial-error basis since the exact phenomenon mechanisms are not fully understood.

In this presentation, we will show new advances on the mechanism studies as the effect of the material band gap in the efficiency (Figure, right) and the energy of defect formation in a classic PeL material. Besides, new alternative to irradiation sources as X-ray induced PeL (Figure, left) and the energy transfer from upconverting materials using infrared sources are the focus of this work. Finally, the results of the application of commercial PeL materials for dark-induced photosynthesis of microalgae will be presented.

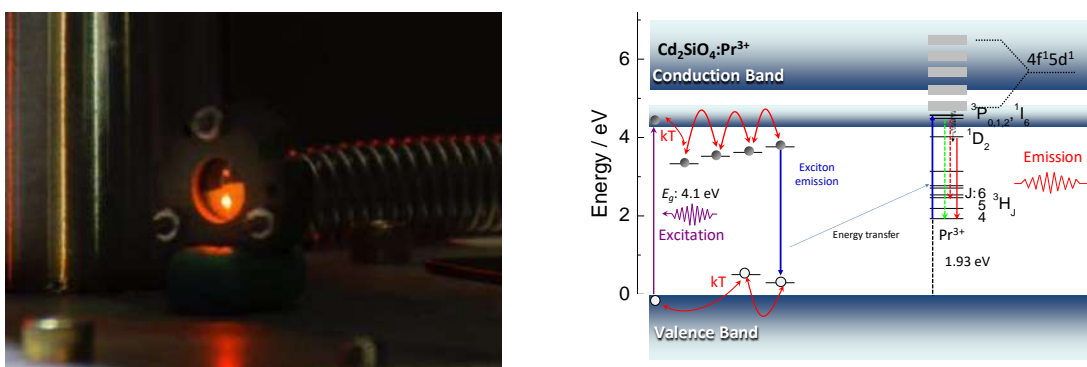


Figure. X-ray induced persistent luminescence of SrS:Eu²⁺,Sm³⁺ (left) and persistent luminescence mechanism of Cd₂SiO₄:Pr³⁺.

Acknowledgements:

FAPESP, CNPq and CNPEM-LNLS

References:

- [1] H.F. Brito, J. Hölsä, T. Laamanen, M. Lastusaari, M. Malkamäki, L.C.V. Rodrigues, Opt. Mater. Express 2 (2012) 371.
- [2] T. Matsuzawa, Y. Aoki, M. Takeuchi, Y. Murayama, J. Electrochem. Soc. 143 (1996) 2670

Área: MAT

Nº de Inscrição: 01195

An environment compatible LDH performing as cation absorber for heavy metal removal from contaminated effluents.

Lucas M. Cunha (IC),¹ Luiz Diego S. Rocha (PG),¹ Roseli M. de Souza (PQ),¹ Luiz F.B. Malta (PQ),^{1*}
lfbmalta@iq.ufrj.br

¹Instituto de Química, UFRJ

Palavras Chave: LDH, EDTA, heavy metal sorption.

Highlights

- EDTA was impregnated on Zn/Fe LDH;
- This impregnation raised in 60 per cent the quantity of cadmium sorption.

Resumo/Abstract

LDH materials are based on an M^{2+} / M^{3+} metal hydroxide network. These are layered materials in which the interlayer space is occupied by anions to compensate for the intralayer positive charge, thus being anion exchangers. The association with ethylenediamine tetraacetic acid (EDTA) makes the LDH a cation exchanger: this property in turn makes possible the capture of metallic cations to the interlayer space. Specifically Zn/Fe LDH contains biocompatible metals in its structure that makes it fit for instance environment remediation applications, such as heavy metals (cadmium and lead) removal from effluents¹.

The Zn/Fe LDH was synthesized rising pH of an acid solution of chloride and nitrate salts using NaOH 5M until pH 8. EDTA was associated to LDH under stirring of an aqueous solution over the LDH for 24h at room temperature. Afterwards, this material was left in a mixture with aqueous solution of $CdSO_4$ at 40°C under magnetic stirring.

FTIR spectra, presented in Figure 1, evidenced for the matrix associated with EDTA the presence of a band at 1590 cm^{-1} relative to carboxylate stretching mode. In contrast the XRD pattern for this material did not show any significant differences, specifically concerning the reflection 003 at 11.3°, from that of the LDH matrix, Figure 2. This leads to the conclusion EDTA may be impregnated but not intercalated. Concerning Cd sorption ICP-OES analysis evidenced the LDH-EDTA sample led to a 60 per cent increase (in mg/kg units) in comparison to the LDH alone (in face of original Cd concentration, 23 % versus 8 % sorption, respectively).

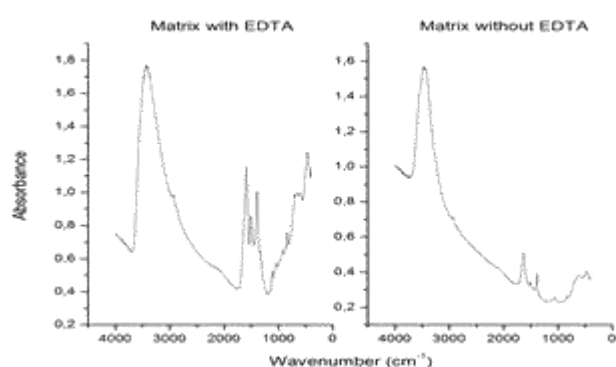


Figure 1: FTIR spectra

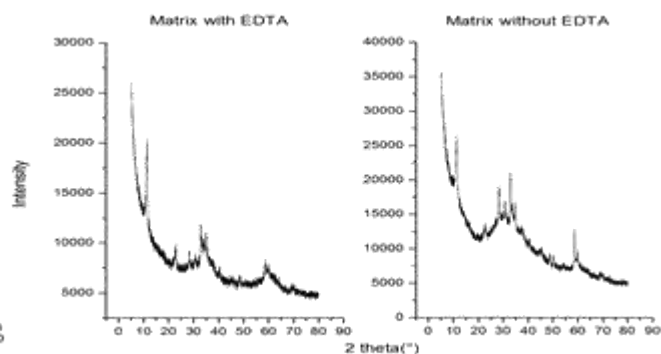


Figure 2: XRD patterns

Agradecimentos/Acknowledgments

CAPES, CNPq and FAPERJ.

¹Rahmanian, O. et al. Journal of Molecular Liquids 256, 2018, 9–15.

Copper-catalyzed one-pot Michael addition of β -nitrostyrene to 4-methylquinazoline and conversion of the nitro group into a nitrile

Natália M. Moreira (PG)*, Arlene G. Corrêa (PQ)

*natalia.menezes@live.com

¹ Laboratory of Synthesis of Natural Products, Centre of Excellence for Research in Sustainable Chemistry, Chemistry Department, Federal University of São Carlos

Keywords: C-H functionalization, Michael addition, quinazoline, β -nitrostyrene, green chemistry

Highlights

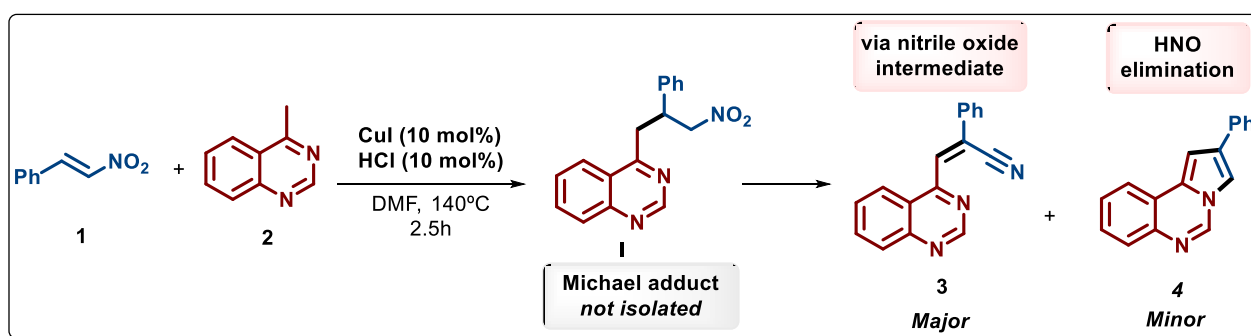
Study of Michael addition of β -nitrostyrene to 4-methylquinazoline through a C(sp³)-H functionalization. *In situ* conversion of the nitro group into a nitrile.

Abstract

C-H functionalization reactions are an important strategy to create carbon-carbon bonds due the atom- and step-economy of these processes. C(sp³)-H activation, specifically, has been widely studied lately, for example, for the functionalization of benzylic C-H bond in azaarenes by 1,4-addition using different Michael acceptors.¹

The use of β -nitrostyrene (**1**) and 4-methylquinazoline (**2**) in copper-catalyzed Michael addition reaction led us to the formation of products **3** and **4**, generated by two possible pathways. The nitro group of Michael adduct can lead to its nitrile-oxide form, which then generate a nitrile,² affording product **3**. On the other hand, the nitro group can be eliminated as HNO₂,³ leading to product **5** after a cyclization.

The aim of this work is to study the selectivity of this new reaction, besides the applicability of the products generated. After a screening of reaction conditions, the best result was obtained using a combination 10 mol% of CuI and HCl, giving **3** in 71% yield and traces of **4**. The stereochemistry of **3** will be determined by X-ray analysis. Moreover, the scope and limitations of this new transformation is under investigation. This methodology can generate potential biologically active compounds, once quinazolines are known by their pharmacological properties.⁴



Scheme 1. Synthesis of new quinazoline derivatives.

Acknowledgments



¹ Jamal, Z.; Teo, Y-C.; Wong, L-K. *Eur. J. Org. Chem.*, **2014**, 7343. Best, D.; Lam, H.W.; *J. Org. Chem.*, **2014**, 79, 831.

² Mendler, B.; Kazmaier, U. *Org. Lett.*, **2005**, 7, 1715.

³ Cao, D.; Ying, A.; Mo, H.; Chen, D.; Chen, G.; Wang, Z.; Yang, J. *J. Org. Chem.*, **2018**, 83, 12568.

⁴ Khan, I.; Zaib, S.; Batool, S.; Abbas, N.; Ashraf, Z.; Iqbal, J.; Saeed, A. *Bioorg. Med. Chem.*, **2016**, 24, 2361.

Synthesis of controlled hybrid materials based on Fe₃O₄ for catalytic applications

Livia Y. Tanaka (IC),¹ Eduardo C. M. Barbosa (PG),¹ Pedro H. C. Camargo (PQ),^{1*}

livia.tanaka@usp.br; *camargo@iq.usp.br

¹Departamento de Química Fundamental, Instituto de Química, Universidade de São Paulo, São Paulo, Brazil.

Keywords: Nanoparticles, Magnetite, Metal Oxide, Noble Metal, Catalysis

Highlights

Magnetically recoverable materials for catalyst recovery and reuse. Synthesis of monodisperse and spheric magnetite nanoparticles as support for noble metals.

Abstract

Metal nanoparticles are of great interest in catalysis due to their size-dependent properties, leading to different activity and selectivity depending on their shape, size and dispersion.^[1] Even though it is essential to recover the catalyst from the reaction mixture, the isolation of these nanoparticles is still challenging. In this context, magnetic particles provide a promising alternative to overcome this issue when used as support for these nanoparticles. Aside from being a great support for metallic catalysts, magnetite offers magnetic properties, thus, it can be easily removed and reused using an external magnet, being a material with great sustainable interest.^[1] In this work, we synthesize nanostructured magnetite (Fe₃O₄) and controlled its morphology, followed by the deposition of metallic nanoparticles on its surface. The first stage consisted on the synthesis of magnetic supports, aiming at optimizing the process. In basic conditions and after solvothermal treatment,^[2] the metallic precursor provided hollow nanospheres (Figure 1-A) that exhibited monodispersity and magnetic properties. Subsequently, *in situ* depositions of metallic nanoparticles on the support were carried out to enhance its catalytic properties (Figure 1-B). To avoid oxidation, magnetite nanoparticles were coated with SiO₂ using a sol-gel method (Figure 1-C).^[3] To investigate the catalytic ability of the synthesized material, the catalysts could be submitted to model reactions and catalysis in further reactions to comprehend how magnetite's physicochemical properties contribute to its application in catalysis.

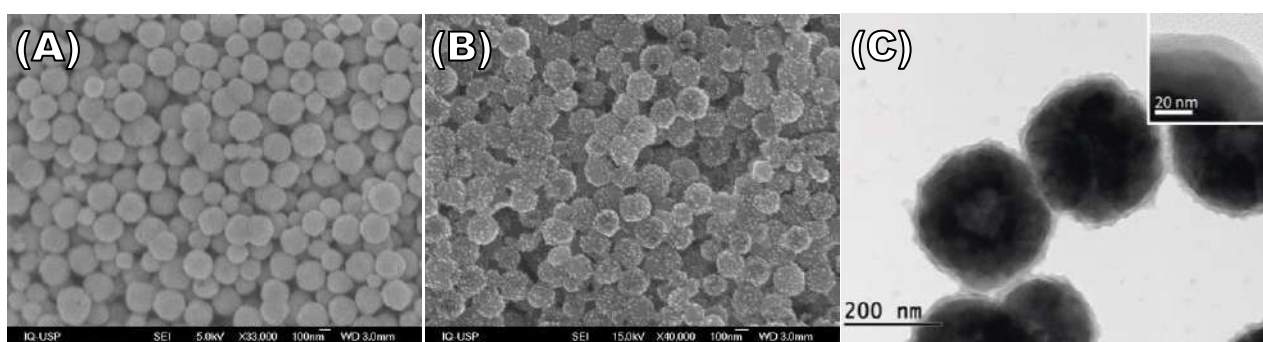


Figure 1: SEM images of (A) spheric Fe₃O₄ nanoparticles, (B) Fe₃O₄-Au nanostructures and TEM image of (C) Fe₃O₄@SiO₂.

References:

- [1] V. Polshettiwar et al. Chem. Rev., 111, 3036–3075 (2011).
- [2] Y. Zong et al. J. Magn. Magn. Mater., 423, 321–326 (2017).
- [3] Abbas et al., J Nanomed Nanotechnol, 5:6 (2014).

Acknowledgments

FAPESP (Grants #2018/02435-8 and #2015/26308-7)

Ugi four-component reaction using “*in situ*” isonitrile preparation

Gustavo B. dos Reis (IC), Evelyn G. Romano (IC), Diogo Oliveira-Silva (PQ)*

gustavo.barbosa@unifesp.br; dosilva@unifesp.br

Departamento de Química, Instituto de Ciências Ambientais, Químicas e Farmacêuticas, Universidade Federal de São Paulo – Campus Diadema, Diadema, Brazil.

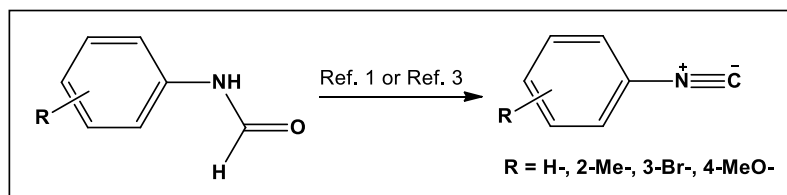
Palavras Chave: *Isocyanide, Multi-component reaction, one-pot isonitrile*

Highlights

Ugi-4CR was performed using isonitrile preparation in one-pot approach. No interference was observed due to the isonitrile byproducts.

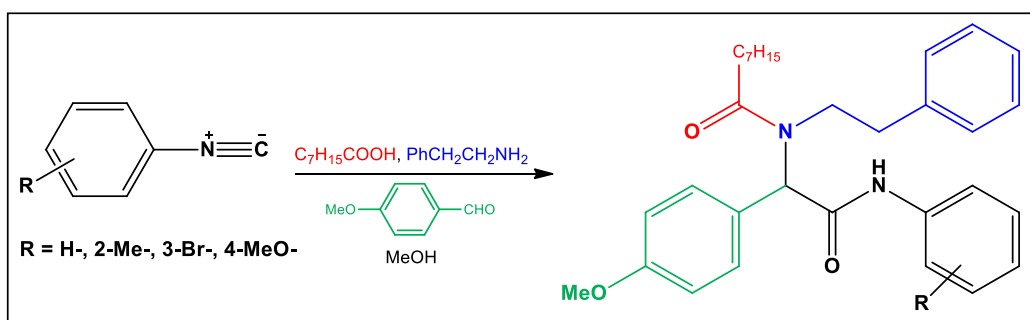
Resumo/Abstract

Isonitriles are intermediates with an extraordinary functional group owing to the presence of an isocyano group (R-NC) with ambiphilic reactivity, which enables them to react with electrophiles, nucleophiles, and radicals. Many natural isonitriles are known to have a strong antibiotic, fungicidal or antineoplastic activity [1]. One remarkable isonitrile-dependent application is the Ugi four-component reaction (Ugi-4CR), which is among the most versatile methods for the synthesis of complex structures [2]. There are several methods reported for isonitrile synthesis by dehydration of formamides. Unfortunately, most of these methods have limited utility and applicability [3]. In this sense, our study consisted to evaluate two convenient methodologies for isonitrile preparation in order to employ the obtained compound directly to Ugi four-component reaction in a one-pot approach for model reaction. The starting material for the isonitriles



were prepared by the formylation of 2-methyl, 3-bromo, 4-methoxyanilines and aniline itself, in presence of excess of formic acid [4, 5]. All yielded formamides were purified and characterized according to the literature and were submitted to dehydration protocols [1,3]. The resulting isonitriles were used in the Ugi-4CR model assays to observe the product formation.

The experiments were monitored by TLC, GC and LC-MS to ensure the consumption of reagents and product formation. The model reaction was submitted to one-pot protocols and the same approach was used for product monitoring. The depletion of reagents was thus observed and the presence of m/z 532 ($M+H^+$) and 554 ($M+Na^+$) evidenced the product formation with “*in situ*” isonitrile.



Further investigations are under conduction to confirm the complete set of results that will be presented during the conference.

[1] *Synthesis* **2015**, 47, 49. [2] *Molecules* **2019**, 24, 189. [3] *J. Org. Chem.* **2005**, 70, 2361. [4] *Tetrahedron Lett.* **2010**, 51, 2319. [5] *Tetrahedron Lett.* **2006**, 47, 4605.

Agradecimentos/Acknowledgments

FINEP, CAPES, CNPq and FAPESP

Área: **AMB**Nº de Inscrição: **01200**

Study of Biosorption Capacity of Banana Peels for Removal of Cationic Dye from Aqueous Medium using Monitoring by UV-Vis Spectroscopy

Carlos F. Silva (IC)¹, Lanna V. S. Rodrigues (IC)¹, Fabiana A. Marques (PQ)^{*1}

carsilva03@gmail.com, fabiana.marques@ifgoiano.edu.br

¹Departamento de Química, IF Goiano – Campus Ceres.

Keywords: Banana, Peels, Biosorbent, Adsorption, UV-Vis.

Highlights

Biosorption of dye using biomass of banana peel. Good results for adsorption of cationic dye. Removal percentage of methylene blue dye in aqueous solution greater than 65%.

Abstract

Adsorption stands out as one of the main methods for removal of dye in aqueous medium. It has some advantages such as low energy requirements, easy implementation and application and high efficiency. However, the high cost and difficulty of regeneration of synthetic adsorbents limits their application. In this context, the use of biomass replacing conventional adsorbents has been adopted. The banana peels are agricultural waste that does not have a commercial value which is commonly used in animal feed. The work developed has the purpose of evaluating the action of this material as a possible natural biosorbent. Thus, initially the adsorbent material was obtained by means of the drying and crushing of the banana peels, was used granulometry of 500 μm . The adsorbent was characterized by the Fourier transform (mid-FTIR) medium infrared spectroscopy technique and zero charge point. The zero charge point (pH_{PCZ}) was determined in order to know in which pH range the positive and negative charges are equal, allowing to know in which ranges of pH the adsorbent is efficient in the removal of cationic and anionic substances. The zero charge point assay 60 mg of the material were added to 20 mL of aqueous solutions with adjusted pH (1 to 12) using NaOH 0,1 mol. L⁻¹ and HCl 0,1 mol. L⁻¹. The pH_{PCZ} obtained in this experiment was 5,62, below this pH the surface charge of the biosorbent will be positive, while at pH above the surface charge will be negative, important parameter that will be controlled for the next biosorption experiments. Through the mid-FTIR spectrum it is possible to affirm that the material presents ionizable functional groups (carboxylic acids and alcohols, for example) that instigates studies for the sorption of ionic species of diverse environmental interests. The pH of the solutions used in the adsorption tests was around of pH 7, the dye used in the tests is cationic, so the adsorption of cations in these conditions was favored. For the adsorption assay, aqueous solutions of the methylene blue dye in the range of 2 mg.L⁻¹ to 10 mg.L⁻¹ were used to obtain the calibration curve, using the UV-Vis spectroscopy (663 nm). The adsorption assays for methylene blue dye were performed in duplicate with constant mass of adsorbent (60 mg) in contact with 30 mL of methylene blue aqueous solution at different concentrations (2, 6 and 8 mg.L⁻¹), after 14 hours of equilibration the removal percentage of adsorbent was verified. The solution was stirred and after was centrifuged at 4000 rpm for 15 min. The resulting supernatants were then analyzed by UV-VIS spectrometry at 663 nm¹ to determine the remaining concentration of the dye after adsorption. The adsorption capacity was 0.674, 1.688 and 2 for the concentrations of 2 mg.L⁻¹, 6 mg.L⁻¹ and 8 mg.L⁻¹, respectively. The maximum adsorption percentage was 67,4% for the concentration of 2mg.L⁻¹. The data obtained demonstrate that the banana peel is efficient in the removal of cationic compounds such as methylene blue at the concentrations used. Subsequently, tests with anionic dyes, as well as in solutions with controlled pH, with the purpose of evaluating the behavior of the adsorbent and its efficiency will be carried out, in order to finally test with herbicide Diuron®.

1. MILANI et al. Environ Sci Pollut Res Int., v. 25, p.35895-3590, 2018.

Acknowledgments

To PIBITI program and the Instituto Federal Goiano - Campus Ceres for the support.

Área: MAT

Nº de Inscrição: 01201

Deposition and Surface Modification of Metal Nanoparticles on Silica Substrate for Optical Devices Improvement.

Marcela Mohallem Oliveira (PQ)^{1*}, Renata Danielle Adati (PQ)¹, Amanda Figueiredo Pereira (PG)¹, Karinna Meinol (PG)¹, Carla Requena Klimpovuz (PG)² e Lediana Scalcon Pereira (IC)¹.

marcelam@utfpr.edu.br

¹Departamento Acadêmico de Química e Biologia - DAQBi, UTFPR; ²Departamento de Química – DQ, UFPR.

Palavras Chave: Gold Nanoparticles, Silver Nanoparticles, Mixed Metal Nanoparticles, Plasmon Absorption, Carbon Nanotubes, Optical Devices.

Highlights

Metal nanoparticles (gold, silver and platinum) were synthesized on silica substrate, as well as the surface modification (luminescent complex anchored on nanoparticles or carbon nanotubes) in order to improve characteristics of optical devices.

Resumo/Abstract

An optical device works with use or modification in its characteristics as their color, for example. Thus, a material that absorbs visible light can use solar energy for its operation. Nanomaterials, such as gold and silver nanoparticles (NPs), that are intensely colored, may be very interesting candidates for increasing the efficiency of the devices such as photovoltaics, which are those that transform sunlight into electric current, generating clean energy. Moreover, optical sensors may have their performance modified and improved with the use of metal nanoparticles and other nanomaterials with important applications, such as metal complexes and carbon nanotubes, for example.

In this work, we report metal nanoparticles (gold, silver, platinum and mixed metal NPs) synthesis, anchored on silica substrate, through two distinct routes (chemical and thermal routes). Both routes consisted in microscope slides oxidative treatment by using H₂SO₄/H₂O₂ 2:1 solution for 30 min; drying at 250°C for 24 h; functionalization with 3-(aminopropyl)triethoxysilane at 70°C for 3 h and immersion in an aqueous solution of a chosen metal salt for 3 h. The proposal was the NPs synthesis by a conventional route that used NaBH₄ aqueous solution as a reducing agent (chemical route) and a second route which, after being immersed in the metal salt solution, microscope slides were heat-treated at 250°C for 20 h (thermal route). After metal NPs obtaining, its surface could be modified with europium luminescent complex, [Eu(tta)₃(H₂O)₂], or with multiwall carbon nanotubes (Nanocyl), in order to improve optical characteristics of these nanocomposites.

All samples were characterized through UV-Vis spectroscopy, X-Ray Diffraction (XRD), Electron Microscopy (TEM and SEM) and Photoluminescence (PL) spectroscopy. UV-Vis spectra showed bands related to Au⁰ and Ag⁰ plasmon absorption, with different maximum for chemical and thermal routes samples, showing NPs obtained with different sizes in both cases. This maximum was also displaced with deposition of modifying agents (europium complex and carbon nanotubes), indicating the interaction between these species and metal NPs. X-Ray diffractograms were made with thin films accessory for all samples, and showed peaks related with metal nanoparticles. TEM and SEM studies demonstrated the presence of metal nanoparticles over silica substrate in all samples, as well the carbon nanotubes presence in the samples prepared with this nanomaterial. The f-f transitions displayed at PL spectra confirm the Eu-nanocomposite formation. Thus, the nanocomposites obtained on silica substrate with modification in optical properties were successfully achieved, producing materials with potential application in optical devices.

Agradecimentos/Acknowledgments

The authors would like to thank: CNPq, CAPES, Fundação Araucária, CME-UFPR, QGM-UFPR.

Valence tautomerism studies of cobalt complexes and dioxolene ligands

Samara M. N. da Silva (PG),¹ Monica M. de Souza (PG),¹ Luana Carol de Camargo (IC),¹ Karine Priscila Naidek (PQ)¹

samara.machado.n@gmail.com; karine.naidek@udesc.br

¹Departamento de Química, Universidade do Estado de Santa Catarina (UDESC).

Palavras Chave: Cobalt complexes, Dioxolene, Valence tautomerism.

Highlights

Valence tautomerism of cobalt complexes having dioxolene as ligands. UV-vis spectroscopic thermal studies of mononuclear cobalt (3+) complexes and dioxolene ligands. Difference in absorbance between cobalt complex containing 1,2-dihydroxybenzene (1) and tetrachlorocatechol (2) upon increase of temperature as external stimulus.

Abstract

Valence tautomerism (VT) is the intramolecular transfer of electrons between a metal complex with a redox-active organic ligand. It is possible to observe the reversibility of this phenomenon in cobalt complexes containing o-dioxolene ligands, and by the combination of other metal center and organic ligands. Induction of the transitions can be obtained through an external stimulus as heat, pressure and light. In cobalt-dioxolene complexes it is observed a spin transition accompanying the intramolecular transfer of electron. The energy of d orbitals from the first-row transition metals are close to the π - orbitals energy from o-dioxolenes, so the ligand can be coordinate with the metal as semiquinone (SQ) form or as its catecholates (cat) form. Upon an applied stimulus an electron is transferred from a catechol (diamagnetic) ligand to a low-spin (LS) cobalt (3+) center leading the formation of a high-spin (HS) cobalt (2+) ion and a SQ ligand (paramagnetic). Thus, we present the study of the valence tautomeric property of two cobalt (3+) complexes with ethylenediamine and catecholates ligands (1,2-dihydroxybenzene (1) and tetrachlorocatechol (2)) (Figure 1) using UV-spectroscopic thermal studies. The complex was fully characterized by single crystal X-ray diffraction, IR, UV-Vis and NMR ¹³C and ¹H. For complex (1) the observed changes in absorbance are more intense than that obtained for complex (2), and this is probably consequence of the presence of chlorine atoms in the dioxolane ligand (2).

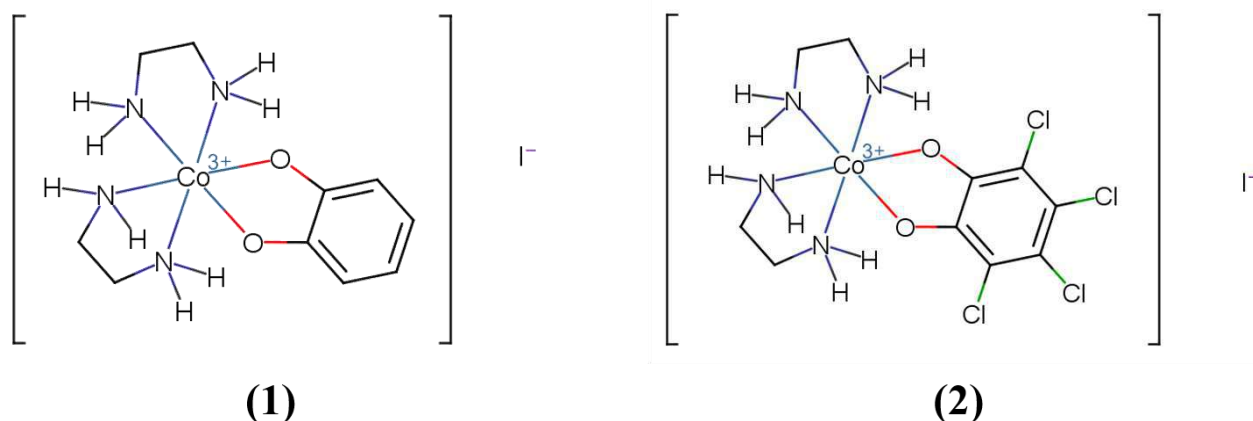


Figure 1: Representation of 1 and 2.

Acknowledgments

FAPESC, CNPq, CAPES, UDESC, UFPR

Functionalization of xanthenes and derivatives: synthesis and evaluation of biological properties

Samara Voltolini (PG),^{1*} Victória S. Fadel (IC),¹ Fernando R. Xavier (PQ),¹ Rogério A. Gariani (PQ),¹

voltolinisamara@gmail.com

¹ Laboratório de Síntese e Catálise (SinCa) - Departamento de Química, Centro de Ciências Tecnológicas, Universidade do Estado de Santa Catarina – UDESC

Palavras Chave: Xantenos, Líquido Iônico, DNA.

Highlights

Optimization of the synthesis of xanthenes and derivatives using ionic liquid. Study of intercalation of salmon sDNA with xanthene by molecular absorption spectroscopy (UVvis).

Resumo

Xantenos e seus derivados são heterocíclicos, constituídos por pelo menos dois ciclos, diretamente fundidos ao anel pirano (**6a-d**) e (**7a-b**). Resultando em uma conjugação de características estruturais quase planares [1]. Esses compostos orgânicos são conhecidos devido ao seu grande potencial em atividades biológicas e farmacêuticas [1]. Sendo uma delas as propriedade anticancerígena [2]. Devido a essa propriedade, descrevemos neste trabalho a otimização das condições metodologia para a obtenção desta classe de compostos, utilizando um Líquido Iônico de fácil preparo (Fig. 1). Posteriormente, a caracterização os compostos foram submetidos a avaliação do tipo de interação entre o xanteno e o sêmen de DNA de Salmão (ss-DNA) via espectroscopia de absorção molecular (UV-Vis) (Fig. 2).

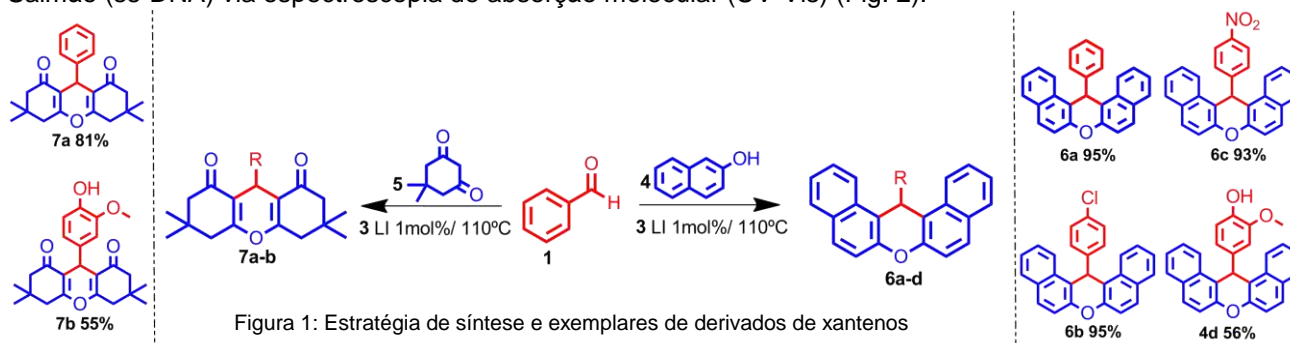


Figura 1: Estratégia de síntese e exemplares de derivados de xantenos

A reação modelo para otimização das condições reacionais esta apresentada na figura 1. Após variação de temperatura, e estequiometria do catalisador a melhor condição obtida para a síntese do 14-aril-14H dibenzo [a,j] xanteno (**6a**) foi: 1mol% do catalisador (Metilsulfonato de N-metilpirrolidônio(3)), temperatura de 110°C em 1h de reação (95% de rendimento). Seguindo esses parâmetros reacionais foram sintetizados diversos derivados de xantenos com bons rendimentos (56-95%). Vale destacar que o tempo reacional foi acompanhado via cromatografia em camada delgada (CCD). Após a caracterização via RMN de ¹H e ¹³C foi avaliado o tipo de interação via UV-Vis, em pH 7.0 (HEPES/ACN 50% v/v). Através de cálculos, foi possível a obtenção de valores de constante de ligação intrínseca (K_b) na ordem de 10³, o que indica uma magnitude satisfatória de interação entre o composto **6a** com o sêmen de DNA de Salmão.

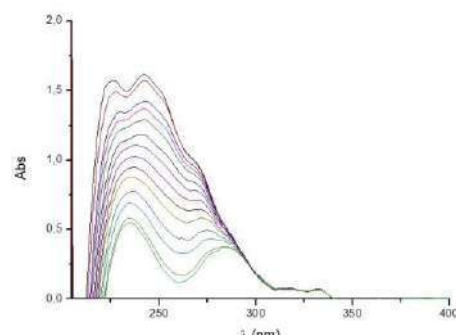


Figura 2: Espectro UV-vis de 6a Abs X λ(nm)

Agradecimentos/Acknowledgments

UDESC, CAPES, FINEP, CNPq, FAPESC e FITEJ

¹ Ilangovan, A. et al. Medicinal Chemistry Research. 2014, 24, 344-355 ; ² Khaligh, N. et al. Journal Of Molecular Liquids. 2019,278, 19-32; ³ Song, Y. et al. Chemical and Pharmaceutical Bulletin, 2013, 61,167-175.

Área: MED

(Inserir a sigla da seção científica para qual o resumo será submetido. Ex: ORG, BEA, CAT)

Nº de Inscrição: 01204

(Inserir o número de inscrição do autor que fez a submissão)

Design, synthesis and biological evaluation of β -lapachone and nor- β -lapachone complexes with 2-HP- β -CD as trypanocidal agents

Caroline D. Nicoletti (PG),^{1*} Raíssa M. dos S. Galvão (PG),^{2*} Fernanda P. Pauli (PG),³ Marcella de S. H. Queiroz (IC),² Ana Flávia M. Faria (IC),² Débora O. Futuro (PQ),¹ Robson X. Faria (PQ),² Vitor F. Ferreira (PQ)¹

caroline_nicoletti@yahoo.com.br; fernanda_pauli@hotmail.com

¹ Departamento de Tecnologia Farmacêutica, UFF; ² Fundação Oswaldo Cruz, Instituto Oswaldo Cruz; ³ Departamento de Química Orgânica, UFF.

Palavras Chave: β -lapachone, Nor- β -lapachone, Trypanocidal, *Trypanosoma cruzi*, Cyclodextrin.

Highlights

This work aims to synthesize complexes of inclusion of β -lapachone and nor- β -lapachone with 2-hydroxypropyl- β -cyclodextrin, for the improvement of aqueous solubility and enhancement of biological activity as trypanocidal agents.

Resumo/Abstract

Inclusion complexes were obtained employing solid-state method in a ball mill and were characterized by IV, DSC and DRX powder. All analyses demonstrated that there was complexation of naphthoquinone with cyclodextrin. The association of β LAP our N β L with 2-HP- β -CD were evaluated by the variation of chemical displacement of hydrogen ($\Delta\delta$) induced by the insertion of these in the inner cavity of the cyclodextrin (complexes IC β LAP and ICN β L).

The chemical shifts when comparing the ¹H NMR spectra of β LAP versus IC β LAP and N β L versus ICN β L show altered values. These results indicate that the inclusion of β LAP in the 2-HP- β -CD cavity occurs by the pyran ring as was shown previously. The same is observed for the N β L molecule, indication that the furan portion of N β L is in contact with the cyclodextrin torus.

The β LAP cyclodextrin complex (IC β LAP) augmented β LAP trypanocidal effect causing mortality higher than β LAP. The EC₅₀ value for IC β LAP was 0,711 μ M, a potency increased about 3 times when compared to β LAP. The analog nor- β -lapachone (N β L) reduced the trypanocidal action when compared with β LAP, after N β L concentrations incubation for 72 h against Y strains. However, the N β L inclusion complex (ICN β L) increased N β L activity with an EC₅₀ value of 0.979 μ M. Cyclodextrin complex induced a significant increase in the N β L activity reducing the EC₅₀ value in more than 6 times. The 2-HP β -CD, when tested alone, promoted an unspecific trypanocidal activity only in high concentrations, the EC₅₀ value after 72 h of exposition was 191.7 μ M.

The toxicity against mammalian cells was investigated using mice peritoneal macrophages treated for 72 h. IC β LAP showed noticeable toxicity reduction, the CC₅₀ value was of 109.6 μ M. There was a reduction of 5 times in the toxicity against mammalians cells when compared with β LAP.

N β L was more toxic than β LAP for peritoneal macrophages. The CC₅₀ value obtained for 72 h of treatment was 8.55 μ M. ICN β L reduced the toxicity observed for N β L with a CC₅₀ value of 94.77 μ M. Toxicity for 2-HP β -CD occurred only at the highest concentrations tested, the CC₅₀ value obtained was 202.9 μ M.

We conclude that inclusion complexes IC β LAP and ICN β L showed improvement in the aqueous solubility. In addition, there was a vectorization, transport of the drug to the target cells, from naphthoquinone when complexed on CD to epimastigotes forms of the *T. cruzi* Y strain.

Agradecimentos/Acknowledgments

CNPq, CAPES, FAPERJ and FIOCRUZ.

Cellulose extraction from green coconut fiber for potential application in biodegradable materials

Lucas C. Viana (IC)*,¹ Maria A. Witt (PQ).

lucas.cv20@gmail.com; maria.witt@pucpr.br

Escola de Educação e Humanidades PUCPR; Licenciatura em Química PUCPR

Palavras Chave: Reaproveitamento de Resíduos, Fibra de Coco Verde, Celulose, Materiais Biodegradáveis.

Highlights

A celulose é o polímero natural mais abundante possuindo amplo potencial para desenvolvimento de diferentes materiais graças à características como leveza e resistência. A utilização desse polissacarídeo tem se mostrado promissora como alternativa biodegradável e acessível de matéria prima. Pode ser extraída de diferentes fontes, entre estas a fibra de coco verde que é rica nesse biopolímero. Outro fator importante está associado ao fruto coco verde, prestigiado no Brasil, que é constantemente descartado como resíduo nas praias. Sua decomposição é prejudicial ao meio ambiente pois libera gases tóxicos e contamina o lençol freático. (ROSA, 2010) Nesse contexto, a extração de celulose a partir desse tipo de resíduo pode agregar valor ao fruto além de contribuir para questões ambientais.

Resumo/Abstract

O presente trabalho visa agregar valor ao resíduo do coco verde a partir da extração e caracterização da celulose da fibra desse fruto. Para tanto, foram retiradas primeiramente as impurezas lavando-se 70g da fibra do fruto com água quente (50°C, 30 min), sendo em seguida triturada por 5 min para aumentar a superfície de contato. Para a etapa seguinte, o material obtido foi tratado com uma solução HOAc/HCl (93% m/m; 0,3% m/m) concentrada a 99°C por 3 h. Ao final dessa reação a polpa foi branqueada com H₂O₂ (5% m/m) e NaOH (4% m/v) sob agitação e aquecimento (50°C) constantes por 90 min, seguido de KOH (6% m/v) a 90°C por 2 h resultando no produto celulose, todas etapas foram proporcionadas de 1:20 (m/v).

Observou-se que a etapa de lavagem inicial clareou a cor da fibra, pode-se observar que a polpação ácida tornou a fibra moída em uma polpa de coloração marrom escura, e que após a etapa básica tornou-se clara, apresentando aspecto físico mais rígido (Figura 1). Considerando cada uma das etapas realizadas, o rendimento final em massa de material foi de 25% (Tabela 1).

Vale ressaltar que para ambas etapas de tratamento químico o aspecto físico do material obtido está de acordo com Nascimento, 2014, reforçando a possibilidade da extração da celulose a partir desse tipo de resíduo. As etapas futuras do presente estudo incluem a aplicação da celulose obtida em matrizes poliméricas para o desenvolvimento de materiais biodegradáveis.

Figura 1. Aspecto visual (da esquerda para a direita) da fibra de coco a cada etapa dos tratamentos químicos



Fonte: O Autor, 2018

Tabela 1. Massa de material obtida a cada etapa do processo realizada

| Etapa | Massa (%) |
|-----------------|-----------|
| Inicial | 100 |
| Lavagem (50 °C) | 71,5 |
| Trat. Ácido | 33,0 |
| Trat. Básico | 14,0 |

Fonte: O Autor, 2019

Agradecimentos/Acknowledgments

Os autores agradecem o apoio da Fundação Araucária e à Pontifícia Universidade Católica do Paraná pelo apoio financeiro e institucional.

Área: ELE

Nº de Inscrição: 01208

Evaluation of green synthesized 1-benzyl-4-phenyl-1H-1,2,3-triazole as corrosion inhibitor for mild steel in acidic medium.

Caio M. Fernandes^{1*} (PG), Leonardo X. Alvarez² (PQ), Nazir E. dos Santos¹ (IC), Adriana C.M. Barrios¹ (PQ), Eduardo A. Ponzio¹ (PQ).

caiomf@id.uff.br

¹Grupo de Eletroquímica e Eletroanalítica, G2E, Instituto de Química, Universidade Federal Fluminense, Niterói, Rio de Janeiro, Brasil; ²Escuela de Química, Sede Central Rodrigo Facio, San Pedro de Montes de Oca, Universidad de Costa Rica, Costa Rica.

Palavras Chave: Corrosion inhibitor, Click reaction, 1,2,3-triazole, Electrochemical measurements, Mild steel, Acidic médium.

Highlights

Eco-friendly synthesis of a 1,2,3-triazole.

Non-toxic corrosion inhibitor with best efficiency of 81% at 2.13 mmol·L⁻¹.

Gravimetric analysis, electrochemical measurements and atomic force microscopy.

Resumo/Abstract

An environmental-friendly and facile synthetic procedure was used to prepare 1-benzyl-4-phenyl-1H-1,2,3-triazole (BPT) and its application as an organic corrosion inhibitor was evaluated by Weight Loss Method, Linear Polarization Resistance, Potentiodynamic Polarization and Electrochemical Impedance Spectroscopy. An average anticorrosive efficiency of 81.7 % was obtained with 2.13 mmol·L⁻¹ of BPT. The results points to a mixed-type inhibitor that acts by adsorbing on the metal surface. A new approach to classical electrochemical analyses confirms the protection mechanism. Thermodynamic adsorption and kinetic corrosion parameters were calculated and discussed, indicating a chemisorption process. Atomic Force Microscopy shows the formation of a protective film on the mild steel surface.

Table 1: Anticorrosive efficiency of BPT at various concentrations evaluated by different methods.

| Concentration (mmol·L ⁻¹) | WLM | EIE | LPR |
|--|---------------|---------------|---------------|
| | η (%) | η (%) | η (%) |
| 0.04 | 62.7 | 52.9 | 56.2 |
| 0.11 | 68.2 | 69.3 | 63.0 |
| 0.21 | 73.0 | 73.8 | 68.3 |
| 0.42 | 75.7 | 75.1 | 69.4 |
| 1.28 | 79.1 | 76.8 | 73.5 |
| 2.13 | 81.4 | 81.8 | 80.0 |

Agradecimentos/Acknowledgments

Leonardo X. Álvarez would like to thank the Vicerrectoría de Investigación of the Universidad de Costa Rica for the research grant assigned for the synthesis of BPT (PROYECTO 115-B2-A52) and the Oficina de Asuntos Internacionales y de Cooperación Externa for the allocation provided. Caio M. Fernandes thanks Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior (CAPES) for the scholarship received and Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado do Rio de Janeiro (FAPERJ, E-26/102.971/2012 and E-26/111.407/2013) for all the support.

Área: EDU

Nº de Inscrição: 334936

DEVELOPMENT OF SKILLS IN CHEMISTRY TEACHING BY SITUATION-PROBLEM

Camila Alexandra Rodrigues Luiqi (PG),² Maria Eunice Ribeiro Marcondes (PQ).^{1*}

carod.quimica@gmail.com; mermarcondes@gmail.com

¹Instituto de Química – USP; ^{1, 2}Programa de Pós-Graduação Interunidades em Ensino de Ciências IF, IQ, IB, FE USP

Palavras Chave: *Enem, Ensino de Química, Habilidades de pensamento, Competências, Situações-Problema*

Highlights

Developing Thinking Skill through problem-situation in chemistry teaching.

ENEM is a national exam took by pupils who finished secondary school to get university. The science part of ENEM is based on specific thinking skills. Several students have not developed the kind of skills needed to succeed in chemistry Enem exam. We investigate the difficulties in solving stoichiometry problems of a group of students. Based on these difficulties we planned and applied an instructional sequence based on problem situation related to chemistry (ZABALA, ARNAU, 2010). Each of these situations was related to an specific thinking skill of the Enem program. The results shown the students hold some conceptual difficulties in the beginning of the teaching sequence that had been gradually overcome as the teaching got on with. The instructional activities enabled the students to reach higher order thinking skills

Resumo/Abstract

O ENEM, constituído por questões problematizadoras, avalia o conhecimento dos alunos através do desenvolvimento de Competências e Habilidades. Conhecimentos e Competências podem ser construídos por meio de um ensino promovido por Situações-problema, uma vez que exige do estudante uma postura ativa mediante a resoluções de problemas (ZABALA e ARNAU, 2010). Em nosso trabalho de Mestrado verificamos como Situações-problema aplicadas no ensino de Química podem contribuir no desenvolvimento de Habilidades específicas exigidas pelo ENEM. A pesquisa foi aplicada em um Cursinho Popular Comunitário, no qual a demanda dos alunos consiste na preparação para o ENEM. Diante de dificuldades conceituais e cognitivas dos alunos referentes às “Relações Quantitativas dos materiais”, principalmente nas resoluções de questões que abordam raciocínios matemáticos e relações de proporções, organizamos e aplicamos uma sequência de atividades em quatro módulos. No presente trabalho apresentaremos os resultados e conclusões de atividades que priorizaram a mobilização de conhecimentos conceituais e cognitivos relacionados a “Conservação e Proporção dos Materiais”. Utilizamos como instrumento de análise das questões a Análise de Conteúdo (BARDIN, 1977). Classificamos as respostas dos alunos de acordo com os níveis cognitivos atingidos e as habilidades exigidas para resolução das questões (SUART e MARCONDES, 2008). Para a resolução dos problemas dos módulos 2 e 3 esperava-se a mobilização das habilidades 17, 24 e 25 (ENEM). Foram atingidos níveis de respostas N2 e N3 (raciocínios de ordem cognitiva mais baixa) em questões as quais foram mobilizadas as habilidades 17 e 24, e níveis N2, N3 e N4 (nível de habilidade cognitiva de ordem maior) ao expressarem as habilidades 17 e 25. As atividades problematizadoras propostas na sequência de ensino parecem ter contribuído para que os estudantes passassem a mobilizar habilidades de alta ordem cognitiva. Promover o desenvolvimento de Habilidades de pensamento torna-se uma demanda em relação ao ensino e ao currículo. A problematização do ensino evidentemente contribui com o desenvolvimento e aprimoramento de tais habilidades.

Zabala, Arnau, Porto Alegre: Artmed, 2010; Bardin, Lisboa: Editora 70, 1977; Suart, Marcondes, Revista Brasileira de Pesquisa em Educação em Ciências, v. 8, n. 2, 2008.

Agradecimentos/Acknowledgments

Agradeço a equipe de coordenadores do Cursinho Comunitário que possibilitou a realização a pesquisa e também agradeço aos alunos pela intensa participação.

Área: **EDU**

Nº de Inscrição: 27968

Infográficos e seus impactos na sala de aula

Rosana Petinatti da Cruz (FM)^{1*}, Roberto Barbosa de Castilho (PQ)¹, Maria Lucia T. G. Mendonça (FM)², Isabella Oliveira da Silva (IC)¹, Luiza Duarte Rodrigues da Costa (IC)¹, Thayssa Ramos Quintiliano Lima (IC)¹, Sarah Hessing Louzada (IC)¹, Layla Dorbação de Araújo (IC)¹, Juliana Petinatti Sarmento (IC)³.

rosanapetinatti@gmail.com; rosanapetinatti@gmail.com

¹UFRRJ- CTUR; ²IFRJ – Campus Maracanã; ³UERJ – Campus Maracanã

Palavras Chave: *Artigos Científicos, Motivação, Infográfico.*

Highlights

Fographics and their impacts in the classroom. The objective of the work was the use of infographics presented at the 41^o Annual Meeting Sociedade Brasileira Química.

Resumo/Abstract

O objetivo do trabalho foi a utilização de infográficos apresentados na 41^o Reunião Anual Sociedade Brasileira Química (41^o RASBQ) avaliando o impacto destes nos alunos. A metodologia foi de desenvolver trabalhos em grupos sobre os temas abordados, com alunos do Ensino Médio. Foram apresentados dez infográficos do congresso, os estudantes foram separados em grupos, pesquisaram sobre o conteúdo existente nos mesmos e a turma inteira participou do debate do tema em questão. Todo o trabalho teve o auxílio do professor e dos estagiários da graduação e participantes do PIBID. Concluiu-se que a utilização dos infográficos despertou, além do interesse por parte dos alunos na disciplina de Química, uma consciência crítica sobre os conteúdos relacionados.

Introdução

Os congressos são sempre muito importantes para promover o aperfeiçoamento dos docentes, seja através de apresentações de trabalhos, palestras e sessões coordenadas. Na 41^o RASBQ houve uma mostra de infográficos¹, muitas ideias surgem em um congresso e assim nasceu este trabalho, a ideia de trazer parte do congresso para a sala de aula de uma escola de Seropédica (RJ), que se situa a mais de 1400 Km do local da congresso, com o objetivo da utilização dos infográficos para ministrar conteúdos e conscientizar os alunos.

Metodologia

O trabalho foi realizado no Colégio Técnico da UFRRJ com alunos da primeira série do Ensino Médio, o professor apresentou os infográficos para os alunos e propôs que as informações fossem aprofundadas por eles. A turma foi dividida em grupos para pesquisarem sobre os conteúdos. Depois foram feitas apresentações e por último, a realização de debates com a participação da turma inteira.

Resultados e Discussão

As apresentações de cada grupo acrescentaram algo de relevante para a aprendizagem da disciplina de Química e do mundo que nos cerca. Por exemplo os infográficos sobre: pesticidas, vinculou o Aldicarb, a um veneno vendido ilegalmente nas feiras livres do RJ conhecido como 'chumbinho'; tempero, que o açafraão deriva de flores e são necessárias 150 mil flores para produzir 1Kg de açafraão seco, podendo impactar o meio ambiente; pão com manteiga, trouxe a discussão sobre gordura trans fazer mal a saúde e do cafezinho, mitos que o café vicia e que é um fator de risco para osteoporose. Essas informações pesquisadas pelos grupos e os debates impactaram os alunos, acarretando, além da aprendizagem, conscientização sobre o mundo.

Conclusão

Concluiu-se que o trabalho impactou os alunos por meio das pesquisas sobre as informações contidas nos infográficos, fomentando a aprendizagem e a conscientização de mundo.

¹Mateus, A. L.; Costa, P.C.C.; Soares, M.; Freitas, R. A química dos alimentos. In: RASBQ, 41., 2018, Foz do Iguaçu. Disponível em: http://www.s bq.org.br/39ra/anexos/PB-MAI16_banner01_quimica_alimentos.pdf. Acesso em: 20 dez 2018.

42ª Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química: Eixos Mobilizadores em Química

Área: ANA

Nº de Inscrição: 01211

Metabolomic Profile of Newborns Exposed to Zika Virus

Nilson Antonio Assunção¹ (PQ), Fabiana A. Marques² (PQ), Regina Vincenzi Oliveira (PQ)³, Uirá Souto Melo⁴ (PG) Luiz Carlos de Caires-Junior⁴, (PG); Ernesto Goulart⁴, (PG); Mayana Zatz⁴, (PQ); Cleber Nunes Barreto¹ (IC)¹, Danielle Zildeana Sousa Furtado¹ (PG), Luís André Zanlunqui (PG)¹

*e-mail: nilson.assuncao@unifesp.br; fabiana.marques@ifgoiano.edu.br

¹ Instituto De Ciências Ambientais, Químicas e Farmacêuticas, Universidade Federal de São Paulo, ²Instituto Federal Goiano, Campus Ceres, ³Departamento de Química, Universidade Federal de São Carlos ⁴Centro de Pesquisa sobre o Genoma Humano e Células-Tronco, Universidade de São Paulo.

Keywords: Zika vírus, metabolomics, chemometrics tools, bioanalytical.

Highlights

- We show how the exposure to Zika virus affects the metabolism of newborns.
- The pathways: serotonin degradation, noradrenaline, adrenaline degradation and histidine degradation were affected.

Abstract

The number of people infected by Zika Virus has reached logarithmic proportions as of 2007 around the world. It has its focus in tropical countries, however due to the form of contact that can occur through sexual intercourse and after months of exposure to it has attracted the attention of authority linked to public health. The main difference from other fevers and the like caused by viruses and mosquito vectors is the probability of around 10% of pregnant mothers who had exposure to the virus either by mosquito bites or sexual pathways with people infected with the virus, generating children with microcephaly¹.

Thus, 46 serum samples were collected from newborns, divided into groups (n = 17 and n = 29), newborns control (controls were also exposed to the virus but were not born with microcephaly) and newborns with microcephaly, respectively. The metabolites were extracted with acetone in the following ratio 1:4 % v/v, further analyzed by UPLCTOF-MS / MS in both ionization polarities (positive and negative). The data obtained were processed by compass DataAnalysis software and MZmine. The chemometric models were obtained through of the free software Metaboanalyst (<https://www.metaboanalyst.ca/>)² and the identification of features has been performed through the Mass Mediator (<http://ceumass.eps.uspceu.es/>).

The unsupervised (PCA) and supervised chemometric analyzes (PLS-DA) clearly showed the difference between the groups under study, suggesting alterations of the metabolites and consequently disturbances in some biochemical pathways. About 430 features with VIP more than 1.5 were identified in the positive mode and 260 on negative mode, belonging to the classes of amino acids, lipids, biogenic amines, sugars and others. The correlation of the metabolites with the pathways indicated possible alterations of the following biochemical routes: serotonin degradation, noradrenaline and adrenaline degradation and histidine degradation.

These data provided relevant information to the biochemical events in patients with microcephaly resulting from exposure to Zika virus, from which it may direct further research on the effects of this infection during the gestational period. Genetic and clinical correlations of these patients will be made in the next stage of the study.

1. Hayes, E. B. Zika virus outside Africa. *Emerg Infect Dis.* 2009, 15:1347-50.
2. XIA, J., WISHART, D. S., Using MetaboAnalyst 3.0 for Comprehensive Metabolomics Data Analysis. *Current Protocols in Bioinformatics*, 2016, 55:1-14.

Acknowledgments

FINEP; FAPESP e Instituto Federal Goiano Campus Ceres.

Resíduos Lignocelulósicos da Bananicultura: Uma Revisão Sobre os Processos Químicos de Extração da Celulose.

Nathan Roberto Lohn Pereira (PG),¹ Felipe Eduardo dos Anjos (PG),² Rachel Faverzani Magnago (PQ),¹ lohnnathan@gmail.com; rachel.magnago@unisul.br

¹Pós-Graduação em Ciências Ambientais, UNISUL; ²Pós-Graduação em Educação Ambiental, IFSC.

Palavras Chave: Resíduos Lignocelulósicos, Extração Celulose, Hidrólise.

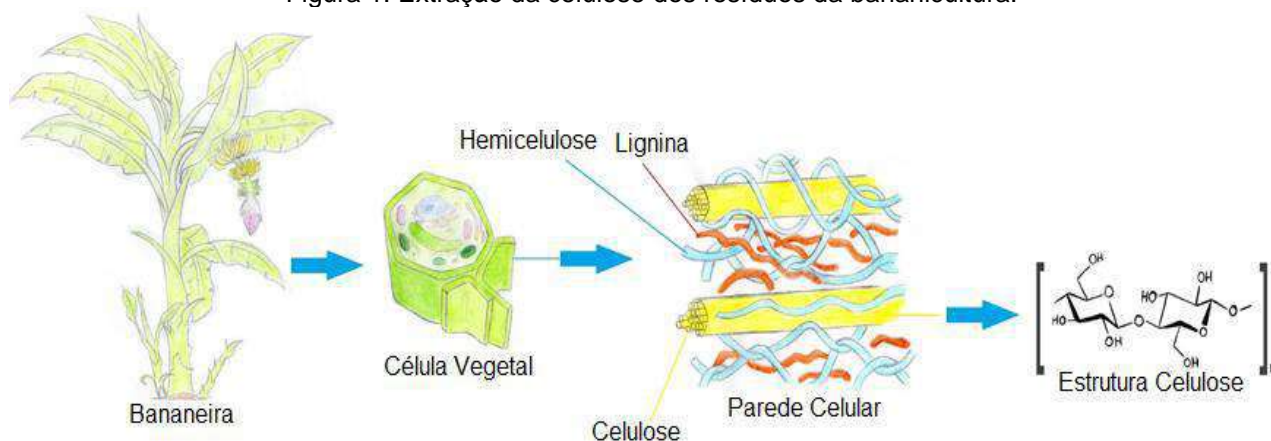
Highlights

Lignocellulosic residues of banana cultivation: a review of the cellulose extraction chemical processes. Banana cultivation is a generator of large amounts of lignocellulosic residues. The most used process for hemicellulose and lignin fragmentation is hydrolysis (alkaline, acidic and enzymatic).

Resumo

A bananicultura gera grande quantidade de resíduos orgânicos, pois aproveitam-se os frutos e descartam-se o pseudocaule e as folhas. A extração da celulose é uma alternativa para atribuir-se valor agregado a esses resíduos. Na **Figura 1**, o processo de extração da celulose envolve a remoção dos materiais amorfos (hemicelulose e lignina) dos compostos lignocelulósicos.

Figura 1: Extração da celulose dos resíduos da bananicultura.



Assim, esse estudo propôs identificar processos de extração da celulose, auxiliando nas pesquisas científicas que promovam a utilização da celulose destes resíduos. Para tanto, foi realizada uma pesquisa bibliométrica nas bases de dados *Science Direct* e *Springer* utilizando as palavras-chave “Cellulose”, “Banana” e “Residue”, empregando o operador “and”. Os critérios para seleção da bibliografia foram tipo de documento (artigos), período de publicação (2016-2018), leitura dos resumos e dos artigos resultantes. Na análise de 39 artigos identificou-se que o processo utilizado para a fragmentação dos componentes amorfos é a hidrólise (alcalina, ácida e enzimática), em condições controladas. O tratamento alcalino é o mais utilizado e mostra-se vantajoso em relação ao tratamento ácido por ocasionar a fragmentação efetiva tanto da lignina quanto da hemicelulose, oferecendo riscos menores de quebras das ligações das moléculas de celulose. A hidrólise enzimática destaca-se pela especificidade e por empregar a enzima xilanase para fragmentação da hemicelulose, em detrimento de reagentes químicos. Portanto, existem alternativas eficientes para extração da celulose dos materiais lignocelulósicos e assim agregar-se valor a esses resíduos da bananicultura.

Referência

Shimizu, F. L.; Monteiro, P. Q.; Ghiraldi, P. H. C.; Melatia, R. B.; Pagnocca, F. C.; Souza, W.; Sant’Anna, C. *Industrial Crops and Products*. 2018, 115, 62.

New curcumin coumarin derivative ligand and its Fe(II) and Zn(II) complexes: Synthesis, characterization and bactericidal evaluation against *E. coli*

Aniele de Moura (PG),^{1*} Rafael Vecchi (PG),² Luiz Carlos da Silva Filho (PQ),³ Flávio Junior Caires (PQ)^{1,3}

flavio.caires@unesp.br; aniele.moura@unesp.br

¹UNESP- São Paulo State University, Institute of Chemistry, Araraquara, SP, Brazil; ² UNESP- São Paulo State University, School of Medicine, Botucatu, SP, Brazil; ³ UNESP- São Paulo State University, School of Sciences, Chemistry Department, Bauru, SP, Brazil

Keywords: (curcumin, coumarin, thermal analysis, MIC).

Highlights

From the mechanochemical method, has been possible to synthesize a coumarin and curcumin derivate. Posteriorly Fe(II) and Zn(II) coordination compounds have been synthesized using an aqueous medium and by microwave irradiation respectively. The antimicrobial evaluation of the synthesized compounds against *E. Coli*, have shown that zinc complex exhibited the best activity

Abstract

Coumarins and curcuminoids belong to class of natural compounds that exhibit activity against a broad spectrum of gram-positive and gram-negative bacteria and fungicidal, anti-inflammatory, antioxidant and anti-tumor properties.¹ Nevertheless, both compounds exhibits low solubility in water, providing low absorption by the body.¹ This justifies the high amount of related research about the synthesis of their derivative, such as their coordination compounds, aiming to improve their properties.^{2,3} Based on these information this work aims to synthesize a new derivate of coumarin and curcumin by a one-pot reaction to be coordinated with Fe(II) and Zn(II), with the intention to evaluate the biological activity of the ligand before and after the coordination, against *E. Coli* strains. The ligand (L) was synthesized by ball milling the mixture reaction of curcumin (0.1 mmol), 4-formylbenzoic acid (0.1 mmol) and 4-hydroxycoumarin (0.1 mmol) at a rate of 30 Hz for 1 hour. Were obtained a yellow product and its structure were confirmed by ¹H and ¹³C NMR.) Iron (II) complex was obtained by the following procedure: a sodic ethanolic solution of L (0.2 mmol) was reacted with a FeSO₄ ethanolic solution (0.3 mmol) under an N₂ atmosphere. Was obtained a brown complex. For Zinc (II) complex, was mixed a sodic ethanolic solution of L (0.2 mmol) with ZnCl₂ ethanolic solution (0.3 mmol) and reacted for 60 seconds by microwave irradiation. The orange compound was obtained by rotative evaporation. Both compounds were washed with distilled water and ethanol to eliminate impurities. The TG-DTA analysis suggests the complexes minimal formulas [Fe₃L₂].4H₂O and [Zn₃L₂(OH)₂]₃.4H₂O. By FTIR analysis ($\Delta\nu$ COO⁻_{sym} – COO⁻_{asym}) is suggested that the metals are chelating with the carboxylate group. The synthesized compounds antimicrobial activity investigations were carried out using Broth Microdilution method against *E. Coli* (ATCC® 25922™). The results have provided the determination of minimum concentration to inhibit the growth of the bacteria (MIC). The promising results have shown that the zinc complex exhibited the best activity.

Figure 1: TG/DTG-DTA curves of L (a), Fe(II) complex (b) and Zn(II) complex (c)

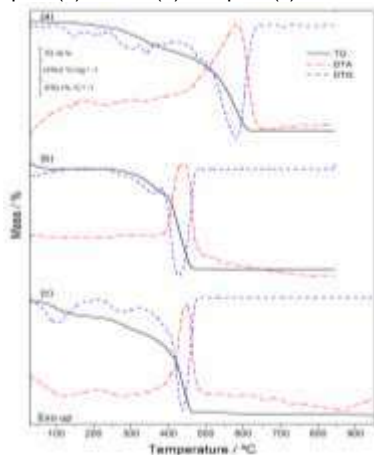


Figure 2: FTIR spectra of L (a), Sodic salt (b) Fe(II) complex (c) and Zn(II) complex (d)

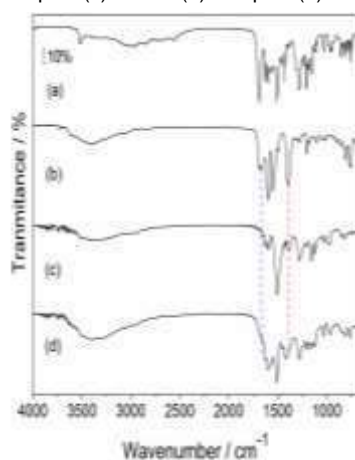
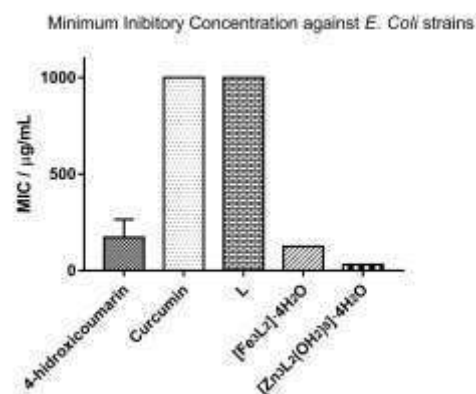


Figure 3: MIC of the compounds against *E. Coli* Strains



Acknowledgments

The authors thanks IQ/UNESP, CAPES (proc. 024/2012 Pro-equipment), FAPESP (proc. 2018/24378-6, 2018/12463-9; 2017/14936-9 and 2017/08820-8), and CNPq (proc. 421469/2016-1,) for financial support.

¹Michael, *Coordination Chemistry Reviews*, **307**, 32-41(2016);² F. A. Daniel, *Journal of Organometallic Chemistry*, **642**, 97-106 (2002);³W. Jiafeng, *Transition Metal Chemistry*, **39**, 553-558 (2014)

Potassium recovery in biologically treated vinhoto

Thiago N. Carvalho (IC)¹, Bernardo L. Patto (IC)¹, Yuri A. R. Lebron (IC)¹, Victor R. Moreira (IC)¹, Lucilaine V. S. Santos (PQ)^{1,2}

Thiagoneivacarvalho@gmail.com; lucilainevaleria@yahoo.com.br

¹Department of Chemical Engineering, Pontifical Catholic University of Minas Gerais, P.O. Box 1686, 30535-901 Belo Horizonte, MG, Brazil

²Department of Sanitary and Environmental Engineering, UFMG, 6627 Antônio Carlos Avenue, School of Engineering, room 4544 – Belo Horizonte – Brazil

Keywords: Potassium precipitation, vinhoto, k-struvite, double stage bioreactor.

Highlights

K-struvite (KMgPO₄) is known as a potential low release fertilizer. Exploratory routes were created by the authors aiming the recovery of potassium through precipitation in the vinhoto biologically treated. The methods reached an efficiency of about 95%.

Abstract

It is estimated that more than 40% of the Brazilian agriculture income is expended in fertilizers. It is known that potassium salts are some of the nutrients needed to upkeep the land productive. However, the Brazilian potassium production isn't enough to attend their own demand. Considering this, researches done at stillage, one of the main effluent of sugar cane, shows the presence of a large amount of potassium in its chemical composition. Knowing that Brazil is one of the biggest sugar cane producer, stillage has become an important source to be explored. Therefore, experiments changing the molar ratio were made to find out which would be the best proportion among the pairs of reagents chosen based on the studies of Xu et al (2011) and Castro (2014) as shown in Table 1. The best result was the 2.4 test made on vinhoto, after being treated by ultrafiltration and bioreactor, with a potassium removal of approximately 85%. To continue our studies and verify the influence of organic substances on the process of potassium precipitation, tests on all types of vinhoto were made in same conditions as the best result of Table 1. So, the collected data in table 2, show the advantage of carrying out the treatment before the process of mineral removal. Besides the contribution to the main objective of this research, it's treatment contributes to the reuse of a reject and decrease its desertification potential caused by the great quantity of organic and mineral substances.

| | Molar Ratio | | |
|-----|--------------|----------------------------|---|
| | [Mg]:[K]:[P] | MgCl·6H ₂ O (g) | Na ₃ PO ₄ ·12H ₂ O (g) |
| 2.1 | [2]:[1]:[2] | 6,252 | 11,695 |
| 2.2 | [2]:[1]:[4] | 6,252 | 23,39 |
| 2.3 | [2]:[1]:[6] | 6,252 | 35,085 |
| 2.4 | [4]:[1]:[4] | 12,505 | 23,39 |
| 2.5 | [6]:[1]:[6] | 18,757 | 35,085 |

Table 1: Fitted parameters by the authors

changing the molar ratio were made to find out which would be the best proportion among the pairs of reagents chosen based on the studies of Xu et al (2011) and Castro (2014) as shown in Table 1. The best result was the 2.4 test made on vinhoto, after being treated by ultrafiltration and bioreactor, with a potassium removal of approximately 85%. To continue our studies and verify the influence of organic substances on the process of potassium precipitation, tests on all types of vinhoto were made in same conditions as the best result of Table 1. So, the collected data in table 2, show the advantage of carrying out the treatment before the process of mineral removal. Besides the contribution to the main objective of this research, it's treatment contributes to the reuse of a reject and decrease its desertification potential caused by the great quantity of organic and mineral substances.

| Type | Time (min) | pH | Initial Concentration | Final Concentration | Remove (K) |
|-----------------|------------|------|-------------------------|-------------------------|------------|
| | | | Atomic Absorption(mg/L) | Atomic Absorption(mg/L) | |
| Brute | 30 | 12,5 | 1308 | 1263,5 | 3,44% |
| Ultrafiltration | 30 | 12,5 | 2871 | 1643 | 42,77% |
| Bioreactor | 30 | 12,5 | 1762 | 212,7 | 87,92% |
| Nanofiltration | 30 | 12,5 | 1485 | 73,7 | 95,05% |

Table 2: Precipitation percentage results

Acknowledgments

This research was funded by Coordination of Superior Level Staff Improvement (CAPES); National Council for Scientific and Technological Development (CNPq); Foundation for Research Support of the State of Minas Gerais (FAPEMIG); and the Pontifical Catholic University of Minas Gerais (PUC Minas).

References

- BENNETT, Aline Miriam. Potential for potassium recovery as K-struvite. 2015. Tese de Doutorado. University of British Columbia, Vancouver.
- CASTRO, Samuel Rodrigues. Precipitação de estruvita: Recuperação de nitrogênio e fósforo utilizando fontes alternativas de reagentes. 2014. 175 f. Tese (Doutorado).
- XU, Kangning et al. Simultaneous removal of phosphorus and potassium from synthetic urine through the precipitation of magnesium potassium phosphate hexahydrate. *Chemosphere*, 2011. v. 84, n. 2, p. 207-212.

RE³⁺ content influence on the structural and photoluminescent properties of Tm³⁺/Yb³⁺ co-doped Yttrium Tantalates

Hayra do P. Labaki (IC),¹ Fernanda H. Borges (PG),¹ Fábio J. Caixeta (PG),¹ and Rogéria R. Gonçalves (PQ)^{1*}

hayralabaki@usp.br; rrgoncalves@ffclrp.usp.br

¹Laboratório de Materiais Luminescentes Micro e Nanoestruturados –Mater Lumen, Departamento de Química, FFCLRP, Universidade de São Paulo, SP, Brazil

Palavras Chave: Yttrium tantalate, Rare Earths, Energy transfer, Upconversion, blue emitter.

Highlights

Tm³⁺/Yb³⁺-co-doped yttrium tantalates were synthesized by sol-gel method. Luminescent features were studied as function of the doping concentration. Intense blue and NIR emission were observed under 980 nm excitation.

Resumo/Abstract

The luminescent properties of rare earth (RE) doped materials have been increasingly exploited because of their several technological applications, such as optical fibers and amplifiers, solid-state lasers, solar cells, LEDs, optical markers for bioimaging and other optical devices. In this sense, yttrium tantalates have been studied as host for RE ions due to their several interesting features regarding optical applications, such as low phonon energy (820 cm⁻¹), chemical stability and transparency in the UV, visible, and near infrared (NIR) regions. In this work, we report the synthesis of Tm³⁺/Yb³⁺ co-doped yttrium tantalates prepared by the sol-gel route. The RE ions concentrations were 0.5Tm³⁺/xYb³⁺ (x=0.5, 1.0, 2.0) to study the influence of the Yb³⁺ concentration. The materials were prepared by using a controlled hydrolysis and condensation reactions of tantalum ethoxyde and Y(NO₃)₃ precursors in a basic ethanolic solution. The solids were isolated by centrifugation and annealed at 900°C and 1100°C. A nanostructured material was obtained and it showed the orthorhombic Y₃TaO₇ crystalline phase for the samples annealed at 900 °C, albeit they exhibited broad peaks, indicating a secondary crystalline phase formation. The samples annealed at 1100 °C presented the total transformation for the monoclinic M'-YTaO₄ crystalline phase. Ta-O and Y-O vibrational modes related to both structures, and the absence of OH and organic residual groups were detected. Different emission profiles were verified depending on the presence of Y₃TaO₇ and YTaO₄ crystalline structure. For the luminescence in the visible region, it is possible to see the emission of the TaO₄³⁻ groups in the blue region and Tm³⁺ ions transitions under excitation at the host absorption band. Under the same host excitation, only 980 nm emission, attributed to the Yb³⁺ ions, could be observed at the NIR region. Energy transfer between Tm³⁺ and Yb³⁺ ions was confirmed by the emission of both these ions under excitation at Tm³⁺ energy levels. All samples presented an intense naked eye blue emission under 980 nm excitation. Upconversion emission spectra confirmed the presence of bands at 475 nm (blue) and 790 nm (NIR), which are attributed to the ¹G₄ → ³H₆ and ³H₄ → ³H₆ + ¹G₄ → ³H₅ transitions of Tm³⁺ ions. The relative intensity of blue and NIR emission changes by increasing the Yb³⁺ ions concentration. All the luminescent properties make these Yttrium Tantalates potential candidates for both Photonic applications as blue emitters and Biophotonics as luminescent markers at NIR region.

Agradecimentos/Acknowledgments

The authors acknowledge FAPESP, CNPq and CAPES for supporting this work.

Área: CAT _____ Nº de Inscrição: 1217 _____

Renewable chemicals production through lignin hydrogenolysis

Victor R. Moreira (IC)¹, Yuri A.R. Lebron (IC)¹, Bernardo L. Patto (IC)¹, Thiago N. Carvalho (IC)¹, Lucilaine V.S. Santos (PQ)^{1,2}, Marcus Foston (PQ)³

victorrrznde.eng@gmail.com; lucilainevaleria@yahoo.com.br

¹Department of Chemical Engineering, Pontifical Catholic University of Minas Gerais, P.O. Box 1686, 30535-901 Belo Horizonte, MG.

²Department of Sanitary and Environmental Engineering, UFMG, 6627 Antônio Carlos Avenue, School of Engineering, room 4544 – Belo Horizonte – Brazil.

³Energy, Environmental & Chemical Engineering Department – Washington University in St. Louis (WUSTL)

Keywords: *Hydrogenolysis, Phenols, Renewable Chemicals, Biomass Conversion*

Highlights

Three types of catalysts and three types of lignins were tested. The hydrogenolysis process was shown to be promising in the conversion of lignin. The highest amount of dissolved lignin (80%) was achieved when Pt/C 5% was used to depolymerize Alkali lignin.

Abstract

Concerned with the limitation of fossil fuels reservoirs and the environment, alternative ways that could replace petroleum-based chemicals have been studied. It is estimated that 40 to 50 million tons of lignin is produced per year and it is either discarded as non-cellulosic waste or burned to produce energy [1]. The objective of this research was to investigate the hydrogenolysis process for different lignin types, namely Alkali, Yellow Poplar Org., and 21-Indulin AT over different catalysts: Pt/C 5%, Pt/C 3%, and Pt/C 1%. Batch experiments were carried out in a Parr Reactor (Series 4560) loaded with 17.5 mL of degassed water mixed with 0.075 g of catalyst and 1 g of lignin. The reactor was purged with N₂ (3x) and H₂ (1x) and then pressurized to 500 psi with H₂, finally heating to 200 °C, for 4 h. The amount of non-converted lignin was diluted with sodium hydroxide solution and determined using a UV-Vis spectrophotometer (Shimadzu UV-2700) at a wavelength of 280 nm.

After the definition of the best catalyst, this one was submitted to tests with different lignin types. All the experiments were performed in triplicate. Pt/C 5% presented the highest percentage of dissolution, while considering the same type of lignin in all tests (Yellow Poplar Org.). On the other hand, the Pt/C 1% catalyst showed no dissolution. It may further be noted that increasing the percentage of platinum supported on activated carbon significantly increases lignin dissolution. For this reason, the Pt/C 5% was chosen to evaluate the percentage of dissolution for different types of lignin. Among the types of lignin evaluated, Alkali showed a percentage of dissolution twice as high (80%) as those presented by the Yellow Poplar Org. (40%) and 21-Indulin AT (38%), respectively.

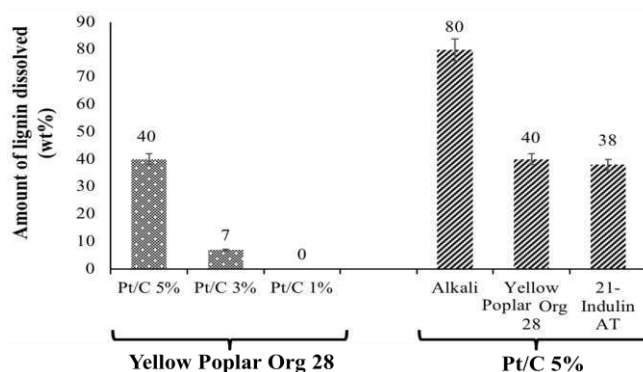


Figure 1: Amount of lignin dissolved for different types of catalysts and lignin.

Acknowledgments

This research was funded by Coordination of Superior Level Staff Improvement (CAPES); National Council for Scientific and Technological Development (CNPq); Foundation for Research Support of the State of Minas Gerais (FAPEMIG); Washington University in Saint Louis (WUSLT); and the Pontifical Catholic University of Minas Gerais (PUC Minas).

References

[1] WANG, Shurong et al. Lignocellulosic biomass pyrolysis mechanism: a state-of-the-art review. **Progress in Energy and Combustion Science**, v. 62, p. 33-86, 2017.

SiO₂-NH₂/β-cyclodextrin as a platform for protoporphyrin IX photosensitizer in the context of photodynamic therapy

Gleidson Igor Zanetti Figueiredo (PG),¹ Rodrigo José Correa (PQ), Emerson Schwingel Ribeiro (PQ), Luiz Fernando Brum Malta (PQ).

g.igorzanetti@hotmail.com; lfbmalta@iq.ufrj.br; emersonsr@iq.ufrj.br

¹ Instituto de Química, Universidade Federal do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, 21941-903 Rio de Janeiro, RJ, Brazil

Keywords: Photodynamic Therapy, Protoporphyrin IX, Beta Cyclodextrin, Supramolecular Chemistry.

Highlights

- An organic-inorganic hybrid silica-cyclodextrin-porphyrin based material was synthesized;
- The purpose of such material is application as a sensitizing carrier for photodynamic therapy;
- The material showed capacity to generate singlet oxygen.

Resumo/Abstract

A ternary system composed of protoporphyrin IX (H₂PP), β-cyclodextrin (CD) and silica was synthesized in order to work as a photosensitizer platform for photodynamic therapy¹. Silica gel was previously functionalized with 3-(2-aminoethylamino) propyltrimethoxysilane (AAPTMS) in order to have SiO₂-NH₂ material. Then the SiO₂-NH₂ surface was submitted to HCl fumes in order to constitute SiO₂-NH₃⁺Cl⁻ and via ion-ion interaction it bonded to hexa sulfated β-cyclodextrin sodium salt. Protoporphyrin was attached to this system using a supramolecular approach. One finding was that such interactions are superficial even though are strong enough to keep most porphyrin in the "linked" form. This is evidenced by the 1:2 H₂PP:CD apparent constant of $(25 \pm 7) \times 10^4$. Evidences on the immobilization of sulfated β-cyclodextrin were given by thermogravimetric analysis (TGA), scanning electron microscopy coupled to X-rays energy dispersive spectroscopy (SEM/EDS) and Fourier-transform infrared spectroscopy (FTIR). In particular electronic circular dichroism showed protoporphyrin IX presents helical chirality that changes orientation upon immobilization on silica-cyclodextrin material (Figure 1). The porphyrin content on this silica/ β-cyclodextrin carrier was estimated as 10% by UV-vis diffuse reflectance and it was shown by the phosphorescence spectrum that this material can generate singlet oxygen as efficiently as the protoporphyrin itself (Figure 2). Better biodisponibility in aqueous medium, protection against chemical and physical degradation and proper permeation through skin are common properties associated with cyclodextrins system that may be assigned to the reported ternary material.

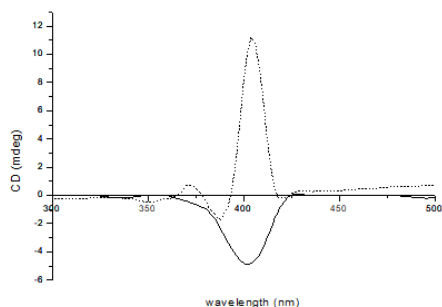


Figure 1: Circular dichroism spectra

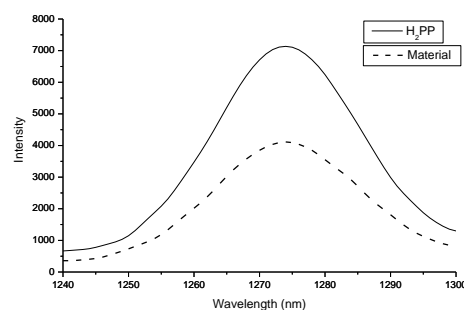


Figure 2: Emission spectra of singlet O₂

¹M. C. A. Issa, M. Manela-Azulay. Terapia fotodinâmica: revisão da literatura e documentação iconográfica. An. Bras. Dermatol. [online]. vol.85, n.4, pp.501-511, 2010

Agradecimentos/Acknowledgments

CAPES, CNPq, FAPERJ

42ª Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química: Eixos Mobilizadores em Química

Área: ANA

Nº de Inscrição: 01219

Metabolomic approach in the phytopathology of Asian soybean rust using techniques based on mass spectrometry, molecular networking and multivariate analysis

Evandro Silva (PG)¹, Luiza Mariano Leme (PG)¹, Carla Porto (PQ)², José Perez da Graça (PG)³, Allan Misael Flausino (TC)³, Claudia Vieira Godoy (PQ)³, Marcelo F. de Oliveira (PQ)³, Clara Beatriz Hoffmann Campo (PQ)³, Estela de Oliveira Nunes (PQ)³, Eduardo Jorge Pilau (PQ)^{1*}

evandroas20@gmail.com; epilau@gmail.com

¹LaBioMass, Chemistry Department, Universidade Estadual de Maringá, UEM, Maringá, PR, 87020-900, Brazil; ²Master in Science, Technology and Food Safety and Cesumar Institute of Science, Technology and Innovation – ICETI - UNICESUMAR, Maringá, PR, 87050-900, Brazil. ³Brazilian Corporation of Agricultural Research Corporation, Embrapa Soybean, Londrina, PR, 86001-970, Brazil.

Palavras Chave: Metabolites, Plant-pathogen interaction, GNPS, PCA.

Highlights

Metabolomics is providing new dimensions in the study of the search for differences between metabolic profiles at specific moments in relation to pathophysiological stresses or genetic modification.

Resumo/Abstract

Estimates indicate that by 2050, an increase in world agricultural production will be required, in this scenario, the production of grains such as soybeans, will be one of the preponderant factors. However, soybean cultivation may suffer severe losses in productivity and yield with the onset of diseases, such as Asian rust caused by the pathogenic fungus *Phakopsora pachyrhizi*. Asian rust is a devastating disease in soybeans, causing worries in the order of millions of dollars to the global economy. Despite being among the main diseases that present greater virulence, little is known about the metabolism of the plant invaded by the pathogen. In this study, we applied the non-targeted metabolomic approach using ultra-high performance liquid chromatography coupled to high-resolution mass spectrometry, the *Global Natural Products Social Molecular Networking* (GNPS) tool for identification of metabolites and Principal Component Analysis (PCA) to investigate possible biomarkers of the disease.

Through the approach, it was possible to differentiate the chemical profile of the control plants in comparison to the plants inoculated with *Phakopsora pachyrhizi*. For this, different extraction solvent systems were used, and an abundant diversity of chemical entities could be detected in the analyzes by UHPLC-ESI-MS/MS. Most of the metabolites identified belong to the synthetic pathways of intermediate and secondary plant defense metabolites, such as the isoflavonoids gliceollin and formononetin-7-O-glycoside, identified only in leaves inoculated with *Phakopsora pachyrhizi*. PCA analysis provided a separation of groups from the samples in control and inoculated plants. Ten metabolites were differentially expressed in inoculated soybean leaves, which were also responsible for the separation of the groups. Two are related to the biosynthesis of secondary metabolites of plants, due to the presence of external factors, which may be related to alteration of metabolism by the invasion of the pathogen. The others are antimicrobial compounds and act in defense response of the plant. With the results obtained in this work, it is suggested a new approach in the study and understanding of this phytopathology, as well as other diseases caused by pathogens in agricultural plants. In addition, the knowledge of the metabolites involved in the interaction, associated to plant defense, may aid in the research on the development of plant genes more resistant to *Phakopsora pachyrhizi*, as well as in the development of more effective and specific products against one of the worst soybean diseases.

Agradecimentos/Acknowledgments

EMBRAPA - Brazilian Agricultural Research Corporation.
CNPQ - National Council for Scientific and Technological Development.
FINEP- Federal Foundation for the Brazilian Research and Development.
CAPES - Coordination for the Improvement of Higher Education Personnel.
COMCAP-UEM - Complex of Research Support Centers of State University of Maringá.

Área: INO

Nº de Inscrição: 01220

Structural and fluorescence studies of zinc(II)-chromonate complexes

Vânia Denise Schwade (PQ),¹ Mariana Letícia Munin Camargo (IC),^{1*} Fábio Alencar dos Santos (PQ),¹ Lucas Pizzuti (PQ),¹ Bárbara Tirloni (PQ),² Ulrich Abram (PQ).³

vianaschwade@gmail.com; marianacamargo660@gmail.com

¹Faculdade de Ciências Exatas e Tecnologia, UFGD; ²Departamento de Química, UFSM; ³Institut für Chemie und Biochemie, FU-Berlin.

Keywords: Zinc(II), Chromone, X-ray diffraction, Supramolecular arrangement, Fluorescence.

Highlights

In DMF solution, complex $[Zn(HL)Cl_2]$ (**1**) leads to the formation of $[Zn(L)_2(OH_2)_2]$ (**2**). The emission-excitation maps for the complexes reveal a larger and intense contour region when compared with HL.

Abstract

The HL ligand, 2-(furan-2-yl)-3-hydroxi-4H-cromen-4-one, was prepared starting from 2-furaldehyde and 2'-hydroxiacetophenone in basic media. The obtained chalcone was isolated and then reacted with hydrogen peroxide in basic media (NaOH) under ultrasound radiation. The yellow product was characterized by IR and NMR spectroscopies, and by ESI mass spectrometry. For the complex synthesis, the ligand was reacted with zinc(II) chloride in methanol with addition of triethylamine. After 2 h, the resulting yellow solid was filtered, washed and air dried, yielding $[Zn(HL)Cl_2]$ (**1**) in approximately 71%.

The $\nu(OH)$ vibration in IR spectra appears at 3276 cm^{-1} in (**1**), which in the ligand appears at 3255 cm^{-1} . The band at 1584 cm^{-1} (1609 cm^{-1} in free HL) evidences the coordination through the carbonylic oxygen atom.

Compound (**1**) is soluble in dimethylformamide. Yellow crystals were observed and the crystal structure showed the formation of $[Zn(L)_2(OH_2)_2]$ (**2**). This suggests that in solution the complex reacts releasing HCl to the solution to form the octahedral complex (**2**). Two water molecules coordinate at the axial positions, and participate in hydrogen bonds with the oxygen atoms of the chromonate ligands in adjacent molecules. These intermolecular hydrogen bonds were reinforced by the π -stacking interactions between aromatic rings ($3.0477(9)\text{ \AA}$), as is shown in Figure 1a. The IR spectra presents a band at 3504 cm^{-1} attributed to the $\nu(OH)$ of the coordinated water molecules. The $\nu(C=O)$ vibration is observed at 1586 cm^{-1} .

In the fluorescence results, the ligand itself emits at 525 nm when excited at 380 nm. However, the emission-excitation map for (**1**) reveals a larger and intense contour region (Figure 1b) when compared with HL.

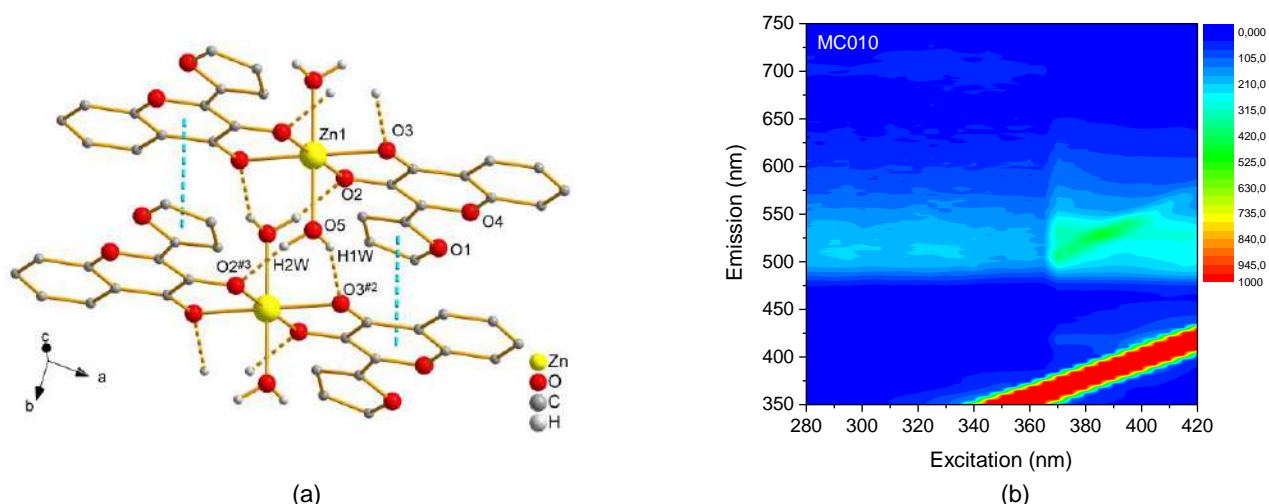


Figure 1: (a) Supramolecular arrangement in complex (**2**); (b) Emission-Excitation Map for complex (**1**) in the solid state.

It was verified that the product obtained by reaction changing the base by potassium methoxide solution probably will be complex (**2**) directly, since the emission-excitation map shows even higher intensity probably due to the two fluorescent chromonate anions coordinated to the Zn^{2+} (d^{10}) ion in a Chelation Enhancement Fluorescence effect (CHEF) or Chelation Enhancement Quenching Effect (CHEQ).

Acknowledgments

CNPq and UFGD.

Study of fibronectin adsorption on thin films of PEDOT-co-PDLLA supported by QCM-D's Au electrode.

Maria Júlia Pinto Gonçalves de Souza (IC), Rubens Araujo da Silva (PQ), Susana Inés Córdoba de Torresi (PQ)*

majupgs@usp.br; storresi@iq.usp.br

Departamento de Química Fundamental, USP

Palavras Chave: Electroactive polymer, conductive polymer, PEDOT-co-PDLLA, QCM-D, adsorption, fibronectin.

Highlights

Fibronectin adsorbs preferentially on copolymer and macromonomer than on Au. Applying potential, all adsorptions are favored. The protein adsorbs more rigidly in the copolymer at positive potential.

Resumo/Abstract

Research on what occurs at the interface between biomaterials and organic systems has gained relevance in the academic and technological community. This is due to the possibility of development of possible devices applied to cell regeneration. The quantitative study of fibronectin adsorption (FBN) on the PEDOT-co-PDLLA surface is extremely important for the assessment of its ability and characteristics for a possible use of the material for cell adhesion and development. The copolymer is deposited by spin-coating on the QCM-D Au electrodes, forming a thin and uniform film. The electrochemical characterization of the PEDOT-co-PDLLA (Figure 1a) shows a capacitive behavior, evidencing its conductivity when compared to the native Au of the electrode and the EDOT-PDLLA copolymer (experimental control). For this reason, fibronectin adsorption studies are performed on OCP (open circuit potential) and applied potentials of + 0.5 V and -0.125 V, respectively. The adsorption tests of FN in the Quartz Crystal Dissipation Microbalance (QCM-D) were performed in OCP for the construction of an adsorption isotherm (Figure 1b). It was observed that in OCP, FBN barely interacts with the Au surface compared to the surfaces of the copolymer and the macromonomer. In the assays with potential applied, the results show that there are more proteins adsorbed on the surfaces of PEDOT-co-PDLLA and Au, respectively.

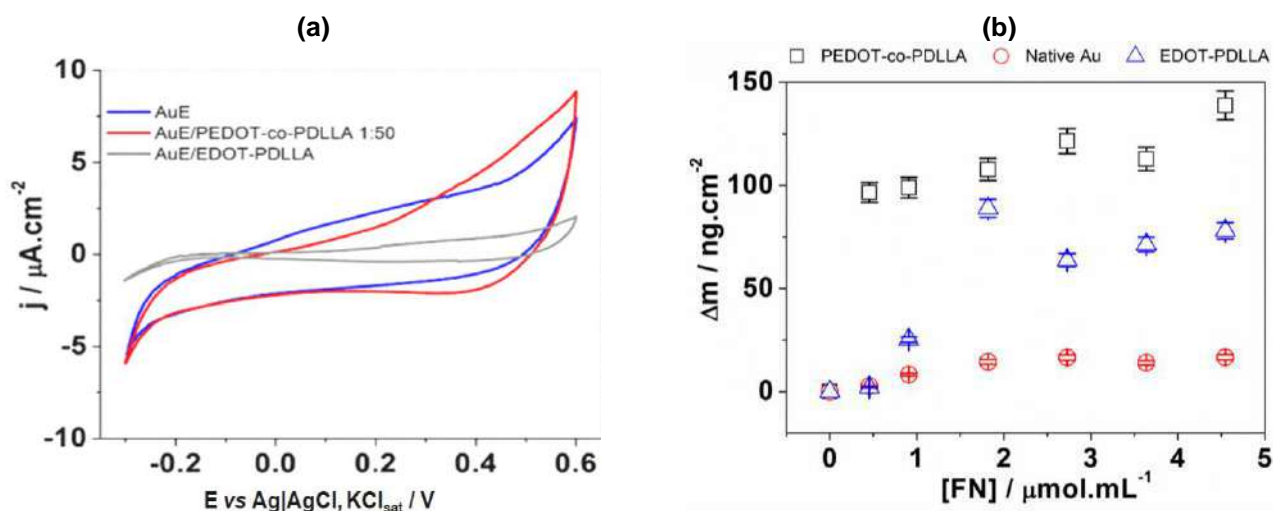


Figure 1: **a)** Cyclic voltammogram of gold electrode (blue line), macromonomer EDOT-PDLLA film (gray line) and PEDOT-co-PDLLA film (red line) in DPBS buffer pH. 7.40 at scan rate of 10 mVs⁻¹.

b) Adsorption isotherm of fibronectin onto AuE/PEDOT-co-PDLLA (black square), native Au (red circle) and EDOT-PDLLA (blue triangle) at $(24 \pm 1)^\circ\text{C}$, OCP (-0.17V) and pH 7.

Agradecimentos/Acknowledgments

CNPq; FAPESP #2015/ 26308-7 #2018/07709-9

Área: ELE

Nº de Inscrição: 01222

Influence of matrix of nanostructured Au electrocatalyst for SO₂ oxidation reaction

Norberto Alves da Silva Júnior (IC)¹, André Henrique Baraldi Dourado (PG)¹, Tomaz Neves Garcia (PG)¹, Liane Marcia Rossi(PQ)¹, Susana Inés de Córdoba de Torresi (PQ)^{1*}.

norbertojunior@usp.br; storresi@iq.usp.br

¹Departamento de Química Fundamental, IQ-USP

Key-words: Sulfur Dioxide, Nanostructure effect, Electrocatalyst Non-linear dynamics, Matrix effect.

Highlights

The oscillatory behavior observed on nanostructured nanocatalysts are different from the observed on the bulk ones.

The matrix plays an important role in control.

Abstract

The actual world energy demand and the recent environmental protection policies resulted in a growing search for sustainable energy sources, like solar and wind. However, these sources generate energy that needs to be storage and chemical fuels, like H₂ are of high interest. The actual electrochemical methodology for the H₂ generation demands high potential difference, 2.0 V, via water electrolysis. A possible solution would be the SO₂ oxidation reaction (SO₂OR), a process that generates H₂SO₄, widely used in industry and as byproduct H₂. The most used catalyst for SO₂OR is Pt, however, previous works from our group point to Au as being more active and this increase in activity is due to non-linear behavior. In the present work, the investigation of the influence of Au nanostructuring and the use of different matrix was performed.

The nanoparticles were supported on TiO₂ and SiO₂, an acid and a neutral matrix. The size of the Au particles was kept the same. The material was supported on glassy carbon electrodes and first, tested by triangular potential perturbation. These measurements showed that the activity was increased, in both cases, comparing to the Au bulk. However, the bistability region presented a profile very different than the observed on bulk, suggesting a pathway controlled by the nano-structuring. The different matrix used also presented differences in the non-linear behavior.

Acknowledgments

FAPESP #2015/ 26308-7 #2018/07709-9

A calorimetric study on the formation of inclusion complexes between Brij surfactants and β -cyclodextrin

Isabela A. Marques (PG),¹ Álvaro J. P. Agudelo (PG),¹ Yara L. Coelho (PG),¹ Pedro S. Moreau (IC),¹ Ana C. S. Pires (PQ),¹ Luis H. M. da Silva (PQ).^{1*}

marques.isabela100@gmail.com; luhen@ufv.br

¹Grupo de Química Verde Coloidal e Macromolecular, Departamento de Química, UFFV.

Palavras Chave: Surfactant, Brij, Cyclodextrin, Inclusion, Complex, Calorimetry.

Highlights

β -cyclodextrin interacts with the hydrophobic and hydrophilic parts of Brij. The increase of the surfactants' hydrophobicity and the presence of ionic liquid induce the aggregation of the complexes.

Resumo/Abstract

The formation of inclusion complexes between cyclodextrin and surfactants has been widely studied for representing a strategic system to investigate molecular recognition and self-assembly phenomena. Hence, the present work focused on the thermodynamic of formation of inclusion complexes based on β -cyclodextrin (β CD) and the nonionic Brij surfactants, which have been poorly investigated. The Brij surfactants consist of an aliphatic chain, with different number of carbon atoms (C) and a poly(ethylene oxide) (PEO) block, and the used here were Brij 56 (C16, 10 EO), Brij 58 (C16, 20 EO) and Brij 78 (C18, 20 EO). In addition, the effect of the ionic liquid (IL) 1-butyl-3-methylimidazolium chloride (C_4mimCl) on the process of complexation was studied. For this, the isothermal titration calorimetry technique was used in order to obtain the thermograms related to the interaction and dilution experiments (Fig. 1), and after adjusting the data to a model of independent and identical binding sites, the thermodynamic parameters were determined (Fig.2).

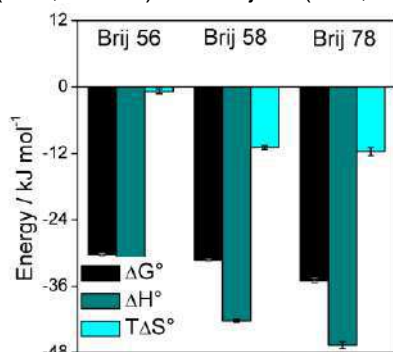


Fig. 2. Thermodynamic parameters for the formation of inclusion complexes between Brij surfactants and β CD

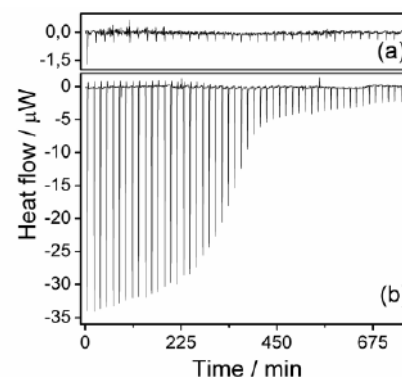


Fig. 1. Calorimetric raw data obtained from the titration of a Brij 56 solution in (a) water and in (b) a β CD solution.

the stoichiometry for both complexes was similar ($\sim 7-8 \beta$ CD : 1 Brij), showing that β CD is threaded in both hydrophobic and hydrophilic moieties of the surfactant. However, ΔH° and $T\Delta S^\circ$ were very different for the complexes, due mainly to conformational changes suffered by the surfactant, which are more intense for Brij 58. For Brij 78, which has only two more carbon atoms than Brij 58, the results showed that $\sim 21 \beta$ CD are interacting with the surfactant. Since the Brij 78 main chain does not accommodate this number of β CD, it was suggested that the inclusion complexes are forming aggregates (Fig. 3), and the stoichiometry value obtained indicates the overall number of β CD present in these aggregates. Finally, the results obtained in the presence of C_4mimCl , indicated that the IL induced the formation of aggregates, since the number of β CD interacting with the surfactants increased with C_4mimCl concentration (for Brij 78, in 500 mM of the IL, the number of β CD was ~ 66). This work showed that besides the inclusion process, the aggregation of the complexes occurs and is pronounced in the presence of C_4mimCl .

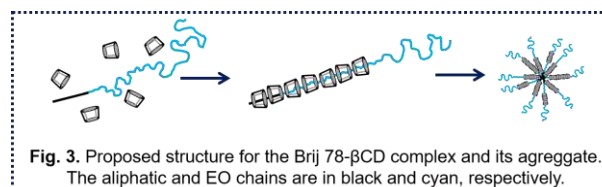


Fig. 3. Proposed structure for the Brij 78- β CD complex and its aggregate. The aliphatic and EO chains are in black and cyan, respectively.

Agradecimentos/Acknowledgments

CNPq, CAPES, FAPEMIG.

Synthesis, structural characterization and energy transfer mechanism in highly photoluminescent hydrocinnamates of Eu(III), Gd(III) and Tb(III) containing the bathophenanthroline ancillary ligand.

Carla Raiana Feitosa (PG),¹ Marcos Vinícius Colaço (PQ),² Lippy Faria Marques (PQ).^{1*}

carlaraiana17@hotmail.com; *lippymarquesuerj@gmail.com; *lippy.marques@uerj.br

¹Instituto de Química, Universidade do Estado do Rio de Janeiro, UERJ, Rio de Janeiro, RJ-20.550-900, Brasil;

²Instituto de Física, Universidade do Estado do Rio de Janeiro, UERJ, Rio de Janeiro, RJ-20.550-900, Brasil.

Palavras Chave: (Lanthanides, Photoluminescence, Complexes, Carboxylates).

Highlights

Three hydrocinnamates were synthesized. The infrared spectra confirm the coordination of the ligands. The photophysical studies shows that luminescence is due the a ligand sensitized process.

Resumo/Abstract

Ever since Weisman described a highly photoluminescent Eu(III) complex in 1942¹, the interest in lanthanide coordination compounds has increased, mainly due to its numerous applications, ranging from displays to biological assays². In particular, carboxylates are most largely investigated kinds of coordination compounds due the its luminescent and high thermal stabilities. Other ligand class very important are the ancillary ligands, as the bathophenanthroline (*bath*), that prevent the water molecules coordination, increasing the fluorescence intensities of this complexes. The synthesis of the compounds was carry out by reaction between the hydrocinnamic acid (deprotonated with NaOH), *bath* and the corresponding lanthanide chlorides (Eu, Gd and Tb), in aqueous/ethanolic medium and the room temperature. The powder X-ray diffraction results indicates the formation of three isostructural compounds $[Ln_2(hcin)_6(bath)_2]$, and which is typical for this complex class (Figure 1). The FTIR spectra presents strong bands in the 1600–1390 cm^{-1} region, which are attributed to symmetrical and asymmetrical stretching modes of COO^- group. The coordination of *bath* ligand can be suggested by the appear of the C=N stretching band, in 1618 cm^{-1} . The analysis of TG curves shows a thermal stability close to 170°C, suggesting the absence of solvent molecules in their structures.

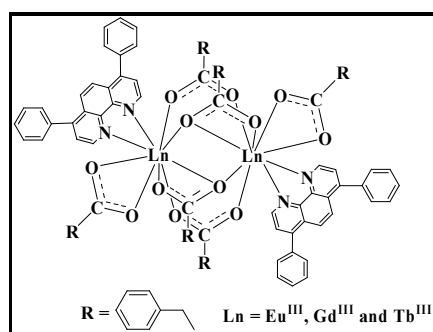


Figure 1. General formula of hydrocinnamate complexes.

The photophysical properties of compounds were studied, and from the Gd(III) complex, was obtained the lowest ligand triplet states, proving that intense emission in Eu(III) and Tb(III) complexes is proposed to be a ligand sensitized process. The emission profiles were typical of the Eu(III) and Tb(III) based luminescence: with the characteristics $^5D_0 \rightarrow ^7F_J$ ($J = 0-4$) and $^5D_4 \rightarrow ^7F_J$ ($J = 6-2$) transitions, respectively.

[1] S.I. Weissman, *J. Chem Phys.* 10 (1942) p.214.

[2] J-C. G. Bunzli, *et al*, *Chem. Sci.* 4 (2013) p. 1939.

Agradecimentos/Acknowledgments

UERJ, CNPq.

Avaliação da descoloração e degradação do corante reativo azul 160 por oxidação com H₂O₂/NaOH e H₂O₂/UV.

Nadine Raquel Farias (IC), Mateus Mittersteiner (PG), Paulo Cesar de Jesus (PQ).^{1*} pcj@furb.br

¹Departamento de Química, Universidade Regional de Blumenau, FURB, Blumenau, SC;

Palavras Chave: Reativo azul 160, Descoloração, Degradação, Peróxido de hidrogênio, Oxidação, Cinética.

Highlights

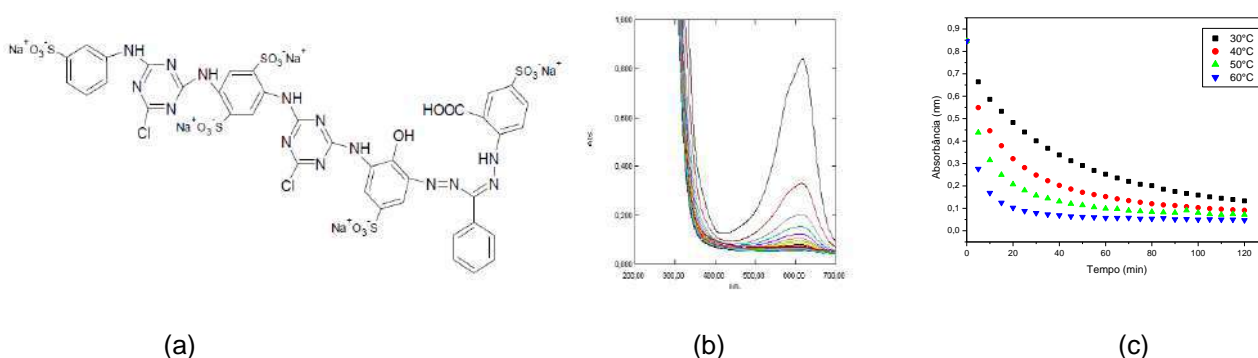
Evaluation of the decolorization and degradation of the reactive blue 160 dye by oxidation with H₂O₂/NaOH and H₂O₂/UV.

Kinetic of decolorization of reactive blue 160 dye was evaluated. The highest decolorization efficiency was 90%, 120 min, 50°C, with H₂O₂ 30%/NaOH 1 mol.L⁻¹/UV, where kinetics behavior was first-order.

Resumo/Abstract

O corante reativo azul 160, empregado em processos de tingimento industrial, como muitos corantes são de difícil degradabilidade sendo considerados xenobióticos.¹ Neste trabalho foram avaliados os aspectos cinéticos da descoloração e degradação do corante reativo azul 160 (**Figura 1a**) através da oxidação química pelo uso de peróxido de hidrogênio com hidróxido de sódio (H₂O₂/NaOH) e luz ultravioleta (H₂O₂/UV). Foram avaliados a influência da quantidade de H₂O₂ 30% (1 mL, 2 mL e 3 mL) e temperatura (30°C, 40°C, 50°C, 60°C). Para os experimentos com H₂O₂/NaOH foi adicionado em um reator encamisado conectado a um banho termostatizado, 1 mL de NaOH (1,0 mol.L⁻¹) e 15 mL de solução corante (0,1 g.L⁻¹). Alíquotas foram retiradas em tempos pré-determinados, realizando-se a leitura de absorvância em 595 nm (λ_{\max} do corante). Oss experimentos com H₂O₂/UV foram realizados numa caixa escura, onde foi acoplada uma lâmpada de mercúrio (Hg) da marca Philips®, modelo F8 T5, de 8 Watts, com comprimento de onda (λ) de 365 nm (UVA) e intensidade de 226 lm.m². Observou-se que as curvas cinéticas obedeceram ao modelo cinético de primeira ordem com k_{obs} variando de 4,4x10⁻²min⁻¹, 30°C a 7,2x10⁻²min⁻¹, 50 °C para H₂O₂/NaOH. Quando da adição de 1 mL de H₂O₂ 30% nos diferentes sistemas, as seguintes eficiências foram observadas em 30°C e 50°C: H₂O₂ (11% e 73%), H₂O₂/NaOH (62% e 89%), H₂O₂/UV (32% e 79%) e H₂O₂/NaOH/UV (66% e 90%) respectivamente. Em todos os estudos ocorreu a descoloração e possível degradação da solução de corante (**Figuras 1b e 1c**).

Figura 1 - (a) Estrutura do corante reativo azul 160; **(b)** Decaimento da absorvância da solução do corante reativo azul 160 durante processo oxidativo via H₂O₂/NaOH/UV a 50°C **(c)** Descoloração de soluções do reativo azul 160 nas diferentes temperaturas: (■) 30°C, (●) 40°C, (▲) 50°C, (▼) 60°C; 15 mL de corante 0,1g.L⁻¹, 2 mL de H₂O₂ 30%; 1,0 mL NaOH 1,0 mol.L⁻¹).



¹Moissa, L.; Mittersteiner, M.; Saugo, R.; Floriani, T. C.; Jesus, P.C. *J. Mol. Liq.* 264, 675-682, 2018.

Agradecimentos/Acknowledgments

PPGQ e DQ-FURB, INCT Catálise

Área: ORG

Nº de Inscrição: 01227

Enantiomeric NMR discrimination of carboxylic acids using a 5'-selenoxylofuranoside as a chiral derivatizing agent and chiral solvating agent

Nadine Inácio (PG),^{1*} Fernando R. Xavier (PQ),¹ Samuel R. Mendes (PQ),¹ Rogério A. Gariani (PQ).¹

nadinacio@gmail.com

¹ Laboratório de Síntese e Catálise (SinCa) - Departamento de Química, Centro de Ciências Tecnológicas, Universidade do Estado de Santa Catarina – UDESC.

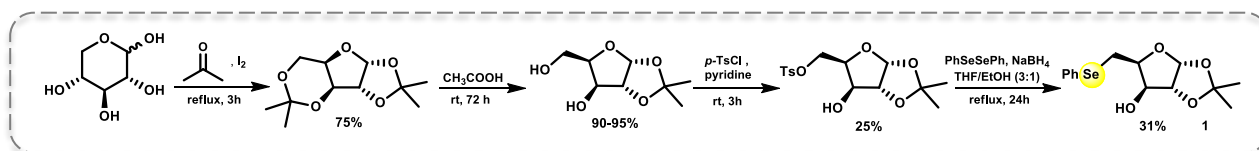
Keywords: Enantiomeric discrimination, ⁷⁷Se NMR, CDA, CSA, Carboxylic acids, Selenocarbohydrate.

Highlights

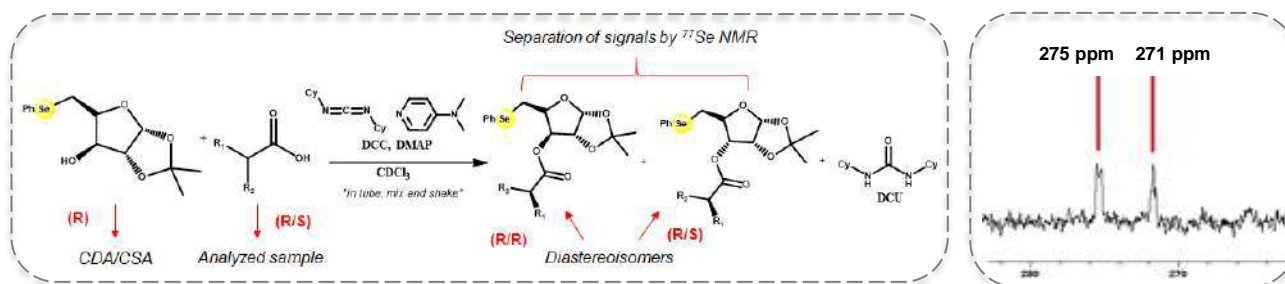
Synthesis of 5'-selenoxylofuranoside by traditional methods^[1], with some modifications for optimization; Study of enantiomeric NMR discrimination of carboxylic acids using a chiral derivatizing agent (CDA) and chiral solvating agent (CSA) by ⁷⁷Se NMR.

Abstract

The pharmaceutical industry seeks, through technological innovation, means to minimize the application of enantiomerically impure drugs, since in most cases the biochemical activity of a given molecule is restricted to only one of the enantiomers. Although the chiral column gas chromatography technique is used in many situations, in some cases it is limited. Thus, the development of a technique that uses a faster and more efficient analysis has attracted researchers attention, such as Nuclear Magnetic Resonance (NMR). Since the enantiomers have similar physical properties, there is a need to convert them into diastereomers so that NMR analysis is possible. This transformation can be performed by CDA or CSA. In view of the knowledge about the chirality of the molecules, together with the properties of selenium, the present work aims to synthesize (**Scheme 1**), characterize via ⁷⁷Se NMR the 5'-selenoxylofuranoside **1**, in addition to using it as a probe in the NMR for determination of enantiomeric excess of the carboxylic acids (**Scheme 2**).



Scheme 1: Synthesis of 5'-selenoxylofuranoside **1**.



Scheme 2: The derivatization procedure directly in NMR tube.

Figure 1: Derivatization of Ibuprofeno by ⁷⁷Se NMR with $\Delta\delta_{Se}$: 4 ppm.

Synthesis of 5'-selenoxylofuranoside occurred in reasonable yields and the compound was suitably characterized. Through the results obtained by ⁷⁷Se NMR, it can be observed that derivatization occurs (**Figure 1**) and solvation requires a study of conditions such as temperature, equivalence and solvent.

Acknowledgments

UDESC, FINEP, FAPESC, CAPES, CNPq and FITEJ.

[1] BRAGA, H. C. et al. Synthesis of 5'-selenoxylofuranosides. *Tetrahedron*, v. 66, n. 19, p. 3441–3446, 2010.

Advanced Oxidation Processes (AOP) for treatment of tannery wastewater employing hydrogen peroxide 70%

Elisson A. Souza (PG)^{1*}, Luciana A. Silva (PQ)^{1,2}. elissons@ufba.br

¹Instituto de Química; ²INCT de Energia e Ambiente, Universidade Federal da Bahia, Campus de Ondina, CEP 40170-290, Salvador-BA.

Keywords: Tannery sludge, 70% hydrogen peroxide, UV radiation, Fenton's reaction, Foto-Fenton, Sono-Fenton.

Highlights

- Treatment of tannery wastewater by processes UV/H₂O₂, Fenton, photo-Fenton and sono-Fenton.
- Sono-Fenton process promotes 96% mineralization of absorbent species.

Abstract

The productive process of tanned leather consumes a large amount of water and, consequently, also generates a large amount of liquid effluents and solid waste. As an alternative treatment, in recent work [1,2], we have treated tannery wastewater in a bifunctional photocatalytic system for hydrogen generation with simultaneous degradation of pollutants. However, in spite a production of 1.2 mmol of hydrogen after 24 hours irradiation, the system proved to be ineffective to degrade all pollutants. In this way, the present work aims to propose the treatment of the tannery residue after energy recovery with hydrogen generation, using Advanced Oxidation Processes (AOP), such as: UV/H₂O₂, Fenton, photo-Fenton and sono-Fenton, using 70% hydrogen peroxide [3]. As optimization strategy, chemometric techniques were applied to evaluate the reaction factors: concentration of H₂O₂, Fe(II), pH, temperature and reaction time. The response employed for evaluation was the absorbance at 375 nm, which is the maximum wavelength for the wastewater. Thus, the optimum conditions were 15 min of reaction, Fe(II)/H₂O₂ ratio of 0.005, pH 3 and 50 °C. Under these conditions a mineralization of about 96% of absorbent species takes place by the sono-Fenton process (Figure 1). This result is approximately 6.5 times higher when compared to the use of UV/H₂O₂ with 1 mL of HNO₃ at 50 °C and 2 hours of reaction.

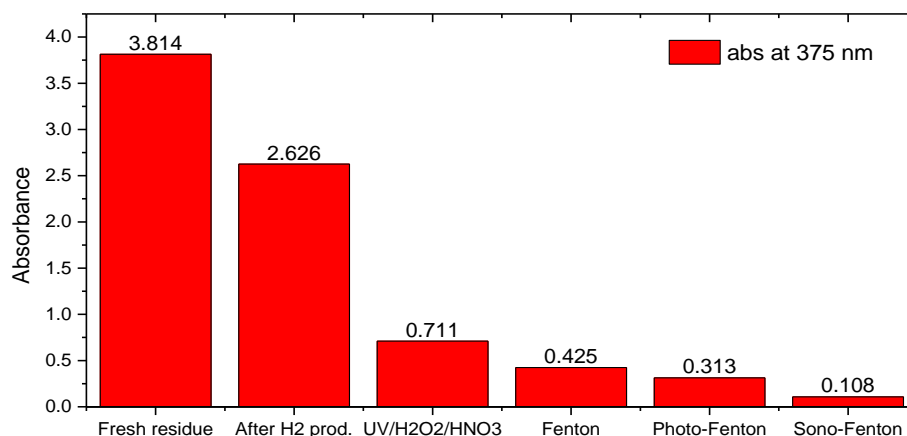


Figure 1: Absorbance data at the maximum absorption wavelength of the tannery wastewater (375 nm) for the different Advanced Oxidation Processes (AOP) under optimum conditions.

[1] SOUZA, E. A.; ARAUJO, R. J.; SILVA, L. A.; Bifunctional photocatalysts for treatment of tannery wastewater with simultaneous hydrogen production, 2019 (submitted to JBCS).

[2] SOUZA, E. A.; ARAUJO, R. J.; SILVA, L. A.; GO/(CdS)_x/(ZnO)_y bifunctional photocatalyst for ecotreatment of tannery sludge wastewaters with simultaneous generation of hydrogen, 2018 (Abstract published in 41^a RA SBQ).

[3] FERREIRA, S. L. C.; CRUZ JUNIOR, R. A.; CHAGAS, A. V.; FELIX, C. S.; SOUZA, R. C.; SILVA, L. A.; LEMOS, V. A. A closed inline system for sample digestion using 70% hydrogen peroxide and UV radiation. Determination of lead in wine employing ETAAS. Talanta 2019, 191, 479-484.

Área: EDU

Nº de Inscrição: 01230

CONTRIBUIÇÕES DA EDUCAÇÃO MIDIÁTICA NO COMBATE ÀS FAKE NEWS PARA O PROCESSO DE ACT NO ENSINO DE QUÍMICA

Renan de Paiva Vettori (IC),^{1*} Jonathan dos Santos (IC),¹ Luiza Budel Paes Leme (IC),¹ Orliney Maciel Guimarães (PQ)¹

renanvettori18@gmail.com;

¹Departamento de Química UFPR

Palavras Chave: ACT; Educação Midiática, Fake News, Ensino de Química, Ensino Médio.

Highlights

Contributions of the media education in combating to *Fake News* for the process of ACT in the teaching of chemistry.

Resumo

O veículo de informação científica mais utilizado é o da mídia¹ e nos dias atuais a internet, que tem grande impacto sobre a sociedade. O jornalismo científico, como um intermediário entre a divulgação científica e o público leigo, muitas vezes acaba adotando práticas apelativas e sensacionalistas para chamar a atenção do público, o que gera grandes problemas de interpretação e compreensão do conteúdo científico. Nesse sentido, a educação ou alfabetização midiática² vem sendo defendida como uma resposta dos meios educacionais às novas tecnologias e ao excesso de informações que a sociedade é submetida diariamente. Nesse contexto, esse trabalho teve como objetivo analisar as contribuições da educação midiática no combate às Fake news para o processo de ACT de alunos do ensino médio. Para tanto, foi elaborada e aplicada uma sequência didática com a temática *Fake News*, que consistiu em um conjunto de quatro aulas para estudantes de um curso pré-vestibular (ONG) que foram apresentadas como uma oficina com duração de 4 horas em outubro de 2018. A oficina abordou conteúdos para análise de *Fake News* por meio de textos e notícias impressas, também foram abordados conteúdos gerais de Eletroquímica, visando a desmistificação da desintoxicação iônica, como estudo de caso, um tratamento estético que consiste em retirar as impurezas do organismo, por meio de um procedimento suspeito e que não apresenta provas científicas e um debate ao final sobre o tema "Uso do termo Livre de Química em produtos". Como fontes de informação foram utilizados 30 questionários, registros de observação da aula e os argumentos dos estudantes durante o debate. Foram analisados indicadores do processo de alfabetização científica e tecnológica (ACT) em sala de aula, pelos estudantes, por meio dos três eixos estruturantes descritos por Sasseron e Carvalho³ e a análise dos dados foi realizada utilizando a Análise de Conteúdo. Os resultados apontaram indícios do início do processo de ACT, sendo possível verificar que houve: 1) Compreensão básica de termos, conhecimentos científicos fundamentais (Eixo 1), pois a maioria dos estudantes (60 relatos) conseguiu aplicar os conceitos envolvidos no processo de eletrólise com o procedimento de desintoxicação iônica, argumentando que era necessário apenas um estudo sobre eletrólise e como ela funciona para poder explicar que o procedimento é falso; 2) Compreensão da natureza da ciência e dos fatores éticos e políticos que circundam sua prática (Eixo 2), uma vez que foram identificados 28 trechos nas fontes de informação, a maioria relacionada ao debate, principalmente no que diz respeito à discussão sobre o uso inadequado do termo "Livre de química" que pode lesar a população menos esclarecida ou seu uso indevido para vender mais produtos e 3) Entendimento das relações existentes entre ciência, tecnologia, sociedade e meio ambiente (Eixo 3), pois em 38 trechos foi possível identificar que os estudantes conseguiram reconhecer que há limites da utilidade da Ciência e da Tecnologia para o bem-estar humano. Consideramos que a educação midiática promovida por meio da oficina desenvolvida apresentou potencial para o início do processo de ACT dos estudantes participantes.

¹Pechula, M. R. (2014). Ciência: outra linguagem na mídia? Reflexões sobre os discursos científicos acadêmicos e midiáticos. *Ciência & Ensino*, 3(2), especial 18 anos de GepCE. ²Soares, O. I. (2014) Educomunicação e Educação Midiática: vertentes históricas de aproximação entre comunicação e educação. *Comunicação & Educação*, 19 (2), 15-26. ³Sasseron, L. H. & Carvalho, A. M. P. (2011) Alfabetização científica: uma revisão bibliográfica. *Investigações em Ensino de Ciências*, 16 (1), p. 59-77.

Agradecimentos

Cursinho Pré-vestibular da ONG "Em Ação" por ceder espaço para realização da oficina e aos alunos que participaram e colaboraram com a pesquisa.

Derivados bimetálicos do decavanadato: síntese, caracterização e descoloração do azul de metileno

Luiza B. P. Leme (IC),¹ Juliana M. Missina (PG),¹ Kahoana Postal (PG),¹ Francielli S. Santana (PG),¹ David L. Hughes (PQ),² Eduardo L. Sá (PQ),¹ Ronny R. Ribeiro (PQ),¹ Jaisa F. Soares (PQ),¹ Giovana G. Nunes (PQ)^{1*}

luizabudel.leme@gmail.com; nunesgg@ufpr.br

¹Departamento de Química, UFPR; ²School of Chemistry, University of East Anglia, Norwich, NR47TJ, UK

Palavras Chave: Decavanadato, Cobre(II), Tris(hidroxi metil)aminometano, 2-picolilamina, Degradação de corantes

Highlights

Decavanadate bimetallic derivatives: synthesis, characterization and methylene blue discoloration. Decavanadate with copper(II) complexes, with tris and 2-amp as ligands, were synthesized and spectroscopically and diffractometrically characterized. Methylene blue discoloration was evaluated by UV.

Resumo/Abstract

A presença de corantes sintéticos em águas fluviais é um problema desafiador por conta da dificuldade da sua remoção do meio ambiente. Alguns polioxidovanadatos são ativos na fotodegradação de corantes da indústria têxtil e mais recentemente,¹ descobriu-se que estes também podem atuar como adsorventes do azul de metileno. Dois derivados do ânion decavanadato foram preparados pela reação entre V_2O_5 e o 2-amino-2-hidroxi metil-propan-1,3-diol (tris) com posterior adição de $CuCl_2$ na presença ou não de 2-picolilamina (2-amp). Estas reações geraram produtos cristalinos que foram caracterizados por DRX-monocristal como $[Cu(OH)_2(trisH)]_2[V_{10}O_{28}] \cdot 6(H_2O)$ (I) e $[Cu(OH)_2(2-amp)]_2(trisH)_2[V_{10}O_{28}] \cdot 2H_2O$ (II). Os espectros de IV dos compostos revelaram bandas em $1500-1050\text{ cm}^{-1}$ atribuídas a estiramentos da cadeia carbônica dos contraíons, assim como bandas características do decavanadato. Os espectros de RPE de sólido são característicos de espécies mononucleares de Cu^{II} ($S = 1/2$, $I = 3/2$) em ambiente rômico. A simulação do espectro de I evidenciou a existência de efeito Jahn-Teller dinâmico no estado sólido.

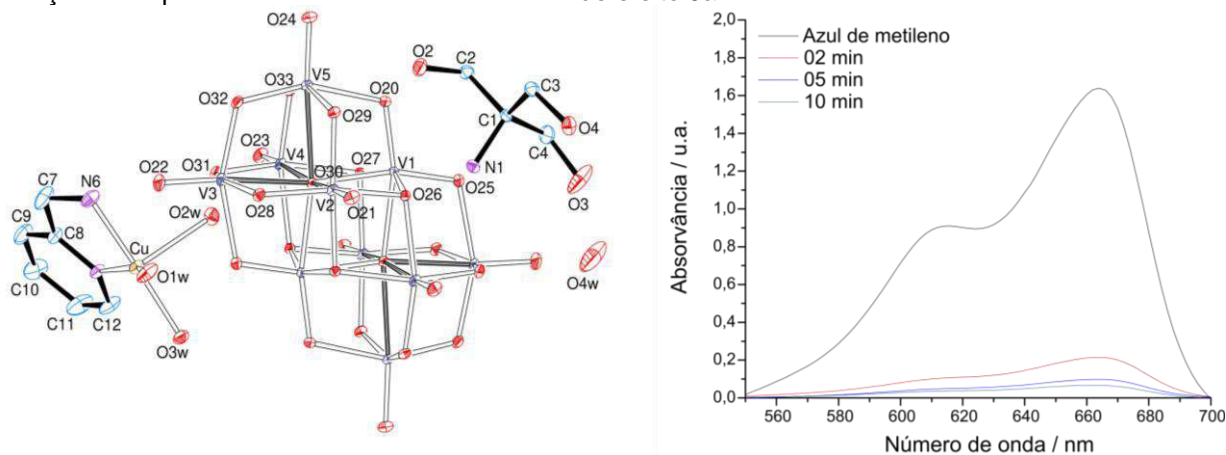


Figura 1. Representação ORTEP de II (esquerda) e espectro de UV-Vis da sua reação de adsorção do azul de metileno na presença de H_2O_2 (direita).

Os produtos foram testados em seu potencial de adsorção do azul de metileno, provocando uma diminuição de 84% (I) e 73% (II) da banda do corante acompanhada por UV-Vis a 664 nm, após 5 min de reação. Na presença de H_2O_2 foram observados floculação e 90% de descoloramento após 2 min de catálise. O espectro de IV do floculado de II mostra bandas em 1637 cm^{-1} ($\nu(C=O)$) e entre 1400 a 900 cm^{-1} referentes ao corante adsorvido. O RMN de ^{51}V do filtrado mostrou um sinal fraco em $\delta = -687$ ppm, evidenciando a formação do peroxovanadato $H_2VO_2(O_2)_2$. Estudos cinéticos preliminares sugerem que existam dois processos competitivos. Estudos de especiação estão sendo realizados para auxiliar na compreensão do mecanismo de degradação/remoção do corante.

¹ NASLHAJIAN, Hadi et al. **Journal of Coordination Chemistry**, v. 70, n. 17, p. 2940-2949, 2017.

Agradecimentos/Acknowledgments

UFPR / CAPES / CNPq / FUNDAÇÃO ARAUCÁRIA / TESOURO NACIONAL

***N*-(2-(4-benzylpiperazin-1-yl)ethyl)-1-phenyl- β -carboline-3-carboxamide, a novel cholinesterase inhibitor selected by virtual screening**

Paula Baréa (PG),^{1*} Aline R. de Oliveira (PG),¹ Diego A.S. Yamazaki (PG),¹ Willian F. da Costa (PQ)¹, Flavio A.V. Seixas (PQ),² Gisele F. Gauze (PQ),¹ Maria H. Sarragiotto (PQ)¹ pbarea@gmail.com

¹Departamento de Química, UEM; ²Departamento de Tecnologia, UEM

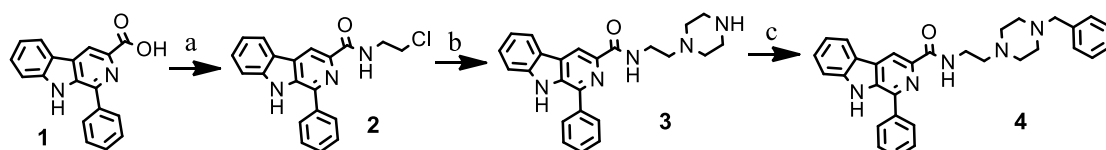
Palavras Chave: Virtual screening, β -carboline, synthesis, AChE, BuChE.

Highlights

A novel β -carboline derivative was selected by virtual screening against acetylcholinesterase (AChE). The new derivative was synthesized and evaluated against AChE and BuChE.

Resumo/Abstract

Studies on β -carbolines concerning to neurodegenerative diseases have been intensified in recent years, and several researches pointed these alkaloids as a new class of anti-Alzheimer agents, acting as potent AChE and BuChE inhibitors, among other activities related to Alzheimer's disease (AD). The AD is associated with cholinergic loss of neurons by the cholinergic hypothesis. Treatment of AD usually is performed with cholinesterase inhibitors (donepezil, rivastigmine and galantamine), however, these drugs do not prevent the progression of the AD and there is still no cure for this disease. Therefore, it is of great interest to develop new cholinesterase inhibitors. Computational methods, such as virtual screening by docking molecular, have been used as a strategy to obtain new bioactive compounds, since they allow the analysis of a large set of compounds in a short time and with low cost. Therefore, in this work, a set of 265 structures of β -carboline derivatives was prepared in the format pdbqt and was used in the virtual screening by docking molecular at the specified active site of AChE (PDB: 4EY7)¹, donepezil was used in virtual screening as reference compound. These studies were realized with the Autodock 4.2.3² and AutoDock Vina 1.1.2³ programs executed in Pyrx 0.8⁴ interface using standard parameters, in each program, the calculations were performed in quadruplicate and were selected the compounds with lower rankings than donepezil. The results obtained for the 2 programs were compared, being found 10 compounds that presented 4 repetitions in both programs, among them, the *N*-(2-(4-benzylpiperazin-1-yl)ethyl)-1-phenyl- β -carboline-3-carboxamide (**4**). Then, this molecule was synthesized by the first time from 1-phenyl- β -carboline-3-carboxylic acid (**1**) (**Scheme 1**), an intermediate already synthesized by our research group from *L*-tryptophan.⁵ The carboxylic acid **1** was treated with 2-chloroethylamine in the presence of the 4-(4,6-dimethoxy-1,3,5-triazin-2-yl)-4-methylmorpholinium chloride (DMTMM), providing the *N*-2-chloroethyl- β -carboline-3-carboxamide **2**. The intermediate **3** was obtained from reaction of **2** with Boc-piperazine followed by a deprotection reaction with TFA. Then, the reaction of **3** with benzyl bromide providing the derivative β -carboline-benzylpiperazine **4**. The synthesis of **4** was confirmed by ¹H and ¹³C NMR spectra.



Reagents and conditions: a) 2-chloroethylamine hydrochloride, Et₃N, DMTMM, THF/MeOH, rt, 15h (yield: 67%); b) 1- Boc-piperazine, NaI, EtOH, reflux, 28h; 2- TFA, CHCl₃, rt, 20h (yield: 77%); c) Benzyl bromide, K₂CO₃, reflux, 22h (yield: 40%).

Scheme 1: Synthetic route for preparation of the β -carboline-benzylpiperazine derivative **4**.

The anticholinesterase activity of **4** was evaluated against AChE (from electric eel) and BuChE (from equine serum), according to the spectrophotometric method of Ellman et al.⁶ The compound **4** showed potent inhibition for both enzymes with IC₅₀ values of 3.21 ± 0.40 μ M for AChE and 1.94 ± 0.38 μ M for BuChE (donepezil: IC₅₀ = 0.010 ± 0.003 μ M for AChE; 3.54 ± 0.54 μ M for BuChE). Our results show that virtual screening was an efficient strategy for the development of a new anticholinesterase agent.

¹Cheung J et al., *J Med Chem.*, **2012**, 55, 10282–10286, ²Morris GM et al., *J Comput Chem.*, **2009**, 30, 2785-2791, ³Trott O, Olson AJ., *J Comput Chem*, **2009**, 31, 455-461, ⁴Dallakyan S, Olson AJ, *Methods Mol Biol.*, **2015**, 1263, 243–250, ⁵Savariz FC et al., *Molecules*, **2012**, 17, 6100-6113, ⁶Ellman GL et al., *Biochem. Pharmacol.*, **1961**, 7, 88.

Agradecimentos/Acknowledgments

DQI-UEM, CNPQ, CAPES and Fundação Araucária for financial support.

Síntese de calcogeno-cianoidrinas opticamente ativas via resolução cinética enzimática mediada por lipase

Daniel Kochany (PG)¹, Tay Zugman (IC)¹, Beatriz Luz de Oliveira (IC)¹, Juliana C. Thomas (PG)¹, Alfredo R. M. de Oliveira (PQ)¹, Leandro Piovan* (PQ)¹

danielkochany@gmail.com ; lpiovan@quimica.ufpr.br

¹Laboratório de Síntese Química e Enzimática (LaSQuE), Universidade Federal do Paraná – UFPR, Curitiba-PR, Brasil.
Palavras Chave: Síntese, Calcogeno-Cianoidrinas, Resolução Cinética Enzimática, Lipase.

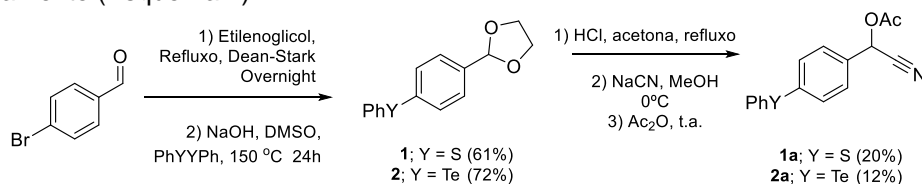
Highlights

Lipase-mediated kinetic resolution of chalcogen-cyanohydrins - Synthesis optically active chalcogen-cyanohydrins containing S, Se and Te - Preparation of optically active polyfunctionalized chalcogenides.

Resumo/Abstract

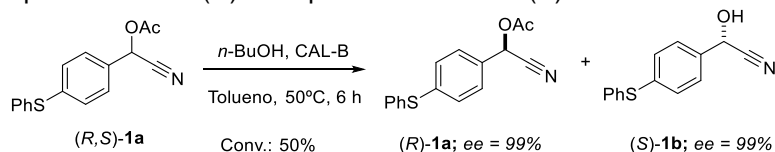
A resolução cinética enzimática (RCE) de calcogeno-cianoidrinas é uma etapa chave para preparação de calcogenetos polifuncionalizados enantiopuros. Uma selenocianoidrina já foi estudada em nosso grupo possuindo condições de síntese e resolução bem estabelecidas.¹ Agora, estas metodologias de síntese e RCE estão sendo aplicadas na síntese de calcogeno-cianoidrinas contendo enxofre e telúrio. Posteriormente, os compostos sintetizados serão triados para identificação de possíveis atividades biológicas, a fim de que perfis de relações estrutura-atividade, baseadas no calcogênio, sejam estabelecidos.

A partir dos resultados obtidos na síntese de cianoidrinas contendo selênio, iniciou-se a investigação para a síntese de compostos análogos com enxofre e telúrio. Para tanto, o 4-bromobenzaldeído foi protegido e em seguida submetido a reação de substituição nucleofílica aromática² com o dicalcogeneto de interesse (PhYYPh, Y=S, Te), levando ao sulfeto (**1**) e ao telureto (**2**) com 61% e 72% de rendimento, respectivamente. Após desproteção, os calcogeno-aldeídos **1** e **2** foram reagidos com cianeto de sódio em metanol, seguido da captura com anidrido acético, originando os acetatos de cianoidrina³ **1a** e **2a** com rendimentos de 20% e 12%, respectivamente (Esquema 1).



Esquema 1. Etapas desenvolvidas para compostos com telúrio e enxofre.

O composto **1a** foi submetido à reação de RCE mediada por CAL-B, empregando *n*-butanol como nucleófilo, em tolueno a 50 °C em modo batelada. Após 6 h de reação, foi observado conversão de 50% e excesso enantiomérico de 99% para o acetato (*R*)-**1b** e para a cianoidrina (*S*)-**1c**.



Esquema 2. Resolução cinética enzimática do composto (*R,S*)-**1b**.

Agora, estas condições serão aplicadas na RCE do composto contendo telúrio (**1b**), na sequência as reações de RCE serão realizadas em modo de fluxo-contínuo e os resultados comparados com o modo batelada, além disso, os compostos enantiopuros serão derivatizados para outras funções, a fim de serem submetidos a avaliação de atividade biológica.

Agradecimentos/Acknowledgments



¹ Thomas, J.; Aggio, B. B.; Oliveira, A. R. M.; Piovan, L. *Eur. J. Org. Chem.* **2016**, 5964-5970.

² Ma, X.; Liu, Q.; Jia, X.; Su, C.; Xu, Q.; *RSC Adv.* **2016**, 6, 56930.

³ Goßnitzer, E.; Punkenhofer. *Monath Chem*, **2003**, 134, p. 1271-1282, 2003.

Functionalization of *N*-Heterocyclic Compounds and Application in the Synthesis of a Verubulin Analogue.

Rodolfo H. V. Nishimura (PG),^{1,2} **Valter E. Murie** (PG),¹ **Ricardo Vessecchi** (PQ),² **Giuliano Cesar Clososki** (PQ),^{1,2*}

rodolfo_hvn@usp.br; gclososki@fcrp.usp.br

¹Departamento de Química, Faculdade de Filosofia Ciências e Letras de Ribeirão Preto, Universidade de São Paulo, Av. Bandeirantes 3900, 14040-901, Ribeirão Preto SP, Brasil.

²Núcleo de Pesquisa em Produtos Naturais e Sintéticos, Faculdade de Ciências Farmacêuticas de Ribeirão Preto, Universidade de São Paulo, Av. do Café s/n, 14040-903, Ribeirão Preto SP, Brasil.

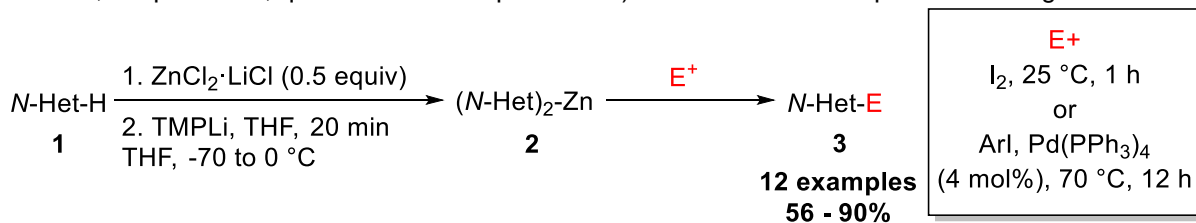
Keywords: Lithium amides, Metalation, *N*-heterocyclic compounds, Bioactive substances.

Highlights

According to recent studies more than 50% of drugs approved by FDA (Food and Drug Administration) contain an *N*-heterocyclic compound. Thus, in order to obtain a novel class of *N*-heterocyclic compounds, we have investigated the metalation using TMPLi in the presence of ZnCl₂.

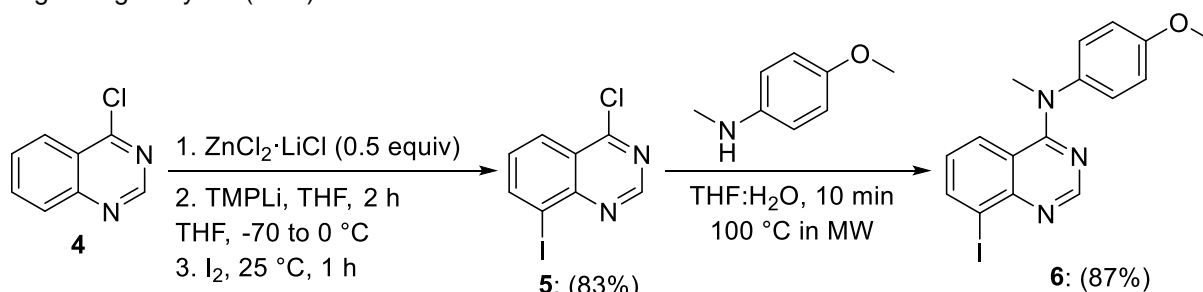
Abstract

Metalation is one of the most important strategy to functionalize arenes and heteroarenes, being a great tool to synthesize building blocks of natural products or drugs. In this context, lithium amides play an important role, although their high reactivity is usually a drawback when dealing with substrates bearing sensitive functional groups.¹ However, to overcome these limitations, it was observed that addition of 0.5 equiv of ZnCl₂ to the substrate followed by addition of the TMPLi, leads to the formation of a more stable diorganozinc intermediate (**2**), which can be trapped with an electrophile to achieve the desired product (**3**, Scheme 1).² Thus, in this work, we have investigated this methodology in the functionalization of *N*-heterocyclic compounds (quinolines, isoquinolines, quinoxalines and quinoxaline) in order to obtain important building blocks.



Scheme 1

Among the studied substrates, we have functionalized 4-chloroquinazoline (**4**) in good yield (83%), which after an amination reaction using 4-methoxy-*N*-methylaniline in microwave led to the formation of a Verubulin analogue in great yield (87%).



Scheme 2

In summary, we were able to functionalize many *N*-heterocyclic compounds, which are important building blocks of bioactive substances. Moreover, we have synthesized an analogue of a compound with potential activity antineoplastic.

¹Mulvey, R. E. *Acc. Chem. Res.* **2009**, *42*, 743.

²Frischmuth, A.; Fernández, M.; Barl, N. M.; Achraimer, F.; Zipse, H.; Berionni, G.; Mayr, H.; Karaghiosoff, K.; Knochel, P. *Angew. Chem. Int. Ed.* **2014**, *53*, 7928.

Área: **EDU**Nº de Inscrição: **49375**

Uma abordagem sobre Museus, Gabinete de Curiosidades e Química

Katlyn T. Nalepa¹ (IC), Tainara F. de Bona¹ (IC), Camila Dias¹ (IC), Julia Grigolo¹ (IC), Patrícia F. S. Costódio¹ (PQ), Anelise Ehrhardt¹ (PQ), Gizelle I. Almerindo¹ (PQ)*.

katlyn_th@hotmail.com; gizelle@univali.br

¹Engenharia Química, Universidade do Vale do Itajaí (UNIVALI).

Palavras Chave: *Popularização da Química, Educação em Química, História dos Museus, Gabinetes de Curiosidades.*

Highlights

An approach on Museums, Cabinet of Curiosities and Chemistry. The History of Museums. The importance of Science Museums. Creating and presenting Chemistry collections as Cabinet of Curiosities. Developing teamwork with expanded concepts for Chemistry.

Resumo

A importância dos Museus, assim como, dos Centros de Ciências favorece a educação científica despertando o interesse em Ciência e Tecnologia.¹ Nesse contexto, o projeto de extensão “Química Social” do curso de Engenharia Química da UNIVALI realizou uma oficina temática de duas horas em proximidade ao Dia Internacional do Museu para 16 crianças na faixa etária de 9 a 14 anos do Centro de Educação em Tempo Integral Vale Verde (Itajaí/SC). Utilizando uma abordagem dialogada-expositiva, contou-se a história do surgimento dos Museus com o Gabinete de Curiosidades e citou-se alguns museus mundiais e locais. Ainda, abordou-se o papel dos profissionais da Química, por exemplo, em identificar a veracidade de obras de arte e na conservação e restauração de objetos. Em seguida, foram organizadas seis equipes para a construção de Gabinetes de Curiosidades, segundo a preferência dos temas: conchas, pedras, folhas, sementes, botões e bolinhas de gude. Foram entregues caixas que continham textos explicativos sobre cada tema. Nestes textos haviam curiosidades e a menção de alguns elementos químicos que constituem os itens. Dessa forma, o objetivo principal da atividade foi desenvolver o trabalho em equipe, enfatizar a importância dos profissionais da química em museus e integrar as crianças ainda mais com a Tabela Periódica, sendo que esta tem sido motivo de grande curiosidade em encontros anteriores. Ao final da prática, cada grupo apresentou sua coleção (Figura 1) com muito entusiasmo, indicando na Tabela Periódica alguns elementos químicos (Figura 2). O trabalho didático realizado com as crianças demonstrou grande desenvolvimento tanto na área dos conhecimentos de história com o Gabinete de Curiosidades e a Tabela Periódica, quanto em gestão de trabalho em grupo.

Figura 1. Construindo os Gabinetes de Curiosidades.



FONTE: As Autoras (2018).

Figura 2. Interação com a Tabela Periódica.



FONTE: As Autoras (2018).

¹STEOLA, Ana; KASSEBOEHMER, Ana. O ESPAÇO DA QUÍMICA NOS CENTROS E MUSEUS DE CIÊNCIAS BRASILEIROS. Química Nova, [s.l.], p.1072-1082, 2018. Sociedade Brasileira de Química (SBQ).

Agradecimentos

A Universidade do Vale do Itajaí pelo apoio técnico e financeiro. Ao CEDIN Verde Vale pelo espaço físico e acesso aos alunos.

Asymmetric Synthesis of β -Ketothioethers from Acyl Derivatives of Johnson's Chiral Sulfur Ylides

Nikolas Papparidis (PG),¹ Antonio C.B. Burtoloso (PQ).^{1*}

nikolas.santos@usp.br; antonio@iqsc.usp.br

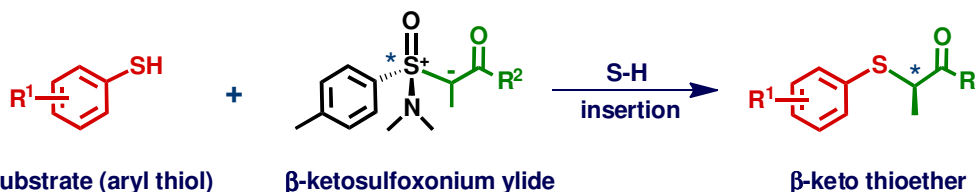
¹Instituto de Química de São Carlos (IQSC), Universidade de São Paulo (USP), São Carlos / SP, CEP 13566-590

Palavras Chave: β -Ketothioether Synthesis, Chiral β -Ketosulfoxonium Ylides, Asymmetric S-H Insertion.

Highlights

We introduce a novel methodology for the asymmetric synthesis of chiral β -ketothioethers, employing enantiomerically pure β -ketosulfoxonium ylides in a further exploration of the S-H insertion reaction developed by our group.

Resumo/Abstract



Chiral β -ketosulfoxonium ylides were prepared by deprotonating the corresponding racemic or enantiomerically pure precursor aminosulfoxonium tetrafluoroborate with NaH in THF, followed by the addition of an acylating agent. The resulting ylides were purified by recrystallization and their enantiopurity confirmed by HPLC. Next, the ylide and aryl thiol were simply mixed together with solvent at r.t. or moderately low temperature (-20°C) to obtain the insertion product with enantiomeric excess. The asymmetry is transferred from the chiral sulfur center to the newly formed carbon stereocenter through a presumed diastereoselective protonation in the first step. Insertion products have been prepared in satisfactory yields in MeCN at r.t., but the stereoselectivity could be observed only at lower temperatures, and the enantiomeric excesses proved to be only moderate in this solvent. The analysis of the presented data indicates that bulky R^2 substituents favor stereoselectivity.

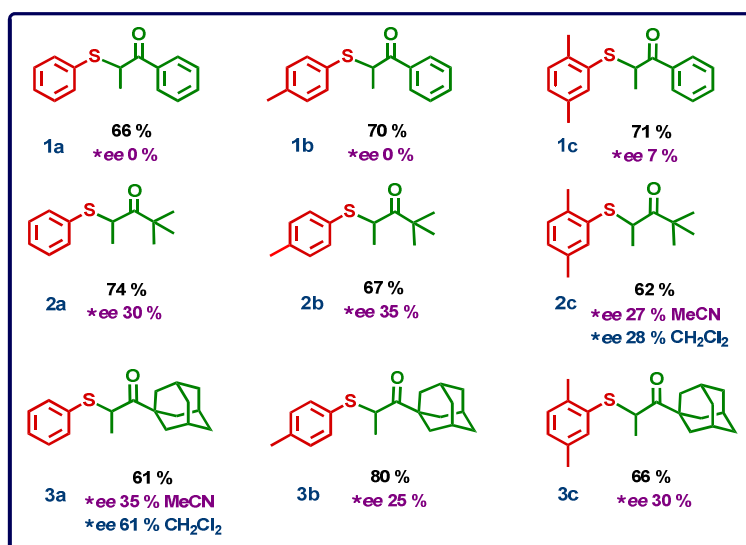


Table 1: Some examples of β -keto thioethers synthesized by our methodology.

The yields shown under each β -keto thioether correspond to the isolated products of S-H insertion reactions performed in MeCN at r.t. for 24 h. The enantiomeric excess (*ee) values in purple were determined in MeCN at -20°C . A solvent screening performed later determined that CH_2Cl_2 can improve the stereoselectivity of some S-H insertions. A remarkable increase in ee value occurs for β -ketothioether **3a** (from 35 to 61 %) in dichloromethane, although no significant improvement had resulted for **2c** when this solvent was tested.

Agradecimentos/Acknowledgments



PhD Fellowship 142394/2015-7



Financial Support

2013/25504-1
2013/18009-4
2017/23329-9

Área: AMB*(Inserir a sigla da seção científica para qual o resumo será submetido. Ex: ORG, BEA, CAT)***Nº de Inscrição: 01238***(Inserir o número de inscrição do autor que fez a submissão)*

Treatment of aqueous effluents of the leather industry by adsorption

Leonardo H. de Oliveira (PQ),^{1*} Luiz G. Denbinski (IC)¹ Analu Mantovani (PQ).²**leonardo.oliveira@unoesc.edu.br**¹Área de Ciências Exatas e Tecnológicas, UNOESC²Área de Ciências AgráriasPalavras Chave: *Adsorção, Cromo, Carvão ativado, efluente industrial.*

Highlights

The percentage of total chromium removed in effluent from the leather processing industry was 94%.

Resumo/Abstract

1. INTRODUÇÃO

O curtimento do couro pode ser realizado por diferentes agentes de curtimento, entre eles o cromo. O cromo presente no efluente industrial lançado em corpos d' água é um poluente tóxico e ambientalmente indesejável. Neste trabalho será utilizado o carvão ativado na remoção de cromo do efluente da indústria de processamento de couro.

2. MÉTODO

O carvão ativado (granulometria 12x25 mesh) utilizado foi fornecido pela empresa Alphacarbo. As amostras de efluentes, após a determinação inicial do pH foram tratadas com o coagulante PAC em *Jar Test* e decantadas por 30 minutos. Parte do efluente clarificado foi determinada a concentração de cromo inicial e 200 mL utilizados para os experimentos de cinética de adsorção com carvão ativado.

3. RESULTADOS

Os resultados dos experimentos de cinéticas de adsorção estão presentes na Tabela 1.

Tabela 1. Remoção de cromo de efluente industrial em função do tempo de adsorção

| Amostra: Efluente do homogeneizador | Cromo total (mg/L) | | % remoção cromo total |
|-------------------------------------|--------------------|-----------|-----------------------|
| | Amostra 1 | Amostra 2 | |
| Efluente bruto | 24,127 | 25,595 | 0,00 |
| Após coagulação | 3,836 | 3,049 | 0,00 |
| Adsorção de 1h | 1,286 | 1,435 | 60,48 |
| Adsorção de 3h | 1,187 | 1,336 | 66,29 |
| Adsorção de 6h | 0,348 | 0,340 | 90,01 |
| Adsorção de 12h | 0,370 | 0,338 | 89,72 |
| Adsorção de 24h | 0,184 | 0,191 | 94,55 |

Conforme os resultados apresentados na Tabela 1, verificou-se a remoção 94% de cromo total presente na amostra inicial em 24 h. Os resultados iniciais são promissores e serão apresentados como proposta de melhoria na etapa de tratamento de efluentes na indústria de processamento de couro.

DIXIT, S.; YADAV, A.; DWIVEDI, P. D.; DAS, M. **Toxic hazards of leather industry and technologies to combat threat: a review.** Journal of Cleaner Production, v. 87, p. 39-49, 2015.

Agradecimentos/Acknowledgments

Os autores agradecem a UNOESC pela estrutura e recursos investidos neste trabalho.

Studying the Wolff Rearrangement in Diazoketones Aiming the Synthesis of Bicyclic Aromatic Ketones

Evandro de A. Rocha (PG),¹ Antonio C.B. Burtoloso (PQ),^{1*}

evandro.azevedo@usp.br; antonio@iqsc.usp.br*

¹Departament of Physical Chemistry, Chemical Institute of São Carlos, IQSC-USP.

Keywords: Diazoketone, Friedel-Crafts Intramolecular, Wolff rearrangement, Ketene.

Highlights

A Friedel-Crafts acylation methodology was developed for the formation of bicyclic aromatic ketones through a short synthetic route and employing mild conditions using α -diazoketones.

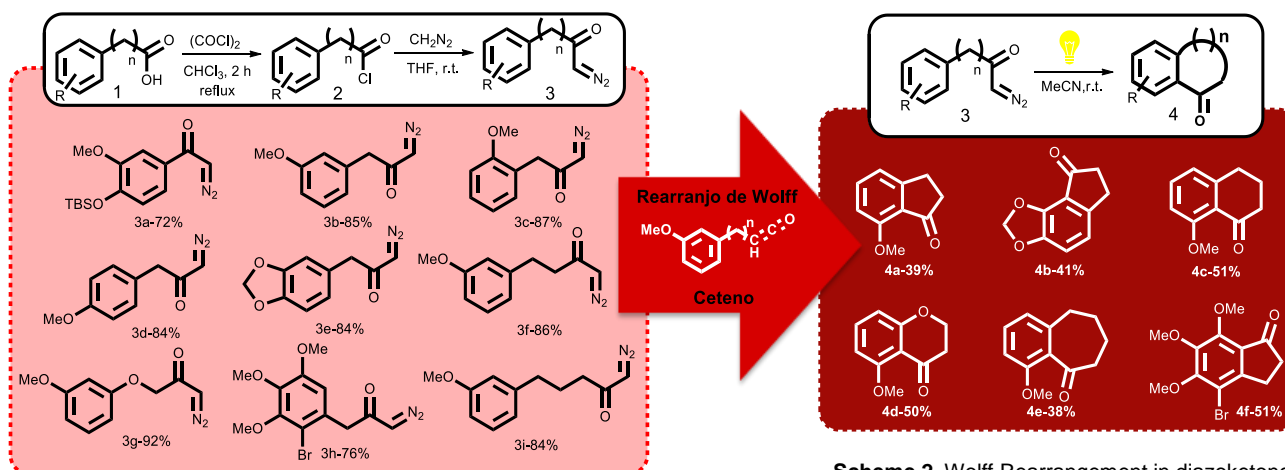
Resumo/Abstract

There are several methodologies already described in the literature for the synthesis of bicyclic aromatic ketones.¹ However, these synthetic routes are very similar to the classical method developed by Friedel and Crafts, which use fairly reactive Lewis or Bronsted acids and in supra-stoichiometric quantities.² This limits the use of these routes, since they are efficient only for simple substrate and can rarely be applied to multifunctionalized and/or sensitive starting materials.³

In this scenario, the diazoketones would be advantageous alternatives as versatile building blocks for obtaining cyclic systems. In our initial

investigation, the diazo compounds (3 a-i) could be prepared by acylation of diazomethane as developed by Arndt and Eistert⁴ in of 72-92% yields (**Scheme 1**).

The diazoketones in the presence of light act as interesting precursors of ketene, which in turn are attacked by the aromatic ring to provide the bicyclic ketone.⁵ These compounds were subjected to the photochemical Wolff rearrangement, which provided bicyclic rings (4 a-f) of n=1,2 and 3 in yields ranging from 38 to 51% (**Scheme 2**). Optimization studies as well as the use of different diazoketones are under investigation.



Scheme 1. Synthesis of diazoketones

Scheme 2. Wolff Rearrangement in diazoketones

References: ¹ RANGEL, N.C.; DÍAZ, J.O.H.P.; VÁSQUEZ, A. An expeditious synthesis of 8-methoxy-1-tetralone. *Synthesis*, v.48, p. A-G, 2016. ² TRAN, P.H.; NGUYEN, H.T.; HANSEN, P.E.; LE, T.N. An efficient and green method for regio- and chemo-selective Friedel-Crafts acylations using a deep eutectic solvent. *Royal Society of Chemistry Advances*, v.6, p.37031, 2016. ³ MALA'BI, T.; COHEN, S.; POGODIN, S.; AGRANAT, I. Friedel-Crafts acyl rearrangements in the fluoranthene series. *Structural Chemistry*, v.28, p. 511-526, 2017. ⁴ ARNDT, F.; EISTERT, B.; PARTALE, W. Diazo-methan und o-Nitroverbindungen, N-Oxy-isatin aus o-Nitro-benzoylchlorid. *Berichte der deutschen chemischen Gesellschaft (A and B Series)*, v. 60, n. 6, p. 1364-1370, 1927. ⁵ BERNARDIM, B.; BALDWIN, A.M.H.; BURTOLOSO, A.C.B. LED lighting as a simple, inexpensive and sustainable alternative for Wolff rearrangements. *Royal Society of Chemistry Advances*, v.5, p. 13311, 2015.

Agradecimentos/Acknowledgments

The authors would like to acknowledge São Paulo Research Foundation (FAPESP), for research financial support (2017/23329-9) (2013/18009-4) and fellowship grant (2018/03667-0) to E.A.R. We also to thank National Science and Technology Development Council (CNPq) for a fellowship to E.A.R (165215/2017-8).

Área: ANA

(Inserir a sigla da seção científica para qual o resumo será submetido. Ex: ORG, BEA, CAT)

Nº de Inscrição: 01240

(Inserir o número de inscrição do autor que fez a submissão)

Determinação de ácido ascórbico em sucos naturais utilizando imagem digital

Ícaro S. de A. Porto (PG),¹ João H. Santos (PG),¹ Liz O. Santos (PQ),²

Adriano A. Gomes (PQ),³ Sérgio L. C. Ferreira (PQ).¹

slcf@ufba.br; icaro.porto@hotmail.com

¹ Instituto de Química UFBA; ² Centro de Ciência e Tecnologia em Energia e Sustentabilidade UFRB; ³ Instituto de Química UFRGS

Palavras Chave: Ácido ascórbico, Imagem digital, Colorimetria, Ortofenantrolina.

Highlights

The determination of ascorbic acid in natural fruit juices by digital image colorimetry has been proposed. Fe(III) is reduced to Fe(II) by ascorbic acid, and a stable complex with orthophenanthroline is formed.

Resumo/Abstract

O ácido ascórbico (AA), também conhecido como vitamina C, é um importante nutriente presente em diversas frutas. Sua ingestão é comumente associada ao fortalecimento do sistema imunológico. Contudo, outros benefícios também estão relacionados ao seu consumo tais como: manutenção da saúde dos vasos sanguíneos, pele, dentes, ossos e cartilagem. Neste trabalho, foi desenvolvida um método para determinação indireta de AA mediante uso de imagens digitais empregando o modelo aditivo de cores RGB a partir do trabalho de Ferreira e colaboradores¹. Em presença de ácido ascórbico, o Fe(III) é reduzido à Fe(II), formando um complexo estável de coloração alaranjada com a ortofenantrolina. Durante a otimização um planejamento fatorial completo de dois níveis, estudou as seguintes variáveis: pH, volume de ortofenantrolina 0,1% e tempo de reação de oxiredução (Figura 01). O procedimento foi aplicado para determinação de AA em sucos naturais de limão, laranja, uva, caju, abacaxi, tangerina, lima e manga. Os resultados obtidos foram avaliados e discutidos utilizando duas formas de processamento sendo possível alcançar limites de detecção (LD) e quantificação (LQ) de 0,005 e 0,015 mg L⁻¹. As amostras também foram analisadas por espectrometria de absorção molecular concluindo-se que não houve diferença significativa com as formas de processamento empregadas a um nível de 95% de confiança (tabela 01).

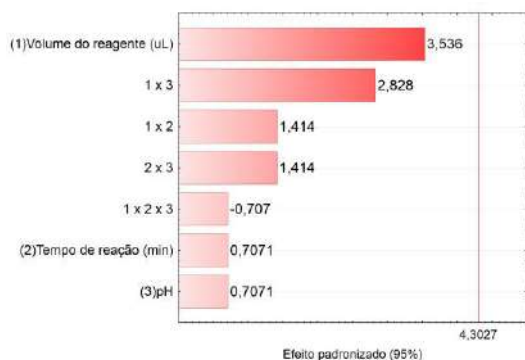


Figura 01

| Amostra | UV-Vis | Processamento 1 | Processamento 2 |
|-----------|-------------|-------------------------------|--------------------|
| | | R = (- Log p/p ₀) | R = (255 - signal) |
| Limão | 25.0 ± 2.8 | 21.8 ± 2.7 | 24.8 ± 2.8 |
| Laranja | 35.4 ± 1.3 | 32.7 ± 2.9 | 34.3 ± 2.7 |
| Uva | 4.7 ± 0.6 | 3.8 ± 0.5 | 4.5 ± 0.5 |
| Caju | 179.9 ± 6.9 | 152.7 ± 7.6 | 182.5 ± 8.2 |
| Lima | 39.5 ± 0.8 | 37.9 ± 3.9 | 38.1 ± 2.9 |
| Abacaxi | 5.4 ± 0.3 | 5.0 ± 1.0 | 5.4 ± 0.9 |
| Tangerina | 28.8 ± 1.5 | 27.8 ± 2.7 | 29.8 ± 2.6 |
| Manga | 32.8 ± 3.1 | 33.8 ± 3.2 | 35.1 ± 2.3 |

Tabela 01 (Valores expressos em mg 100 g⁻¹)

1 Joao H. Santos Neto, Icaro S. A. Porto, Mateus P. Schneider, Ana M. P. dos Santos, Adriano A. Gomes, Sergio L. C. Ferreira. Speciation analysis based on digital image colorimetry: Iron (II/III) in white wine. Talanta (2018).

Agradecimentos/Acknowledgments

À FAPESB, CAPES, CNPq e INCT-E&A

Área: ANA

(Inserir a sigla da seção científica para qual o resumo será submetido. Ex: ORG, BEA, CAT)

Nº de Inscrição: 01242

(Inserir o número de inscrição do autor que fez a submissão)

Method development for 2,4-D herbicide determination in air by active sampling and HPLC-ESI-MS/MS analysis

Magali Kemmerich (PQ)*, Bruna C. Ceolin (PG), João P. S. Gomes (IC), Vinícios R. Gehrke (PG), Edinaldo R. Camargo (PQ), Luis A. de Ávila (PQ)

magali_kemmerich@hotmail.com

¹Faculdade de Agronomia Eliseu Maciel, UFPEl

Keywords: Drift, Volatilization, Herbicide, 2,4-D, Air, ambiental monitoring

Highlights

- Q-Orbitrap analyzer provided satisfactory selectivity and sensitivity
- Acidified methanol was essential for 2,4-D elution from sampling tubes
- The method allowed 2,4-D volatilization determination

Abstract

Introduction. The herbicide 2,4-D is widely used to control weeds in soybean and wheat crops. However, field observations indicate that 2,4-D can drift several kilometers from the application site. In the Rio Grande do Sul state (Brazil), grape growers have observed fan-shaped leaves with small wrinkled spots between veins and sharp tips, a known symptom 2,4-D drift in grape leaves, affecting fruit production. Besides affecting fruit production, the high 2,4-D volatilization is a great concern for governmental authorities, since the herbicide could affect living beings and the environment. As low concentrations of this herbicide may be hazardous, and to attending low limits of quantification and monitor 2,4-D volatilization, sensitive and selective analytical methods are required. In this way, the objective of this work was to develop and validate a 2,4-D method determination in air samples by active sampling and HPLC-ESI-MS/MS. **Materials and Methods.** The 2,4-D volatilization sampling experiment was carried out in a Fitotron-type chamber. The experiment was arranged in a completely randomized design with three replicates. The experimental units consisted of glass boxes with dimensions of 25 x 30 x 20 cm. A cartridge (XAD-2 OVS) was inserted inside the box and connected to an air pump (SKC, model PCXR8), set at a flow rate of 2 L min⁻¹. Six collections were carried out during ten days of sampling, being: 12h, 24h, 48h, 96h, 168, 240h. Elution from sampling cartridges was tested with 5 mL of different solutions: 1) methanol:acetonitrile 1:1 (v/v) with formic acid 1% (v/v), 2) methanol with formic acid (pH 2.0) and 3) methanol:ultrapure water 1:1 (v/v). The 2,4-D determination was performed with high performance liquid chromatography coupled to a Q-Exactive Focus Hybrid Quadrupole Orbitrap mass spectrometer (Thermo Scientific). The chromatographic separation was performed with a C18 column, 100 X 2.1 mm (Thermo Scientific), particle size of 2.6 µm, maintained at 40 °C. The gradient elution program with A) water containing 0.1% formic acid (v / v) and B) methanol, consisted of: 0 - 0.5 min 10% B, 0.5 - 2.0 min 60% B, 2.0 - 4.0 min 100% B, 4.0 - 6.5 min 100% B, 6.5 - 6.6 min 10% B, 6.6 - 9 min 10% B, with flow rate of 0.3 mL min⁻¹. The developed method was validated in terms of selectivity, linear range, linearity (determination coefficient, r²), limit of detection (LOD), limit of quantification (LOQ), accuracy (recovery, %) and precision (RSD, %). **Results and Discussion.** Sampling time results showed that the highest volatilization of 2,4-D occurs between 48 and 96 h, being the best time for sampling in field. Also, elution solvent results showed that acidified methanol was essential for 2,4-D extraction from sampling cartridges, thus 5 mL of methanol pH 2.0 were employed in the elution step. The developed method showed selectivity and a linear range between 0.5 and 50 µg L⁻¹, with r² of 0.9993; LOQ and LOD were 0.5 µg L⁻¹ and 0,15 µg L⁻¹, respectively; accuracy and precision were assured with recoveries between 70-120% and RSD <20%. **Conclusions.** The developed method allowed the determination of 2,4-D in air samples with active sampling using XAD-2 OVS cartridges and HPLC-ESI-MS/MS analysis. The real samples analysis will be performed in the 2,4-D application season, that occurs between september and december, in soybean crop. The results will help to understand the ambiental drift of 2,4-D herbicide.

Acknowledgments

The authors are grateful to the Brazilian agencies CNPq, CAPES, FAPERGS and FINEP for the financial support and fellowship.

VOLTAMMETRIC CHARACTERIZATION OF BODIPY DYES

Ana Clara G. de Souza¹ (IC), **Luana A. Machado**² (PG), **Leandro F. Pedrosa**^{1,2} (PQ), **Elivelton A. Ferreira**^{1*} (PQ).

anagonzalez@id.uff.br; eliveltonalves@id.uff.br

¹ Institute of Exact Sciences, Department of Chemistry, UFF, CEP 27213-145, Volta Redonda, RJ, Brazil.

² Institute of Chemistry, Department of Organic Chemistry, UFF, CEP 24020-141, Niterói, RJ, Brazil.

Keywords: BODIPY, Voltammetry, Band Gap.

Highlights

Application of BODIPY dyes in electron transfer reactions. Estimation of band gap energy by cyclic voltammetry. Electrochemistry characterization.

Resumo/Abstract

Derivatives of BODIPYs (4,4-difluoro-4-bora-3a,4a-diaza-s-indacene) form an important class of dyes owing to a unique combination of facile synthesis, stability, high absorption coefficient, and high photoluminescence efficiency.¹ In the last decade, the advent of new biomedical and optoelectronic technologies has increased the interest of BODIPYs dyes associated with various applications such as tunable lasers, fluorescent markers for biomolecules and cell imaging, photosensitizing agents, light emitting devices, chemical sensors and solar cells.² The implementation of BODIPY dyes in electron transfer reactions is a new frontier of the dye molecule that has primarily been applied in biological and chemical sensing. The oxidation and reduction potentials of BODIPY dyes are dependent on the substitution of the BODIPY structure, which allows for a high degree of adjustability in the redox potentials.³ One of the most convenient methods to characterize the organic materials and estimate the energy band diagram is cyclic voltammetry (CV).⁴ In this work we investigated **1a,b** and **2a,b** BODIPY compound derivative (**Figure 1**) by cyclic voltammetry to determine their band gap energy in acetonitrile solution.

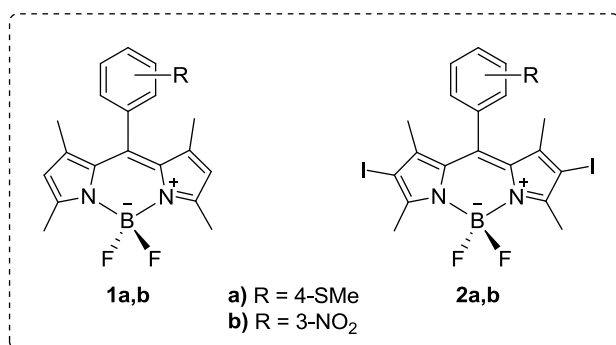


Figure 1: Chemical structures of BODIPY dyes.

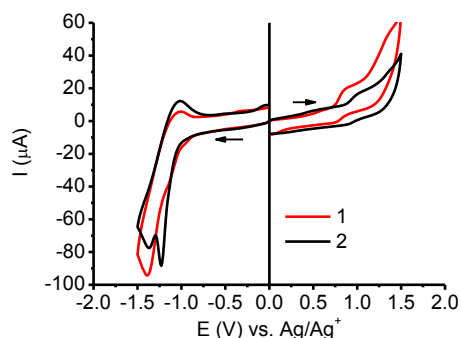


Figure 2: Cyclic voltammetry of BODIPY dyes **1a** and **2a** at a scan rate of 100 mV/s.

Tetrabutylammonium hexafluorophosphate as supporting electrolyte was used. Electrochemical studies of the dyes **1a** and **2a** show irreversible reduction and oxidation waves in both positive and negative directions with peaks that depend on the substituent present (**Figure 2**). From the CV curve, we estimated the band gap energy to be approximately 1.7 eV for both dyes. In conclusion, the design, synthesis and electrochemical properties of four new BODIPY dyes were studied. In addition, it was noted that the iodine substituent on BODIPY unit did not affect the redox behavior of the system considerably. Work in this line is currently underway in our laboratories.

REFERENCES

- ¹ Biyikioglu, Z.; et al. *Electrochimica Acta* **2017**, *466*, 130-138.
- ² Machado, L. A.; et al. *J. Fluor. Chem.* **2019**, DOI: <https://doi.org/10.1016/j.jfluchem.2019.01.008>
- ³ Thompson, B. L.; Heiden, Z.; *Intech Open* **2018**, chapter 4.
- ⁴ Leonat, L.; et al. *U.P.B. Sci. Bull.* **2013**, series B, 75.

Cobalt aluminate obtained at low temperature by hydrothermal reaction using alumina and aqueous Co(II) nitrate solution as precursors

Gustavo de Estácio Borges (IC)*, Lucia Kiyomi Noda (PQ)

geb@uol.com.br

Chemistry Department, UNIFESP – Campus Diadema, Diadema - SP

Keywords: cobalt aluminate, hydrothermal method, low temperature, alumina, Co(II) nitrate

Highlights

CoAl₂O₄ was obtained by hydrothermal method at low temperature. The reagents were alumina and aqueous Co(II) nitrate solution. The effects of temperature and reaction time were investigated.

Resumo/Abstract

Cobalt aluminate (CoAl₂O₄) is a transition metal spinel which falls into the category of normal spinel with aluminum in octahedral sites and cobalt in tetrahedral ones¹. Cobalt aluminate is a thermally and chemically stable pigment of intense blue color and is usually synthesized at high temperature (above 1000°C) by solid-state reaction between two oxide components². Its applications include as inorganic ceramic blue pigment which is widely used for coloration of plastics, paint, fiber, rubber, phosphor, glass, cement, glazes and porcelain enamels³. Other application of cobalt aluminate is as heterogeneous catalyst for selective reduction of NO_x with hydrocarbons and CO₂ reforming of methane⁴.

In this work, reactions were made between alumina, obtained previously from the calcination of an Al(OH)₃-chitosan gel⁵, and Co(NO₃)₂ aqueous solution, by hydrothermal method, using a steel reactor with a Teflon liner, varying the temperature and the reaction time. The temperatures tested were 140, 150 and 160°C. The reaction times were 10 h and 48 h. The formation of cobalt aluminate was monitored through diffuse reflectance spectra (DRS) in UV-visible-near-infrared region. At all reaction temperatures tested the formation of cobalt aluminate was observed, as verified by UV-visible-near infrared spectra. CoAl₂O₄ has a broad, structured band with three peaks at 543, 577 and 626 nm, as can be seen in Figure 1.

In addition to the typical CoAl₂O₄ band, a weak band is observed at 415 nm, which can be attributed to Co²⁺ or Co³⁺ in an octahedral site. The hydrothermal treatment also formed bohemite, AlOOH, which was verified through the Raman spectra of the reaction products.

It was observed that with increasing reaction temperature and reaction time, the characteristic cobalt aluminate band increased in intensity, but, the formation of Co²⁺ (or Co³⁺) in an octahedral site also increased. The color of the samples changed in agreement with the spectral observations.

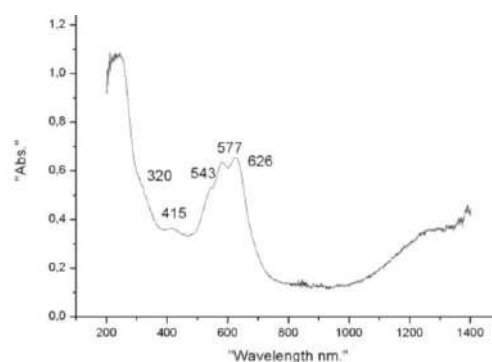


Figure 1. DRS of the product of hydrothermal reaction of alumina and Co(NO₃)₂ at 150°C/10 h

1. M. Zayat and D. Levy, *Chem. Mater.* 12 (2000) 2763.
2. P. H. Bolt, M. P. H. F. Habraken, and W. J. Geus, *J. Solid State Chem.*, 135 (1998) 59.
3. W. S. Cho and M. Kakihana, *J. Alloys Comp.*, 287 (1999) 87.
4. N. Srisawad, W. Chaitree, O. Mekasuwandumrong, P. Praserttham and J. Panpranot, *J. Nanomater.* 2012, Article ID 108369.
5. H. V. Fajardo, A. O. Martins, R. M. de Almeida, L. K. Noda, L. F. D. Probst, N. L. V. Carreno and A. Valentini, *Mater. Lett* 59 (2005) 3963.

Agradecimentos/Acknowledgments

PIBIC/CNPq

Área: MAT

Nº de Inscrição: 01245

Study of the modulating action of CuFe_2O_4 nanoparticles for the drugs Captopril, Enalapril and Lisinopril

Luis F. Soares (PQ)¹, Amanda A. Batista (IC)¹, Lara L. F. Oliveira (IC)¹, Lara C. Costa (IC)¹, Elidiane C. Coelho (TC)¹, Marilene J. Santos (IC)¹,

lfssoares@ufsj.edu.br

¹Pharmacy Department, UFSJ/CCO.

Keywords: Copper ferrite, Modulating action, Captopril, Enalapril, Lisinopril.

Highlights

Use of copper ferrites as drug modulators. Study of the release of ferrite tablets containing captopril, enalapril and lisinopril in aqueous, acid and basic medium.

Abstract

Magnetic nanoparticles such as ferrites are being approved in the US by the Food and Drug Administration (FDA) for enhancement of magnetic resonance imaging and have already been used for the targeting of anticancer drugs and for new antimicrobials or for modification of synthetic antimicrobials in order to minimize pathogen-microbial resistance mechanisms. The copper ferrite (CuFe_2O_4) is one of the most important spinel ferrites because it exhibits phase transitions, changing semiconductor properties, showing a change in electrical switching and tetragonality when treated under different conditions, as well as magnetic and electrical properties with thermal stabilities. The objective of this work was to study the modulatory activity of CuFe_2O_4 in (the) form of pellets containing the raw materials captopril (CAP), lisinopril (LIS) and enalapril maleate (ENA). The ferrite was synthesized using the co-precipitation method (750 °C) and characterized by infrared (KBr). The pellets (400 mg) were prepared using 1, 5 and 10% (w / w) of the raw materials and standard solutions at concentrations of 0.06 mg/mL (CAP), 0.03 mg/mL (LIS) and 0.03 mg/mL (ENA). For the release studies (mg/mL) considering the pH variation, distilled water, HCl and 0.01 mol/L NaOH were used. Table 1 shows the drug release results of the pellets. The results indicate that 1% pellets released more than 5 and 10% pellets. Captopril (85.99%) had the highest release in aqueous medium, enalapril (81.05%) and lisinopril (35.07%) in basic medium. The variations in the results can be explained from the solubility in water and their respective values of pKs (CAP = 83 mg/mL, 4.2, ENA = 25 mg/mL, 3.67 and 5.2, LIS = 0.216 mg/mL, 2.5, 4.0, 6.7 and 10.1). The results of the work showed that copper ferrite is a promising material to be used as a modulator for the release of the drugs studied.

Table 1: Results of the study of copper ferrite modulating action in the form of tablets Captopril, Enalapril and Lisinopril in neutral, acidic and basic medium.

| Drugs | pH | 1% | 5% | 10% |
|------------|-------|-------|-------|-------|
| Captopril | 2,00 | 41,85 | 8,41 | 4,23 |
| | 7,00 | 85,99 | 31,14 | 15,21 |
| | 12,00 | 54,56 | 13,32 | 7,39 |
| Enalapril | 2,00 | 7,13 | 1,44 | 0,77 |
| | 7,00 | 36,16 | 14,07 | 7,35 |
| | 12,00 | 81,05 | 40,76 | 20,48 |
| Lisinopril | 2,00 | 25,40 | 11,45 | 5,85 |
| | 7,00 | 26,74 | 17,65 | 8,88 |
| | 12,00 | 35,07 | 7,31 | 7,33 |

Acknowledgments

To FAPEMIG and UFSJ.

Área: ORG

(Inserir a sigla da seção científica para qual o resumo será submetido. Ex: ORG, BEA, CAT)

Nº de Inscrição: 01246

(Inserir o número de inscrição do autor que fez a submissão)

Acidochromism of Push-Pull Nitroquinoline Compounds: Experimental-Theoretical Approach.

Giovanny Carvalho dos Santos (PG),¹ Juan Carlos Roldao (PG),² Johannes Gierschner (PQ)² and Luiz Carlos da Silva-Filho (PQ).¹

giovanny.c.santos@unesp.br

¹ Chemistry Department, Faculty of Sciences, UNESP-Bauru, Av. Eng. Luiz Edmundo Carrijo Coube, 14-01, CEP 17033-360, Vargem Limpa, Bauru, S.P, Brazil

² IMDEA Nanociencia, Ciudad Universitaria de Cantoblanco, Madrid 28049, Spain

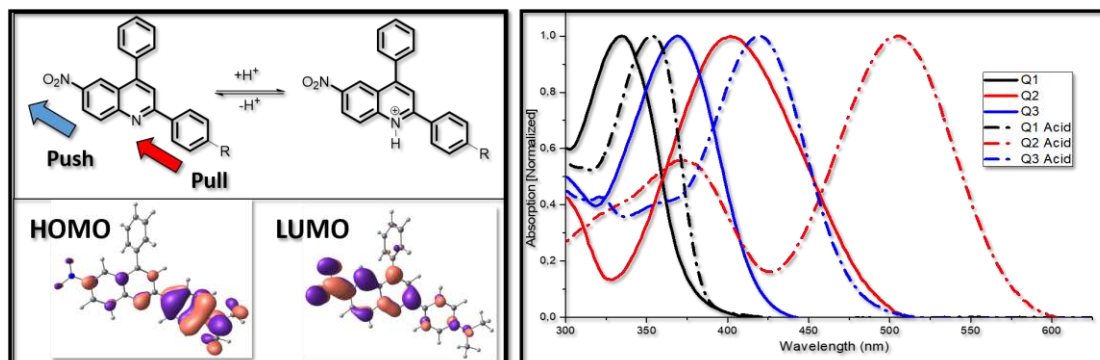
Palavras Chave: (Quinoline, TD-DFT, Acidochromic effect, Push-Pull system).

Highlights

Quinoline derivatives are important compounds in many fields. Here we studied the acidic effect in nitroquinoline derivatives push-pull type. The acidic media can provoke a bathochromic shift in the absorption spectra. This effect can be important to applications in UV/Vis probes and sensors.

Abstract

The quinoline derivatives have been investigated for many years. These important compounds show a wide range of applicability in pharmacological (e.g. antimalarial, anticancer, antimicrobial) and several others fields (e.g. OLEDs, DSSCs, fluorescent probes) [1]. The most interesting properties of quinoline come from the fact that contain a rigid conjugated heterocyclic structure. There are nowadays numerous ways of synthesis and structural changes of these compounds. This makes it increasingly sought to better understand the interesting properties of these compounds. Here, we synthesized these compounds using multicomponent reactions (MCR) an important tool to organic synthesis, using niobium pentachloride as catalyst [2]. We have obtained good yields and without need of further purification methods (e.g. chromatography column) [3].



Effects on UV-Vis absorption of nitroquinoline compounds were investigated. The study showed a bathochromic shift when the compounds were subjected to a strongly acidic medium. This displacement is due to the nitrogen protonation of the quinoline ring. This protonation causes the compound to change the structure of the UV-Vis spectrum, increasing the push-pull effect on the molecule and shifting the spectrum spectra. The theoretical TD-DFT calculations corroborated with the experimental and were very useful in explaining the behavior of these compounds.

Reference:

[1] Pericherla, K., et al. **Org. let.** 2013,15, 4078

[2] Lacerda, Jr. V., et al., **R. B. Aldrich. Acta.** 2012,45,19.

[3] Santos, G.C., et al. **J. Fluoresc.** 2017, 27, 271.

Acknowledgments

FAPESP, CAPES, CNPQ, PROPE-UNESP e CBMM

Synthesis and characterization of gold-rhodium dendritic nanoparticles

Maria Paula de Souza Rodrigues (PG),^{1*} Leonardo de Oliveira Cutolo (IC),¹ Susana I. C. Torresi (PQ)¹, Pedro H. C. Camargo (PQ)¹.

mariapaularodrigues@usp.br;

¹Departamento de Química, USP;

Palavras Chave: *Nanoparticles, Plasmonic, Catalysis, Bimetallic, Gold, and Rhodium.*

Highlights

Controlled synthesis of dendritic nanostructures; Gold-rhodium bimetallic nanomaterials; Plasmonic catalysis.

Resumo/Abstract

Conventionally, noble metal-based nanoparticles such as Pt, Rh, Ag and Au are explored as catalysts due to their high activity in several chemical transformations, outstanding optical properties (plasmonic), high surface area and reactive catalytic sites. Despite these properties, noble metals present high cost and low abundance, which is the main disadvantage concerning their industrial applications. Nevertheless, this issue can be overcome by designing the synthesis of the nanoparticles, which allows to control, to optimize and to tune the nanostructures properties by changes on its composition, size and shape, and then to obtain a more active catalyst using low metal content [1]. Specifically, combining metals in bimetallic nanoparticles is of great interest due to the synergistic effect and the possibility to merge materials properties (e.g. Au plasmonic and Rh high catalytic activity properties). Hence, this study aims to develop an approach for the synthesis of dendritic nanoparticles based on gold and rhodium. Dendritic shape is of great interest since it provides higher density of hot-spots in between the branches, derived from the material plasmonic properties, and higher surface area. In a typical procedure, the synthesis of these nanostructures occurs in two steps. First, gold nanoparticles with $15,3 \pm 0,9$ nm are synthesized using Turkevich method [2]. This is followed by a reducing step, in which rhodium precursor is deposited onto gold surface, forming the branches. Different parameters were optimized in order to achieve reproducible synthesis as well as improved rhodium coverage on the surface. The final nanostructure obtained has about $25,6 \pm 2,5$ nm and it shows good size and shape monodispersity, as can be seen in Figure 1. Afterward, the tuning of branches size and coverage were investigated. We expected that varying the amounts of rhodium precursor would affect those branches parameters. Interestingly, in all investigated samples there were no significant differences on the nanostructure size. However, the coverage of rhodium was increased with the addition of precursor. In addition, the branches growth mechanism was investigated. It was verified that, initially, very small rhodium nanoparticles were deposited onto gold surface and, as the reaction proceeded, they grew in the shape of branches. The dendritic rhodium surface combined with gold plasmonic properties are promising structures to exploit in plasmonic catalysis for a wide variety of reactions.

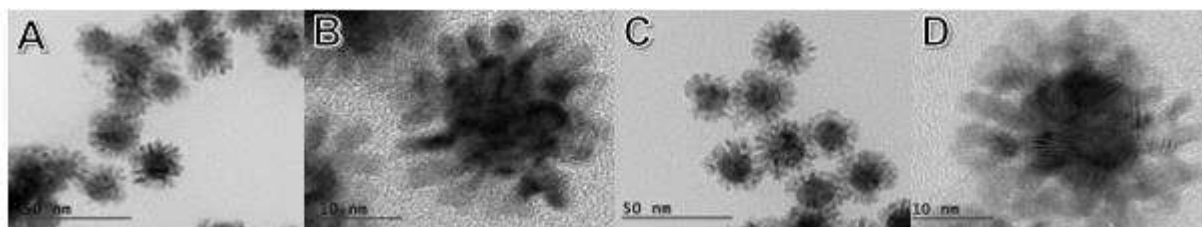


Figure 1: Gold-rhodium dendritic nanostructures with **A)** and **B)** $15,2 \text{ mol.L}^{-1}$; **C)** and **D)** $24,1 \text{ mol.L}^{-1}$ of rhodium

[1] Zhan et. al. *Nat. Rev. Chem.* **2018**, 2, 216. [2] Turkevich, et. al. *Discuss. Faraday Soc.*, **1951**, 11, 55.

Agradecimentos/Acknowledgments

IQ-USP, CNPq, CAPES, FAPESP (2018/16846-0 e 2015/26308-7) e Serrapilheira

Ruthenium-Catalyzed Synthesis of 2,3-Disubstituted Pyridines starting from Isoxazol-5-ones and acrolein

Alessandra A. G. Fernandes (PG),¹ Mateus L. Stivanin (PG),¹ Igor D. Jurberg (PQ)¹

a162988@iqm.unicamp.br; m164663@iqm.unicamp.br; ijurberg@unicamp.br

¹Institute of Chemistry, State University of Campinas- UNICAMP

Keywords: Isoxazol-5-ones; Decarboxylation; Pyridines; Ruthenium .

Highlights

- ✓ A novel RuCl₃/ PPh₃ catalytic system is reported for the direct, intermolecular preparation of 2,3-disubstituted pyridines starting from 3,4-disubstituted isoxazol-5-ones and acrolein.
- ✓ A detailed mechanistic investigation composed by control experiments, ³¹P NMR and ESI(+)-HRMS monitoring of the reaction mixture supports the involvement of the key intermediates proposed.

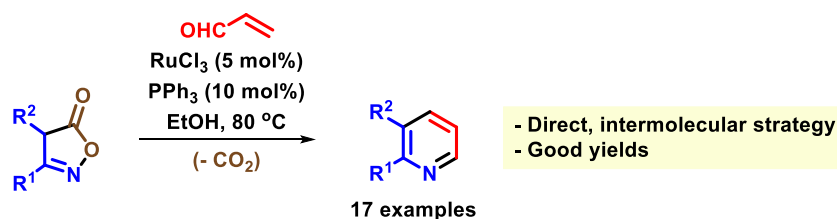
Resumo/Abstract

Isoxazol-5-ones can be used as building blocks to access a variety of structures,

In this work, the use of RuCl₃/ PPh₃ is reported as an unprecedented catalytic system for the direct conversion of isoxazol-5-ones and acrolein to the corresponding 2,3-dialkyl/ aryl pyridines, which can be obtained in 30-66% yields (Scheme 1).

Investigations employing control experiments, ³¹P NMR and ESI(+)-HRMS monitoring of the reaction mixture allow the establishment of some important mechanistic elements of this reaction. The active catalyst is a Ru(II) species derived from the reduction of the starting Ru(III) by PPh₃. The first step of the reaction is a non-catalyzed Michael addition of the isoxazol-5-one onto acrolein. Then, the Ru(II) catalyst undergoes an oxidative addition into the N-O bond of the isoxazolone ring, and a decarboxylation event follows, thus leading to an azirine intermediate. This key intermediate can undergo ring expansion, followed by a dehydration step to afford the observed pyridines.

Overall, this is a complex transformation that is described in moderate to good yields. However, because of the number of events involved, one can argue that the yield of each elemental step is actually quite high. Of note, this is the first report on the direct, intermolecular conversion of isoxazolones to pyridines and it highlights how such a heterocycle can be obtained from a straightforward catalytic protocol starting from simple starting materials. ..



Scheme 1. Decarboxylative synthesis of pyridines starting from isoxazol-5-ones and acrolein.

Agradecimentos/Acknowledgments

The authors are grateful to FAPESP for a PhD fellowship to AAGF (2017/22164-6) and a research grant to IDJ (2017/24017-0); and to Faepex-Unicamp for a M. Sc. fellowship to M. L. S. (127/16).

Uranium separation from acid mine drainage using anionic resins – Investigation of chemical speciation and interaction mechanism.

Alexandre C. Bertoli (PQ),¹ Heitor A. De Abreu (PQ),¹ Hélio A. Duarte (PQ)¹

bertolialexandre@yahoo.com.br

Departamento de Química, Universidade Federal de Minas Gerais - UFMG Av. Pres. Antônio Carlos, 6627 - Pampulha, Belo Horizonte - MG, 31270-901, Brasil.

Palavras Chave: Uranium, Hydrolysis, Acid mine drainage, Ion exchange resins, DFT.

Highlights

The predominant species is the neutral $[\text{UO}_2\text{SO}_4]$ species.
Uranium removal process cannot be described solely as anionic exchange.
It was demonstrated that this is a mechanism of complexing.

Abstract

Uranium speciation and its complexes are an important environmental issue mainly when it is associated with acid rock drainage (ARD). Ion exchange resins are the most appropriate technology for the removal of low levels of uranium from highly concentrated sulfate solutions. The chemical speciation of uranium/sulfate system indicates that the predominant species at acidic conditions is the neutral $[\text{UO}_2\text{SO}_4]$ (uranyl sulfate). Therefore, the uranium removal process cannot be described based solely as anionic exchange. The present work investigated the chemical speciation of the UO_2^{2+} (uranyl) in the presence of sulfate using density functional calculations (DFT) of the chemical species and their interaction with the resins. It was demonstrated the great selectivity and loading capacity towards uranium from experiments with naturally occurring ARD solution and 3 different commercial anionic resins. The high concentration of sulfate along with the uranium affinity to sulfate plays an important role in such process. We have demonstrated that the mechanism cannot be described as ion exchange but rather a complexing mechanism in which the uranium and its neutral $[\text{UO}_2\text{SO}_4]$ (uranyl sulfate) species interacts with the sulfate adsorbed on the resins. This is a unique mechanism in which the uranium and its neutral sulfate complex is adsorbed through a complexing mechanism rather than ion exchange. This is a strategy that may be explored to remove other metal ions of environmental interest.

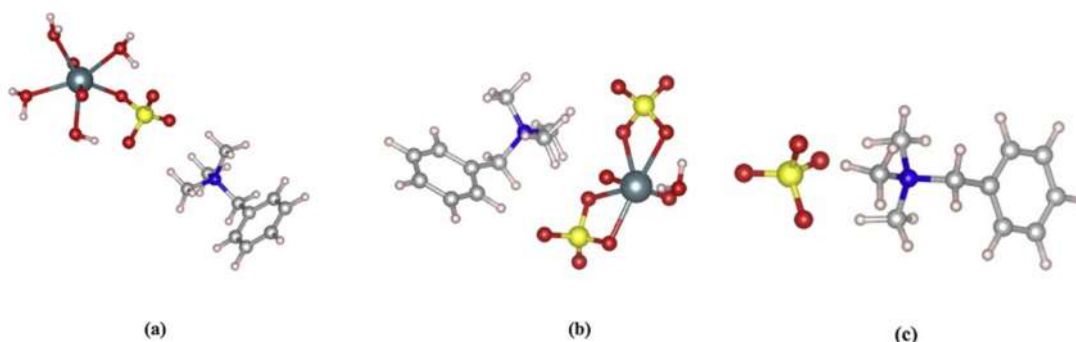


Figure 1: Most stable structures of species interactions uranyl sulfate with resins: a) $[\text{UO}_2\text{SO}_4(\text{H}_2\text{O})_4(\text{Ar}-\text{CH}_2\text{N}(\text{CH}_3)_3)]^+$ b) $[\text{UO}_2(\text{SO}_4)_2(\text{H}_2\text{O})(\text{Ar}-\text{CH}_2\text{N}(\text{CH}_3)_3)]^-$ and c) $[\text{SO}_4(\text{Ar}-\text{CH}_2\text{N}(\text{CH}_3)_3)]^-$.

Acknowledgments

The support of the Brazilian agencies, FAPEMIG, CNPq and CAPES. INCT-ACQUA (<http://www.acqua-inct.org>) and RENOVAMin (Proc. RED-00102-16) also supported this work

Bacterial cellulose aerogels for adsorption and recovery of rare-earth elements extracted from discarded fluorescent lamps

Thais C. A. Silva (IC),¹ Ariane T. Mitsuahara (IC),¹ Ysabela M. Thomeo (IC),¹ Elias P. Ferreira Neto (PQ),¹ Sidney J.L. Ribeiro,^{1*} (PQ)

thais.silva555@hotmail.com; sidney.jl.ribeiro@unesp.br

¹Institute of Chemistry, São Paulo State University (UNESP), Araraquara-SP, Brazil;

Keywords: rare earth elements, recovery, phosphors, chloridric acid, adsorption, bacterial cellulose.

Highlights

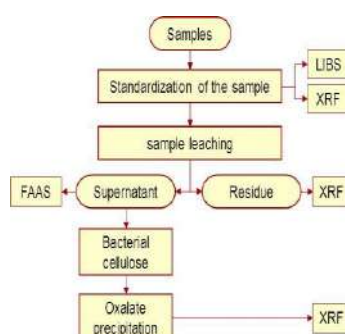
- RTs elements were successfully extracted by acid treatment as confirmed by XRF, LIBS and FAAS analysis
- Bacterial cellulose aerogels were obtained by biosynthesis route and CO₂ supercritical drying

Abstract

In this project, we aim to develop a suitable recycling method to recover rare-earth elements from discarded fluorescent lamps. The extraction method process uses hydrochloric acid at different concentrations and temperatures to leach rare-earth elements from solid residue of ground fluorescent lamps. Additionally, we propose to recover the extracted rare-earth ions by concentration of these elements on bacterial cellulose biosorbents, followed by desorption and oxalate precipitation (Figure 1). The acid treatment using HCl proved to be a good extractor for Y and Eu elements present in the two solid waste samples provided by different lamps recycling facilities. Results obtained using LIBS, XRF and FAAS analysis show efficient extraction of the metals for the acid treatments conducted with heating at 80°C. Moreover, XRF analysis confirmed the presence of additional rare-earth elements (Tb, Ce, Gd and La) in the solid

residue remaining after acid extraction. Additional extraction steps are currently under study in order to recycle such additional elements as well.

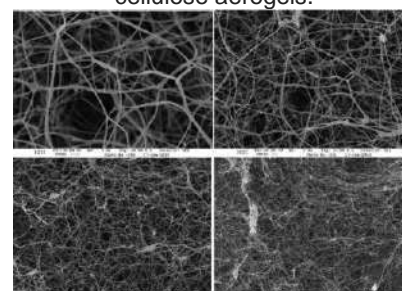
Figure 1: Schematic illustration of process.



The preparation of the biosorbent material was conducted by production of Bacterial Cellulose (BC) hydrogels biosynthesized by *Gluconacetobacter xylinus* cultivated in nutrient media, followed by controlled drying of these wet gels in supercritical CO₂, thus obtaining BC aerogels. SEM images of the biopolymer

aerogel (Figure 2) show that material porous structure of the BC hydrogel was kept intact due to controlled drying in supercritical fluid. Such high porosity and interconnected pore structure are important characteristics for a good adsorbent. Ongoing studies are focusing on testing the BC aerogels as adsorbents for pre-concentration and recovery of the rare-earth elements extracted from fluorescent lamps solid waste;

Figure 2: SEM images of bacterial cellulose aerogels.



Acknowledgments



Área: MAT

Nº de Inscrição: 01253

Atividade adsortiva em colunas de leito fixo contendo Ferrita de Cobre (CuFe_2O_4) dos medicamentos Captopril, Lisinopril e Verapamil

Lara C. Costa (IC)¹, Amanda A. Batista (IC)¹, Lara L. F. Oliveira (IC)¹, Marilene J. Santos (IC)¹, Luis F. Soares (PQ).^{1*}

laracristina95@hotmail.com; lfoares@ufsj.edu.br

¹Departamento de Farmácia, UFSJ/CCO

Palavras Chave: Ferrita de Cobre, Adsorção, Captopril, Lisinopril, Verapamil.

Highlights

Adsorption activity in fixed bed columns containing Copper Ferrite (CuFe_2O_4) of Captopril, Lisinopril and Verapamil. The copper ferrite showed to be a promising as adsorbent of the studied drugs.

Resumo

Captopril (CAP), Lisinopril (LIS) e Verapamil (VER) são medicamentos usados no tratamento da hipertensão arterial sistêmica, que é definida como uma condição clínica multifatorial caracterizada por níveis elevados e sustentados de pressão arterial. O capitolril e lisinopril são anti-hipertensivos inibidores da enzima conversora de angiotensina (IECA) e o verapamil um agonista dos canais de cálcio. O uso de medicamentos se torna motivo de preocupação constante devido o seu potencial de contaminação ambiental, que pode ser devido ao descarte inadequado, uso veterinário, e da secreção de metabólitos que não são extintos no método de purificação de esgotos. Na última década aumentou o estudo de materiais de ferritas na adsorção de medicamentos e matérias primas como contaminantes em efluentes industriais. O presente trabalho teve como objetivo estudar a atividade adsortiva da ferrita de cobre para os anti-hipertensivos captopril, lisinopril e verapamil utilizando a técnica de leito fixo. A ferrita de cobre foi sintetizada utilizando o método de co-precipitação (750°C) e caracterizada através da espectroscopia no infravermelho (KBr) e as colunas cromatográficas foram preenchidas com aproximadamente cerca de 6,0000 g do adsorvente ferrita. As concentrações das soluções padrão utilizadas foram de 1,5 mg/mL (CAP), 0,5 mg/mL (LIS) e 0,125 mg/mL (VER). As frações das soluções recolhidas em intervalos de 60 minutos foram lidas em 204 nm (CAP e LIS), 206 nm (ENA) e 198 nm (VER). Os resultados indicaram para o capitolril uma adsorção máxima de 84,6% em relação à concentração da solução padrão, 99,68% para o lisinopril e 85,4% para o verapamil. Em relação ao tempo, entre 60 e 240 min, as frações do captopril permaneceram entre 50,0 e 60,0% de adsorção quando comparadas às concentrações padrão, o lisinopril entre 3 e 4% e o verapamil entre 85,0 e 90,0%. Estes resultados corroboram para a indicação da ferrita de cobre como um promissor adsorvente para contaminações aquáticas de farmacos.

Agradecimentos

À FAPEMIG e a UFSJ

42ª Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química: Eixos Mobilizadores em Química

Synthesis and Biological Prospection of Naphthoquinone-Coumarin Hybrids Containing 1,2,3-Triazolic Linked

Luana S. M. Forezi (PQ),^{1*} Acácio S. Souza (PQ),¹ Ruan C. B. Ribeiro (PG),¹ Fernando C. Silva (PQ),¹ Vitor F. Ferreira (PQ).²

acacio.farma@gmail.com; luanaforezi@id.uff.br

¹Departamento de Química Orgânica, UFF; ²Departamento de Tecnologia Farmacêutica, UFF

keyword: Naphthoquinone, Menadione, Coumarin, 4-Hydroxy-coumarin, 1,2,3-Triazole, Neglected Diseases.

Highlights

Synthesis and Biological Prospection of Naphthoquinone-Coumarin Hybrids Containing 1,2,3-Triazolic Linked. It is a search for new hybrid naphthoquinone-coumarin containing modifications in skeleton, connected by 1,2,3-triazole spacer, looking for a good relation between structure and activity, and even acting as multitarget in biological systems. Thus, it is intended to investigate how the junction of such systems - naphthoquinone, coumarin and 1,2,3-triazole - may influence the activity of these new molecules.

Abstract

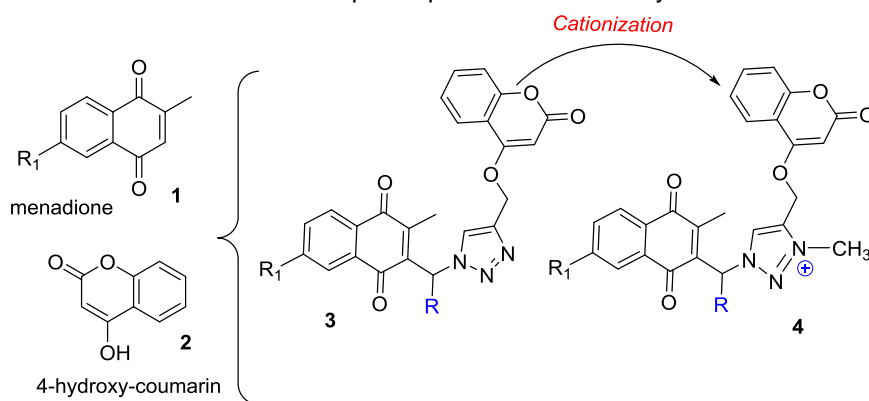
The search for new drugs capable of reducing or eliminating the morbidity, mortality and suffering rates of patients affected by various diseases has been one of the main focuses of organic synthesis. Among these diseases are the neglected diseases, which are well known given the lack of interest of the large pharmaceutical conglomerates in researching new drugs to combat these diseases due to the low purchasing power of large portions of populations in underdeveloped or developing countries. Chagas disease and sporotrichosis are some examples of neglected diseases, the last being endemic in Rio de Janeiro.^{1,2,3}

The studies that seek the study target that will lead to the synthesis of new bioactive molecules begin with their relevance in the literature, as is the case of naphthoquinones, coumarins and 1,2,3-triazoles systems, whose pharmacological studies show various biodynamicities, highlighting numerous individual biological properties.

Based on this, the objective of this work is to search for new naphthoquinone-coumarin hybrids with different modifications in their skeleton, connected by a 1,2,3-triazole spacer, looking for a good relation between the structure and the activity and even acting as multitarget in biological systems. Thus, it is intended to investigate how the junction of such systems - naphthoquinone, coumarin and 1,2,3-triazole - may influence the activity of these new molecules.

For the synthesis of the naphthoquinone-coumarin

hybrids **3** the azido-naphthoquinones were reacted with a propargylated-coumarin employing copper sulfate pentahydrate, sodium ascorbate and a dichloromethane/water mixture (1:1) and the reaction was maintained at room temperature. The final products of type **3** were obtained satisfactorily and in yields ranging from 72-83%. Their structures were confirmed using different physical methods of analysis such as 1 D and 2D NMR, IV and HRMS. Cationization will be carried out in the future.



¹ Verrest, L.; Dorlo, T. P. C. *Clin. Pharmacokinet.* **2017**, *56*, 583.

² Cheuka, P. M.; Mayoka, G.; Mutai, P.; Chibale, K. *Molecules* **2017**, *22*, 58.

³ Neglected Tropical Diseases; World Health Organization: Geneva, **2017**; http://www.who.int/neglected_diseases/diseases/en/. Acessado em 18/03/2019.

Acknowledgment

CAPES, CNPq, FAPERJ and FIOCRUZ.

Área: FIS

(Inserir a sigla da seção científica para qual o resumo será submetido. Ex: ORG, BEA, CAT)

Nº de Inscrição: 01256

(Inserir o número de inscrição do autor que fez a submissão)

Síntese, Caracterização e estudo cinético da degradação de di-hidrogenofosfato de 10-decilmecrilato (10-MDP)

Nataly Castro (PG), Paula Roberta P. Furtado (IC), Rogério A. Gariani, Marcia Margarete Meier (PQ)

marcia.meier@udesc.com

Programa de Pós-Graduação em Química, Mestrado em Química Aplicada, Universidade do Estado de Santa Catarina, UDESC, Joinville/SC

Palavras Chave: 10-MDP, monômero, polímero, síntese, cinética

Highlights

Synthesis, characterization and Kinetics studies of 10-Methacryloyloxydecyl dihydrogen phosphate (10-MDP). The monomer 10-MDP have great use in dental adhesive but its instability is a drawback and need to be studied. We observed that in presence of other monomer a copolymer is spontaneously formed after 8 weeks at 40°C.

Resumo/Abstract

O monômero di-hidrogenofosfato de 10-decilmecrilato (10-MDP) é considerado um dos melhores compostos para serem utilizados em adesivos dentais uma vez que garantem resistência adesiva, qualidade e longevidade da adesão devido à capacidade de interagir com a hidroxiapatita dental ligando-se quimicamente ao cálcio¹. No entanto, relata-se a deterioração de adesivos dentais contendo 10-MDP.

Com o objetivo de compreender este processo o presente trabalho teve como objetivo sintetizar 10-MDP e estudar sua cinética de degradação a 25 e 40°C utilizando medidas de RMN de ¹³C e ³¹P. A rota de síntese adotada foi adaptada de Ogliari et al. (2004) e Omura et al. (1984). Sendo que na 1ª etapa foi gerado 10-hidroximetacrilato (65% de rendimento) e na 2ª etapa introduziu-se o grupo fosfato gerando 10-MDP (rendimento de 83% e pureza de 70%). Espectros de RMN de ¹H, ¹³C e ³¹P e espectroscopia de massa de alta resolução confirmam a estrutura química proposta de 10-MDP e de seu dímero.

A estabilidade hidrolítica do monômero 10-MDP foi investigada após preparo de misturas: G1 = Hidroxietilmetacrilato (HEMA)/10-MDP/H₂O nas proporções massicas de 9,7/0,3/90 e G2 = C₃H₇OH/10-MDP/H₂O 28/1,5/70,5% em massa, mantidos a 25 e 40°C.

Espectros de RMN de ¹³C mostram o surgimento do pico referente ao carbono da carbonila de ácido metacrílico gerado pela hidrólise do 10-MDP na temperatura de 25°C e 40°C. Após 4 semanas aproximadamente 80 % de 10-MDP havia se degradado no experimento G2. O experimento G1 apresentou formação de material polimerizado após 8 semanas a 40°C e após 16 semanas a 25°C, indicando a formação precoce do copolímero entre HEMA e 10-MDP.

A rota de síntese adotada possibilitou sintetizar 10-MDP combinado ao seu dímero e o estudo cinético indica a instabilidade do monômero 10-MDP e a formação precoce de copolímero.

Agradecimentos/Acknowledgments

A UDESC, FAPESC, CNPq. O presente trabalho foi realizado com apoio da Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior - Brasil (CAPES) - Código de Financiamento 001.

¹ OMURA, I, et al. KURARAY. Phosphate monoester adhesive composition. Japan Patente US 4612384, 1984.

² OGLIARI, F. et al. *Journal of Dentistry*. 2008; 36: 171-177.

DNA Interaction Studies and DFT calculations upon selected dihydropyrimidinones

Felipe Wodtke (PG),¹ Laís A. Schmoeller (IC),¹ Daniel Pietezak (IC),¹ Daiani C. Leite (PQ),¹ Fernando R. Xavier,¹ Rogério A. Gariani (PQ),¹ rogerio.gariani@udesc.br

¹Laboratório de Síntese e Catálise -SINCA, Departamento de Química, Centro de Ciências Tecnológicas, Universidade do Estado de Santa Catarina – UDESC, Rua Paulo Malschitzky, 200. Joinville-SC, Brazil

Keywords: Nucleic acids; dihydropyrimidinones; Binding constants (K_b).

Highlights

Selected dihydropyrimidinones were synthesized and characterized. TD-DFT calculations were run and their electronic spectra were calculated. DNA interaction tests between them and salmon DNA were carried out and correlations between their electronic structure and the DNA binding sites were addressed.

Resumo/Abstract

Although the Biginelli synthesis is known since 1891, these compounds had their biological properties explored only after 100 years. Some of them are active against malaria, tuberculosis and several other microorganisms. [1] The Biginelli molecule (dihydropyrimidinone) displays similarity with the structures of the nitrogenous base thymine and cytosine thus, presenting a real possibility of π -stacking interaction with the nitrogenous bases of DNA. [2] Four Biginelli adducts were synthesized and characterized by GC-MS, IR and NMR techniques (Figure 1). Spectrophotometric studies of them towards salmon sperm DNA (ssDNA) were carried out at pH 7.0 (HEPES/ACN 50% v/v) and the intrinsic binding constant K_b were calculated for all compounds (between 3800 and 9800 M^{-1}). All compounds exhibited hypochromism (between 19.2 and 76.5%) as well as bathochromism (between 2.4 and 15.4 nm) suggesting those compounds could interact with DNA via partial intercalation and groove binding through the strong stacking between the aromatic chromophores (pyridine rings) and the base pairs of salmon sperm DNA. [3] Aiming to obtain further information about how these compounds interact with DNA, DFT molecular modeling and TD-DFT calculations of the electronic spectra were run. [4] For all compounds, the major frequencies and oscillator strengths were obtained, all transitions were ascribed, and these values are in good agreement with experimental data. Considering that each compound presented a specific spectral variation, it was possible to predict which portion of a selected molecule is interacting with the ssDNA (e.g. Figure 2).

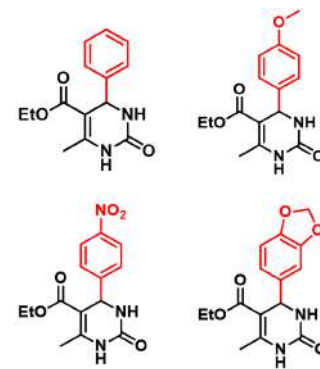


Figure 1. Chemical structures of the Biginelli adducts.

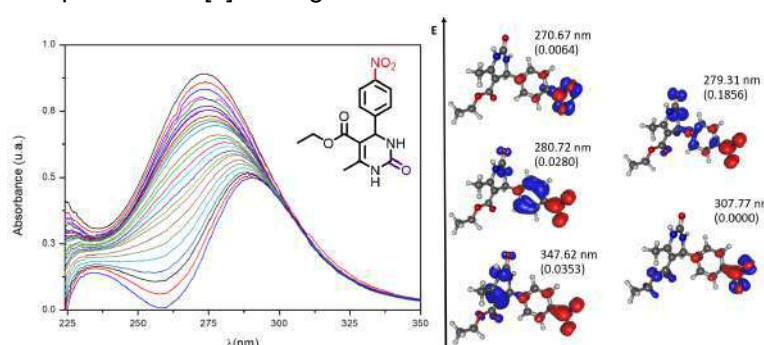


Figure 2. Spectral behavior of the nitro compound and their frontier MOs.

Acknowledgements

UDESC, UFRGS, FAPESC, CAPES and CNPq

References: [1] Suresh and Jagir S. Sandhu. *Reviews and Accounts*, 2010,pg. 66-133. [2] Rajesh S. Bhosale et. al. *Tetrahedron Lett.* 2004, pg.9111-9113. [3] WANG, G.; YAN, C.; LU, Y. *Colloids and Surfaces B: Biointerfaces*, v. 106, p. 28–36, 2013. [4] Gaussian 16 Frisch, G. W. et. al. 2016.

Facile one-step electrodeposition fabrication of amorphous MoS₂ films for hydrogen evolution reaction

Marina Medina (PG),^{1*} Francisco Willian de Souza Lucas (PQ),² Lucia Helena Mascaro (PQ).¹

marina.medinasilva@gmail.com

¹Chemistry Department – DQ, Federal University of São Carlos – UFSCar; ²Chemistry Institute of São Carlos – IQSC, University of São Paulo – USP.

Palavras Chave: Molybdenum sulfide, Electrocatalysis, Hydrogen evolution reaction, Electrodeposition, Amorphous film

Highlights

Amorphous molybdenum sulfide films via one-step electrodeposition fabrication. Electrodeposition on FTO and Ti substrates. Effective electrocatalyst for hydrogen evolution reaction in acidic medium.

Resumo/Abstract

In face of the global energy crisis and the environmental problems caused by the intense use of fossil fuels, is reiterated the needed to develop alternatives energy sources that are clean, renewable and economically attractive. In this sense, the use of hydrogen as an energy source is highlighted. One of its positive characteristics is the non-emission of greenhouse gases in its combustion process. The most used method to produce hydrogen nowadays is the steam methane reforming, which uses high temperatures and produces CO₂. Another alternative is the water splitting process in which the hydrogen evolution reaction (HER) occurs. However, in order to increase the efficiency of HER, the use of a highly active catalyst is necessary. The most efficient catalyst for HER in acidic medium is Pt. However, factors such as high cost and scarcity make it a non-viable material for large-scale use. To overcome this limitation, several Pt-group metal free (PGM-free) materials are being developed and applied as catalyst. Amongst these, MoS₂ has been highlighted by its earth-abundant elements, and chemical stability. Based on all mentioned facts, this work shows the development of MoS₂ films for hydrogen gas obtaining. Firstly, this material was electrochemically synthesized on FTO substrate by cyclic voltammetry (CV), and the effects of precursor solution concentration (NH₄)₂[MoS₄] (2, 4 and 6 mmol L⁻¹) and the number of cycles (13, 25 and 50 cycles) were studied. The optimized electrodeposition

conditions was 25 cycles at 50 mV s⁻¹ in 4 mmol L⁻¹ (NH₄)₂[MoS₄] in 0.1 mol L⁻¹ NaClO₄ solution. This optimized electrodeposition conditions was applied to obtaining a MoS₂ film on Ti substrate. After deposition, the films were characterized by DRX, SEM, and UV-vis, Raman and EDX spectroscopies. The catalytic activity of FTO/MoS₂ and Ti/MoS₂ electrodes to HER was explored by linear sweep voltammetry at 1.0 mV s⁻¹ in 1.0 mol L⁻¹ H₂SO₄ solution. With the resulting polarization curves, Tafel slop was plotted in order to obtaining the Tafel parameters like the Tafel slope, *b* (mV dec⁻¹) and the exchange current density, *j*₀ (A cm⁻²). The deposited films presented high catalytic activity for HER. The overpotential at -10 mA cm⁻² was -262 and -139 mV

Figure 1: (a) Comparison of polarization curves for different materials in 1.0 mol L⁻¹ H₂SO₄ solution at 1.0 mV s⁻¹; (b) Tafel plot of freshly prepared MoS₂ films on FTO and Ti substrates.

for MoS₂/FTO and MoS₂/Ti, respectively, showing that Ti substrate favored the HER, Figure 1(a). Besides that, the MoS₂/Ti sample have shown a lower value of Tafel slope, Figure 1(b), indicating that the electrode needs a lower value of applied energy to increase the density current in a decade.

Agradecimentos/Acknowledgments

FAPESP grant #2018/16401-8, grant #2017/12794-2, FAPESP/CDMF grant #2013/07296-2, FAPESP/GSK grant #2014/50249-8 and CEPID grant #2013/07296-2. CAPES, CNPq #167430/2017-3.

Área: ELE

Nº de Inscrição: 01259

Square wave voltammetry of nitrofurazone in ionic liquids using a carbon fiber microelectrode

Luísa Donatto Chiavassa (PG)^{1*}, Fernanda Ferraz Camilo (PQ)¹, Mauro Aquiles La Scalea (PQ)¹mauro.scalea@unifesp.br; *luisadchiavassa@gmail.com.¹Departamento de Química, Instituto de Ciências Ambientais, Químicas e Farmacêuticas, Universidade Federal de São Paulo, Rua Prof. Artur Riedel, 275, Diadema, SP 09972-270, Brazil

Palavras Chave: Nitrofurazone, Ionic Liquids, Nitro-anion radical, Square wave voltammetry, Reduction Mechanism.

Highlights

Electrochemical behavior study of nitrofurazone by SWV in four ionic liquids, varying the technique parameters and comparing the reduction mechanism in aqueous media and ionic liquids.

Resumo/Abstract

The nitrofurazone compounds show a wide spectrum of biological action and the understanding of their reduction mechanism can contribute to a better comprehension of their biological action. In this sense, the electrochemical reduction of nitrofurazone, which is a prototype compound for the development of new analogues due to its antiprotozoal potential, has been studied through square wave voltammetry (SWV) in four ionic liquids (IL), having a carbon fiber micro-electrode as working electrode. The IL synthesized and used in this work were 1-butyl-3-methylimidazolium bis(trifluoromethanesulfonyl)imide (BMImTf₂N), 1-butyl-3-methylimidazolium tetrafluoroborate (BMImBF₄), 1-ethyl-3-methylimidazolium bis(trifluoromethanesulfonyl)imide (EMImTf₂N) and 1-butyl-2,3-dimethylimidazolium bis(trifluoromethanesulfonyl)imide (BMMImTf₂N). The square wave voltammograms of NF 10.0 mmol L⁻¹ were recorded, being (ΔI_p) the net current peak; (I_f) direct and (I_b) reverse current components. Figure 1 shows a single cathode peak (E_p) in BMImBF₄ and BMImTf₂N (-0.623 V and -0.742 V, respectively). Evaluating the current components decomposition, it is possible to

observe that the net current peaks are composed of direct and reverse components, indicating the existence of a reversible system, as well as registered in an aqueous media. In BMMImTf₂N and EMImTf₂N, two cathodic peaks (E_{p1} and E_{p2}) (-0.926 V; -1.116 V and -0.858 V; -0.997 V, respectively) were recorded. In this case, both peaks also presented direct and reverse current components with the decomposition of the net current, confirming the existence of two reversible systems. Therefore, it is possible to associate the reversible system formation with the nitro-anion radical generation in all cases shown and the probable dianion formation in case of the two latter ones. From the square wave voltammetry parameters variation, the reversible systems, with product and reagent adsorptions on the electrode surface, were confirmed. The estimate number of electrons involved in this reduction confirmed the nitro-anion radical formation followed by its respective dianion.

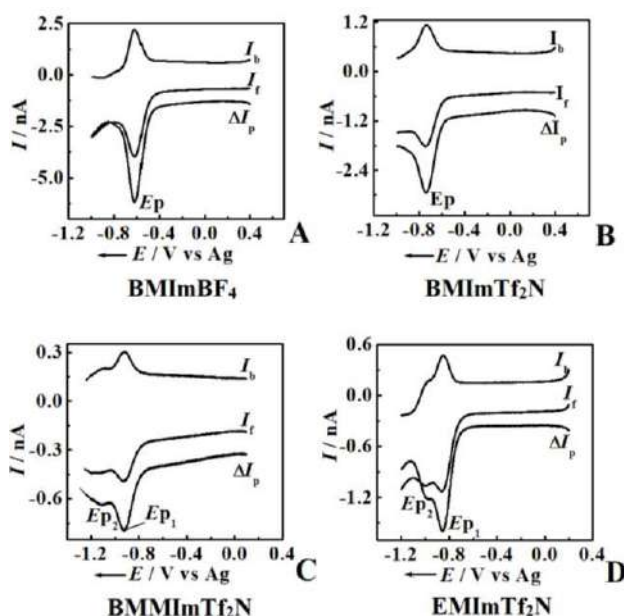


Figure 1 - NF square wave voltammograms in BMImBF₄ (A), BMImTf₂N (B) BMMImTf₂N (C) and EMImTf₂N (D) 10.0 mmol L⁻¹ ($f = 100$ Hz, $\Delta E_s = 2.0$ mV and $a = 50.0$ mV).

Agradecimentos/Acknowledgments



Área: CAT

(Inserir a sigla da seção científica para qual o resumo será submetido. Ex: ORG, BEA, CAT)

Nº de Inscrição: 1260

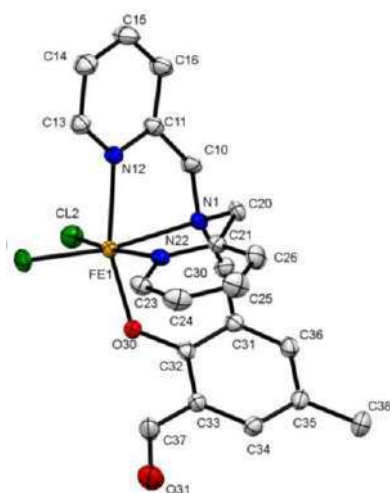
(Inserir o número de inscrição do autor que fez a submissão)

Optimization of catalytic oxidation of cyclohexane and benzyl alcohol mediated by an iron(+3) complex**Fernando R. Xavier (PQ)¹, Andrei F. Vailati (PG)², Ricardo D. Huelsmann (PG)¹, Edmar Martendal(PQ)¹ and Rosely A. Peralta (PQ)^{2*}.****fernando.xavier@udesc.br; rosely.peralta@ufsc.br**¹Departamento de Química, UDESC; ²Departamento de Química, UFSCKeywords: *Catalysis, Iron complex, Organic substrates oxidation***Highlights**

A new iron(+3) complex was synthesized and characterized by a set of analysis including X ray crystallography. Its catalytic activity towards the oxidation of organic substrates such as cyclohexane and benzyl alcohol was evaluated. The best catalytic conditions were found applying multivariate analysis.

Abstract

Methane monooxygenase (MMO) is an enzyme which oxidizes methane into methanol in mild conditions, as well as other hydrocarbons and halocarbons. [1] In this sense, the development of bioinspired catalysts that do not need too much energy and that utilize friendly oxidants, are needed from the environment standpoint. In these past decades, complex-mediated alkane oxidation tests performed by scientists around the world are run in a univariate analysis, e.g., not considering a possible interaction effects between variables.[2] Usually, reaction time, catalyst and oxidant concentrations and temperature are the factors under investigation. In this work we propose an alternative way of systematic data treatment employing a multivariate analysis approach - in which the most important factors are simultaneously evaluated for the homogeneous catalytic oxidation of cyclohexane and benzyl alcohol substrates, promoted by an iron(+3) complex (Figure presented). The complex [Fe(bpmamff)Cl₂] (**1**) was synthesized using FeCl₃ and the 2-[*N*-bis-(2-pyridylmethyl)aminomethyl]-4-methyl-6-



formylphenol (bpmamff)[3] in methanol. Catalytic oxidation of cyclohexane (Cy) and benzyl alcohol (BzOH) promoted by **1** was performed in CH₃CN, where variables optimized were: Reaction time, catalyst and oxidant (H₂O₂) concentration. The final reaction volume was 4 mL and temperature was kept constant at 20 °C. All reactions were monitored by GC-MS and the major products cyclohexanol (CyOH) and cyclohexanone (CyO) for Cy and benzaldehyde (BzCHO) and benzoic acid (BzCOOH) for BzOH were quantified through pre-determined calibration curves. A Box-Behnken design (BBD) was used as a response surface methodology totalling 15 experiments. Three response surfaces were obtained for [H₂O₂] × [1], reaction time × [H₂O₂] and [1] × reaction time using %yield of CyOH or CyO and BzCHO or BzCOOH as the response. After statistical analysis, optimized values for catalyst and oxidant concentration as well as reaction time could be obtained as follows: 2 mol% of **1**, n_{H₂O₂}/n_{Cy} = 17, where n is the number of mol of each substance and reaction time of 13 h. The conversion of Cy to CyOH and CyO were 30% and 10%, respectively. For BzOH the optimized values were 2.1 mol% of **1**, n_{H₂O₂}/n_{Cy} = 12.6 and

reaction time of 15 h. The conversion of BzOH to BzCHO and BZCOOH were 20% and 15%, respectively. These results can be considered excellent, specially comparing the extremely mild condition. Multivariate approach applied has shown to be an excellent alternative for a better understanding of each variable and their interactions for catalysis.

References [1] R.L. Lieberman, A.C. Rosenzweig. *Nature*, 434 (2005) 177. [2] F. T. Ferre, *Polyhedron*. 123 (2017) 293. [3] M. B. Oliveira, et. al. *Inorg. Chem.* 48 (2009) 2711.

Acknowledgments

UFSC, UDESC, FAPESC, CAPES and CNPq

Limonoïds glucosides in persian lime (*Citrus limettioides* T.) seeds

Tairini R. da Silva (PG),¹ Antonio Jorge R. da Silva (PQ),²

tairini_silva@yahoo.com;

¹Instituto de Pesquisas de Produtos Naturais, UFRJ;

Palavras Chave: *Citrus*, Limonoïds Glucosides, Persian lime; Seeds; Supercritical fluid extraction

Highlights

Persian lime seeds (*Citrus limettioides*) were extracted with CO₂ using supercritical fluid extraction. Six limonoïd glucosides were identified by HPLC/MS/MS in the negative mode.

Resumo/Abstract

The processing of citrus fruits generates tons of waste, composed of peel, seeds and pulps. Moreover, most of this waste is disposed incorrectly to the environment. Extraction of the oil from citrus fruit seeds may be an alternative to aggregate value to the waste of Citrus processing industry. Citrus seed oil is basically composed of acylglycerides (mostly triacyl), free fatty acids, hydrocarbons, sterols and non-lipid compounds, such as limonoïds. Limonoïds are highly oxygenated tetracyclic triterpenoids present in fruits of the genus *Citrus*. In the present study, we investigated a presence of limonoïd glucosides in Persian lime seeds (*Citrus limettioides* T.). In order to obtain the oil of lime seed, supercritical fluid extraction was carried out. The extraction parameters used were 483 bar pressure, 50 °C temperature, flow of 40 g/min. of supercritical CO₂, for 60 minutes. The extracted oil was partitioned using hexane: MeOH: H₂O (2:1:1). The polar fraction was evaporated and partitioned using CH₂Cl₂ e H₂O (1:1). The aqueous fraction was analyzed by high performance liquid chromatography interfaced to electrospray ionization mass spectrometry (HPLC-ESI-MS) in negative mode. Six limonoïd glucosides were detected in the aqueous fraction, as shown in table 1, identified as: limonin 17-β-D-glucopyranoside (LG), deacetyl nomilinic acid 17-β-D-glucopyranoside (DNAG), deacetyl nomilinic 17-β-D-glucopyranoside (DNG), nomilinic acid 17-β-D-glucopyranoside (NG), nomilinic acid 17-β-D-glucopyranoside (NAG), obacunone 17-β-D-glucopyranoside (OG).

Table 1 - Identification of the limonoïds glucosides present in the aqueous fraction

| | Retention time (min) | Deprotonated molecular ion | Expected mass | MS/MS | Molecular Formula | Probable limonoïd |
|---|----------------------|----------------------------|---------------|--------|---|-------------------|
| 1 | 24.99 | 649.25 | 650.674 | 605.25 | C ₃₂ H ₄₂ O ₁₄ | LG |
| 2 | 25.28 | 669.33 | 670.705 | 609.33 | C ₃₂ H ₄₆ O ₁₅ | DNAG |
| 3 | 26.11 | 651.42 | 652.2731 | 565.17 | C ₃₂ H ₄₄ O ₁₄ | DNG |
| 4 | 28.4 | 693.42 | 694.727 | 565.08 | C ₃₄ H ₄₆ O ₁₅ | NG |
| 5 | 28.88 | 711.33 | 712.742 | 607.17 | C ₃₄ H ₄₈ O ₁₆ | NAG |
| 6 | 29.31 | 633.42 | 634.675 | 427.17 | C ₃₂ H ₄₂ O ₁₃ | OG |

The criterion for the identification of these limonoïds was based on the values of the deprotonated molecular ions and the fragmentation pattern as seen by MS/MS. This is the first report of the presence of limonoïd glucosides in persian lime seeds.

Agradecimentos/Acknowledgments

CNPq, Capes, FAPERJ and UFRJ.

Área: TEO

Nº de Inscrição: 01262

Estudo Computacional de Parâmetros de Ressonância Magnética Nuclear de ^{99m}Tc com Potencial Aplicação Radiofarmacêutica

Taís F. C. B de Andrade (PG),^{1*} Célia F. Guerra (PQ),² Hélio F. dos Santos (PQ),³ Diego Paschoal (PQ).¹

tais.andrade.ufrj@gmail.com

¹Núcleo de Química Teórica e Computacional de Macaé, Campus UFRJ-Macaé, UFRJ, Macaé, Brasil; ²Department of Theoretical Chemistry and Amsterdam Center of Multiscale Modeling, Vrije Universiteit, Amsterdam, Holanda; ³Núcleo de Estudos em Química Computacional, Departamento de Química – ICE, Campus Universitário, UFJF, Juiz de Fora, Brasil.

Palavras Chave: Radiofármacos, Tecnécio, Química Computacional, Ressonância Magnética Nuclear.

Highlights

Computational Study of Nuclear Magnetic Resonance Parameters of ^{99m}Tc with Potential Radiopharmaceutical Application. Theoretical prediction of ^{99m}Tc chemical shift using DFT calculations.

Resumo/Abstract

O ^{99m}Tc (^{99m}Tc) é o elemento mais utilizado em radiofármacos empregados em medicina diagnóstica, onde é aplicado como marcador radioativo. Pode existir em 9 estados de oxidação, o que lhe confere a possibilidade de formar complexos de coordenação com numerosos agentes quelantes, assumindo geometrias distintas.^[1] A espectroscopia de Ressonância Magnética Nuclear (RMN) é amplamente empregada para sondar os ambientes químicos dos complexos de ^{99m}Tc . O núcleo do ^{99m}Tc possui uma ampla

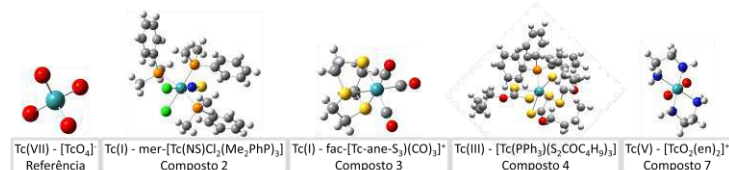


Figura 1: Complexos de Tc selecionados para o presente estudo

faixa de deslocamento químico (~9000ppm), sendo muito sensível à natureza dos ligantes.^[2,3] Neste contexto, a Química Computacional pode auxiliar na caracterização de moléculas através da espectroscopia RMN. Este estudo visa uma análise dos aspectos relevantes, tais como nível de teoria, função de base, efeitos

relativísticos e efeitos do solvente, envolvidos na previsão teórica dos parâmetros de RMN de complexos de tecnécio. Foram selecionados 5 complexos de ^{99m}Tc , Figura 1, cujos dados experimentais de geometria e deslocamento químico são encontrados na literatura. Inicialmente, a influência da geometria na previsão do deslocamento químico do ^{99m}Tc foi avaliada. Para isso, as estruturas foram otimizadas no nível GGA PBE, utilizando a função de base TZP (metal e ligantes) na sua forma completa e utilizando um ECP para descrever os elétrons mais internos. Os cálculos foram realizados no estado gasoso e com a inclusão dos efeitos do solvente (COSMO). Além disso, foram realizados cálculos não relativísticos e relativísticos usando aproximação ZORA. Todos os cálculos foram realizados no programa ADF 2017. Posteriormente, para cada estrutura obtida foram realizados cálculos de RMN no nível COSMO-PBE-SO-ZORA/TZP//. Os desvios relativos à estrutura ficaram em torno de 2%, com relação ao experimental, porém para o RMN os desvios chegaram à 200%, Figura 2. Os maiores desvios foram encontrados em compostos com carga. Assim, novos cálculos considerando o contração desses compostos serão realizados. O projeto está em fase inicial. Outros aspectos que afetam a previsão teórica do deslocamento químico do ^{99m}Tc ainda serão avaliados.

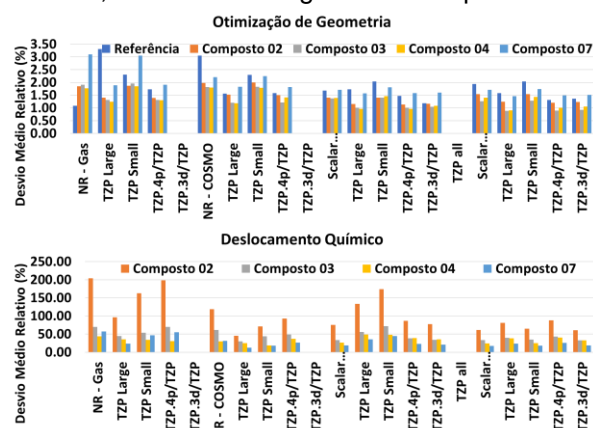


Figura 2: Resultado preliminar

Referências

[1] *J. Label. Compd. Radiopharm.* 2017 60 502-520.

[2] *Inorg. Chem.* 2016 55 8341-8347.

[3] *Magn. Reson. Chem.* 2008 46 S36-S44.

Agradecimentos/Acknowledgments

Os autores gostariam de agradecer às agências de fomento CAPES, FAPERJ e CNPq pela ajuda financeira.

Synthesis of unsaturated bicyclic lactones using sulfur ylides

Tharik Azis Castrequini Dahwache (IC),¹ Anees Ahmad (PQ),¹ Antonio Carlos Bender Burtoloso (PQ),^{1*}

tharik.dahwache@usp.br; antonio@iqsc.usp.br

¹São Carlos Institute of Chemistry University of São Paulo, IQSC-USP, CEP 13560-970.

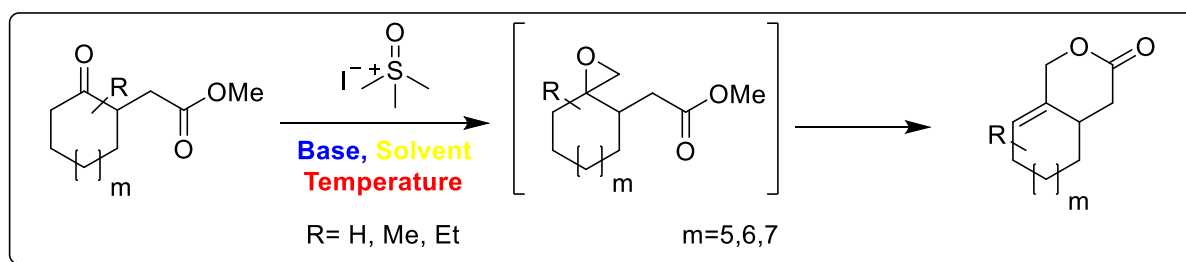
Keywords: Sulfur ylides, Corey-Chaykovsky epoxidation, Lactones, iridoids

Highlights

A short synthesis of unsaturated bicyclic lactone skeleton using sulfur ylides is reported here. A one-pot reaction involving i) epoxidation ii) epoxide opening and iii) lactonization to obtain unsaturated lactone.

Resumo/Abstract

Lactones core skeleton are frequently seen in natural products and pharmaceutically important compounds. More specifically, they are found in iridoids, a type of bicyclic monoterpenoids that not only exhibits wide range of biological activities such as anti-inflammatory and anti-tumor agents but also regulates cardiovascular activities.¹⁻³ Multi-steps protocols (3 to 5 steps) are described in literature for the synthesis of these kind of skeletons in 34% overall yield.^{4,5} Herein, we describe a short synthesis for the bicyclic lactones in one-pot employing sulfur ylide. The epoxide undergoes base assisted ring-opening which upon cyclization led to the desired lactone. So far, we have optimized Corey-Chaykovsky epoxidation reaction condition that enabled us to isolated epoxide in 35% and unsaturated lactone in 8% yield. Studies are in progress to improve overall yield of lactone.



1. Dinda, B.; Debnath, S.; Harigaya, Y., *Chem. Pharm. Bull.*, **55**, 159-222, 2007. 2. Dinda, B.; Debnath, S.; Harigaya, Y., *Chem. Pharm. Bull.*, **55**, 689-728, 2007. 3. Dinda, B.; Chowdhury, D. R.; Mohanta, B. C., *Chem. Pharm. Bull.*, **57**, 765-796, 2009. 4. Barrero, A. F.; Arseniyadis, S.; Herrador, M. M.; Quilez del Moral, J. F.; Arteaga, J. F.; Sanchez, E. M., *SYNLETT*, **36**, 591-594, 2005. 5. Sánchez, E. M.; Arteaga, J. F.; Domingo, V.; Quílez del Moral, J. F.; Herrador, M. M.; Barrero, A. F., *Tetrahedron*, **64**, 5111-5118, 2008.

Agradecimentos/Acknowledgments

The authors would like to acknowledge São Paulo Research Foundation (FAPESP), for research financial support (2017/23329-9) (2013/18009-4) and fellowship grant (2018/17244-3) to T.A.C.D.

Área: EDU

Nº de Inscrição: 01264

O ensino de Química no contexto da educação indígena: Produção de tinta corporal de urucum

Lorrana N. N. Nóbrega (PG)^{1*}; Claudio R. M. Benite (PQ)¹; Rainny S. G. de Paula (IC)²; Alisson G. F. de Souza (IC)²

nobregalnn@gmail.com; claudiobenite@ufg.br; rainnysgpaula@gmail.com; alissongfsouza@gmail.com

¹Laboratório de Pesquisas em Educação Química e Inclusão - LPEQI, ²Universidade Federal de Goiás, ³Pontifícia Universidade Católica de Goiás.

Palavras Chave: Educação indígena, Ensino de Química, Extração por solvente, Saberes indígenas, Inclusão escolar.

Chemistry education in the context of indigenous culture: production of urucum body paint

This work aims the teaching of chemical concepts about solvent polarity for indigenous students from an experimental chemistry of the extraction of urucum pigment. The results indicate that the students were able to relate the concepts of polarity with the extraction of the bixin pigment.

Resumo/Abstract

O ensino de Química no contexto da educação indígena deve preceder a construção de um espaço educativo em que se contemplem as relações dialógicas entre os conhecimentos científicos e as especificidades interculturais¹. Com esta premissa, a experimentação se apresenta como uma importante ferramenta de mediação do conhecimento químico possibilitando, segundo Vygotsky², a atribuição de novos significados que surgem das interações sociais intermediadas por meio de instrumentos e signos multiculturais. Contendo elementos de pesquisa-ação, esta investigação surge de uma necessidade da prática docente para a inclusão escolar de estudantes indígenas e propõe utilizar a extração da tinta de urucum para discutir as relações dos saberes e práticas culturais presentes no preparo do corante. Deste modo, o experimento intitulado “Produção de tinta corporal de urucum no ensino de Química” foi realizado numa turma de alunos indígenas do curso de Licenciatura Intercultural de uma universidade pública. O objetivo da aula foi ensinar conceitos químicos relacionados à polaridade dos solventes (água e óleo) na extração do pigmento Bixina, presente no fruto do urucum. Um extrato da discussão entre o professor em formação continuada (PG) e os alunos (A) é apresentado a seguir:

PF: Qual o método que vocês costumam utilizar para a extração da tinta de urucum?

A3: Pra tirar a tinta da frutinha do urucum, poe ele no fogo e coloca também (à mistura das sementes e água) óleo de babaçu, conforme a mistura [...] e daí depois, na parte desse processo de separação físico (decantação), de “apurar”, punha pra secar o óleo ao sol, quinze dias.

PF: Porque usam o óleo de babaçu?

A3: Sai mais tinta...na mistura.

PF: Então, a tinta tem mais afinidade química pela água ou pelo óleo?

A3: Óleo.

Os resultados apontam que os saberes produzidos no senso comum permitem A3 distinguir o “óleo de babaçu” como uma substância fundamental na extração do pigmento de urucum, apesar de não identificar a similar polaridade entre o solvente e o corante, como justificativa das interações químicas ocorridas na produção da tinta. Deste modo, ao se apropriar das ferramentas culturais na ação mediada produzida com A3, PF estabelece o elo entre o conhecimento químico e os saberes culturais indígenas envolvidos no processo de extração do pigmento, o que possibilita ao estudante a significação do conceito de polaridade, a partir da atribuição de sentido sobre a “afinidade química” do pigmento e o óleo. Concluímos que o experimento sobre a extração química do pigmento do urucum favoreceu a participação dos estudantes na aula prática e a construção de significados entre os saberes indígenas e os conhecimentos da ciência.

Agradecimentos/Acknowledgments

Ao CNPq.

1.Pinheiro, P. C. A Construção do Sítio Ciência na Comunidade: Antecedentes, Fundamentos, Narrativas Híbridas e Conteúdo Epistemológico. *Rev. Bras. Pesqui. em Educ. em Ciências* (2017). doi:10.28976/1984-2686rbpec2017171243

2.Vygotsky, L. A formação social da mente Vygotsk. *Funcionários da Seção Braille da BPP* (1998).

Área: QPN

(Inserir a sigla da seção científica para qual o resumo será submetido. Ex: ORG, BEA, CAT)

Nº de Inscrição: 01265

(Inserir o número de inscrição do autor que fez a submissão)

Estudo das raízes de *Citrus sinensis* em fases ontogenéticas após infecção por *Candidatus Liberibacter asiaticus*

Mayara G.F. da Silva (PG),^{1*} Maria Fátima das G.F. da Silva (PQ).¹

may.gobetti@gmail.com

¹Departamento de Química, UFSCar

Palavras Chave: Quimiometria, Espectrometria de massas de alta resolução, Huanglongbing (HLB), *Citrus sinensis*, *Candidatus Liberibacter asiaticus*.

Highlights

Study of *Citrus sinensis* roots in ontogenetic phases distinct from *Candidatus Liberibacter asiaticus* infection. Analyses of the roots from plants infected with HLB and healthy by UPLC-MS showed that these respond by producing a greater amount of coumarins in response to the presence of the bacterium, as defense.

Resumo

Para este estudo todas as plantas utilizadas foram obtidas e desenvolvidas no Fundo de Defesa da Citricultura (Fundecitrus) em Araraquara – SP, por meio de enxertia de borbulhas oriundas de plantas madura e juvenil, que após 6 meses de crescimento foram inoculadas com borbulhas infectadas e posteriormente coletadas em quadruplicatas, 30 dias após a inoculação.

As raízes foram secas em estufa de circulação a 37 °C durante 5 dias e trituradas em moinho analítico para a obtenção dos extratos: 50 mg material vegetal → 2 mL de MeOH:H₂O (1:1) → homogeneizador (6000 rpm/min - 90 s) → centrifuga (10000 rpm – 10 min) → sobrenadante filtrado (PTFE MILLIPORE; 0,45µm poro; Ø = 13 mm) → secagem do solvente à vácuo (SpeedVac) → análises cromatográfica (1 µg/ml).

Para as análises cromatográficas utilizou-se um cromatógrafo Acquity UPLC H-Class (Waters), acoplado a um espectrômetro de massas Xevo G2-XS (Waters), e analisador híbrido Quadrupolo – Tempo de Voo (Q-Tof), na USP em São Carlos. Coluna Waters Acquity UPLC BEH C-18 (2.1x100 mm), com tamanho de partículas de 1.7 µm. A corrida cromatográfica foi realizada no modo reverso com gradiente de eluição, fase orgânica acetonitrila (Tabela 1), fluxo 0,5 mL/min e volume de injeção de 1,0 µL. Trabalhou-se no modo positivo, voltagem do capilar +0.5 kV, voltagem do cone 30 V, temperatura de dessolvatação 450 °C, fluxo do gás de dessolvatação 750 L/h, energia de colisão 20-30V e faixa de massa de 185 à 1000 Da.

Tabela 1 - Condições cromatográficas utilizadas para UHPLC-MS (linha A: H₂O e linha B: ACN).

| Tempo (min) | Linha A (%) | Linha B (%) |
|-------------|-------------|-------------|
| 0 | 97 | 3 |
| 4,3 | 83 | 17 |
| 13,4 | 35 | 65 |
| 15,5 | 15 | 85 |
| 18,3 | 15 | 85 |
| 18,9 | 97 | 3 |
| 20 | 97 | 3 |

Tabela 2 - Média das áreas das quadruplicatas de raízes de *Citrus sinensis*.

| | Juvenil | Madura | Varição |
|---------------|-----------|-----------|---------|
| Xantiletina | 946522,5 | 1993720,0 | + 2,106 |
| Suberenona | 2188482,8 | 3826564,3 | + 1,749 |
| Xantoxiletina | 487662,5 | 1915833,8 | + 3,929 |
| Nordentatina | 128065,5 | 302340,0 | + 2,361 |

Quatro cumarinas apresentaram um aumento na sua biossíntese quando comparadas às plantas sadias e infectadas (dados obtidos através das áreas dos picos cromatográficos). Os dados também mostram que as plantas maduras produzem mais que as juvenis (Tabela 2), podendo indicar que a bactéria *Candidatus Liberibacter asiaticus* tem uma maior dificuldade em se desenvolver em tecidos juvenis.

Agradecimentos

Agradeço a FAPESP pela bolsa de estudos concedida, a Fundecitrus, a UFSCar e a USP.

Antiparasitic Activity of the *P. myrtooides* O. Berg and Cytotoxic Effects the Caryophyllene Oxide and Trans- β -Caryophyllene Against HeLa

Francisco M. F. Dias (IC)^{1*}; Renieidy F. C. Dias (PG)^{2**}; Mylla S. da Costa (PG)²; Derli R. C. Dantzger (IC)³; Francisco J. T. Aquino (PQ)², Claudio V. da Silva (PQ)².

Universidade Estadual Vale do Acaraú - Campus Cidao, Endereço: Av. Dr. Guarani, nº 317, Bloco da Química, Bairro: Derby Club, Sobral- CE- Brasil CEP: 62010-305¹, Universidade Federal de Uberlândia², Universidade do Oeste Paulista (UNOESTE), R. José Bongiovani, 700 - Cidade Universitária, Pres. Prudente - SP, Brasil CEP:19050-920³

matheusd47@gmail.com*, flavia.clemente@ufrgs.br**

Palavras Chave: HeLa, Antiparasitic, Trans- β -Caryophyllene, *Psidium myrtooides* O. Berg, Essential Oil

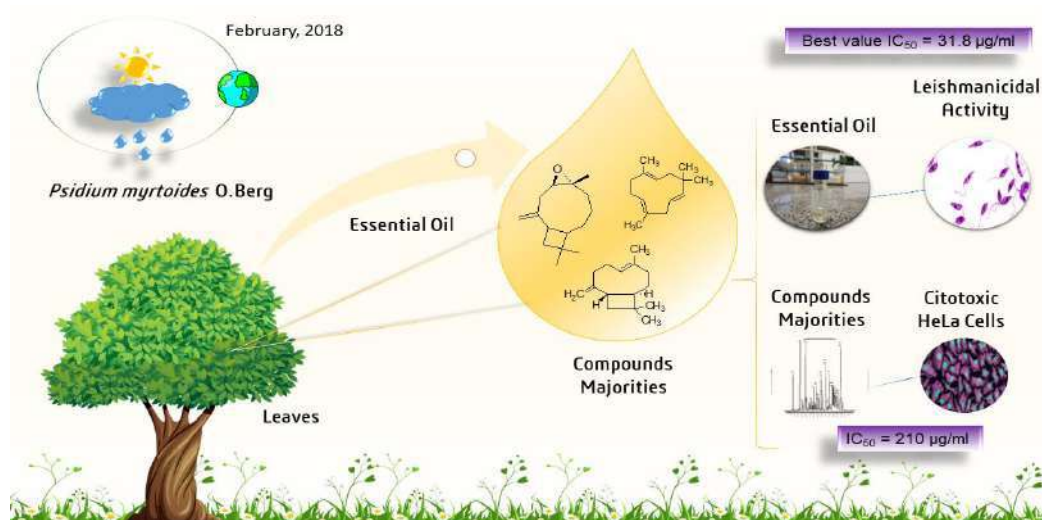
Highlights

This study was to evaluate leishmanicidal activity of the essential oil and cytotoxic effects the Caryophyllene Oxide and Trans- β -Caryophyllene Against HeLa.

Resumo/Abstract

The aim of this work was leishmanicidal activity of essential oils obtained from fresh leaves (EOFL) and dry leaves in the rainy season (EODL). The results showed that *Psidium myrtooides* O. Berg volatile oil (EOFL) at the concentration of $31.8 \pm 5.74 \mu\text{g} / \text{mL}$ was the most effective on the trypomastigote forms of *L. amazonensis*, followed by volatile oil (EODL) ($55.7 \pm 7.86 \mu\text{g} / \text{mL}$). Also, this study was aimed at evaluated *P. myrtooides* O. Berg essential oil bioactive compounds potential in inhibiting the proliferation of cervical cancer cells (HeLa). We evaluated the cytotoxic effects of the Caryophyllene Oxide and Trans- β -Caryophyllene on HeLa tumor cell lines. The trans- β -Caryophyllene showed the best result with $\text{IC}_{50} = 210 \mu\text{g}/\text{ml} \pm 25$ against HeLa and Caryophyllene Oxide not showed cytotoxic effects. Fig. 1 shows the scheme of the plant species, majorities compounds of the essential oil obtained from the leaves and their activities biological.

Figure 1- Scheme of the *Psidium myrtooides* O. Berg activities



Agradecimentos/Acknowledgments



One-pot synthesis of novel tetrahydro- β -carboline derivatives bearing a phosphonate group as potential antileishmanial agents

Aline Rufino de Oliveira (PG),¹ Bruno T. Valeze (IC),¹ Paula Baréa (PG),¹ Willian F. da Costa (PQ),¹ Nelson L. C. Domingues (PQ),² Maria Helena Sarragiotto (PQ).^{1*} alineoliveira_qi@hotmail.com

¹ Departamento de Química, UEM. ² Departamento de Química, UFGD.

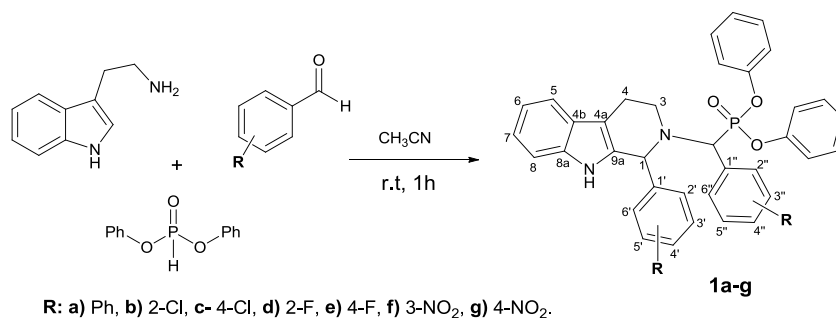
Palavras Chave: multi-component synthesis, tetrahydro- β -carboline, organophosphorus, antileishmania activity.

Highlights

A series of substitutedphenyl-(1-substitutedphenyl-1,3,4,9-tetrahydro- β -carboline)-methylphosphonates was synthesized by the Kabachnik-Fields reaction of tryptamine, aromatic aldehydes and diphenyl phosphite.

Abstract

Leishmaniasis is a parasitic disease caused by protozoa of the *Leishmania* genus, being endemic in 98 countries, affecting approximately 12 million people worldwide. Currently, the treatment of leishmaniasis includes pentavalent antimonials, amphotericin B, miltefosine and pentamidine.¹ However, these drugs present several disadvantages, such as toxicity, high costs and prolonged treatment. Therefore, there is a need to develop new more effective and less toxic antileishmanial agents. In our previous work we have demonstrated that 1-phenylsubstituted-tetrahydro- β -carboline derivatives have shown potent antileishmanial activity.^{2,3} In continuing our search for new antileishmanial agents based in this class of compounds, we planned to incorporate a phosphonate moiety at the tetrahydro- β -carboline nucleus, expecting to obtain more potent antileishmanial compounds. Compounds containing the atom of phosphorus plays an important role in medicinal chemistry, being present several drugs, including miltefosine, an alkylphospholipid used in the treatment of leishmaniasis. Thus, in this work we described the synthesis of the new 1-phenylsubstituted-tetrahydro- β -carboline derivatives (**1a-g**), bearing a methylphosphonate group at N-2. The derivatives were prepared from the *one pot* Kabachnik-Fields reaction of commercial tryptamine, aromatic aldehydes with different substituents at the benzene ring, and diphenyl phosphite (**Scheme 1**). Among the reactional conditions tested, the better efficiency was found using acetonitrile as solvent, room temperature and time of 1 hour, which afforded the derivatives in 75-90% yield. Surprisingly, the methodology employed led to the formation of the tetrahydro- β -carboline skeleton and introduction of methylphosphonate group in the same reaction. The structures of the synthesized compounds were confirmed with basis on their ¹H and ¹³C NMR spectra, mainly by the signals relative to the tetrahydro- β -carboline for H₁/C₁ at δ_{H} 4.87/ δ_{C} 62.7; H-4 (CH₂) at δ_{H} 4.09/ δ_{C} 46.5; H-3 (CH₂) at δ_{H} 2.92/ δ_{C} 21.7; N-H (indol) at δ_{H} 10,12), besides the signals characteristic of the phosphonate group at δ_{H} 4.43 - 4.51 (d, J_{H-P} ~24 Hz, N-CH₂-P) and δ_{C} 62.3-60.5 (d, J_{C-P} ~135 Hz, N-CH₂-P).



Scheme 1: Synthetic route for preparation of the tetrahydro- β -carboline derivatives **1a-g**.

In summary, our results showed that the *one pot* Kabachnik-Fields reaction is an efficient method for the preparation of novel 1-phenylsubstituted tetrahydro- β -carboline derivatives bearing a methylphosphonate group, leading to the desired compounds in good yields, mild conditions and short reaction time.

¹Mitropoulos, P. *et al.*, *J. Am. Acad. Dermatol.* **2010**, 309-322. ²Tonin, L.T.D. *et al.*, *Eur J Med Chem.* **2009**, 1745-1450. ³Volpato, H. *et al.*, *Evid Based Complement Alternat Med.* **2013**, 1-7. ⁴Oliveira, A. R. *et al.*, *Synthesis.* **2016**, 4489-4494.

Agradecimentos/Acknowledgments

DQI-UEM, CAPES, CNPq, Fundação Araucária

Copper Ferrite (CuFe_2O_4) and the adsorptive activity for the removal of the pesticides Ivermectin and K-Othrine in a fixed-bed column

Amanda A. Batista (IC),¹, **Lara L. F. Oliveira** (IC),¹ **Lara C. Costa** (IC),¹ **Marilene J. Santos** (IC)¹, **Luis F. Soares** (PQ).^{1*}

amanda_ab1@hotmail.com; lfoares@ufsj.edu.br

¹Department of Biochemistry, UFSJ/CCO.

Keywords: Copper ferrite, Adsorption, Ivermectin, K-Othrine.

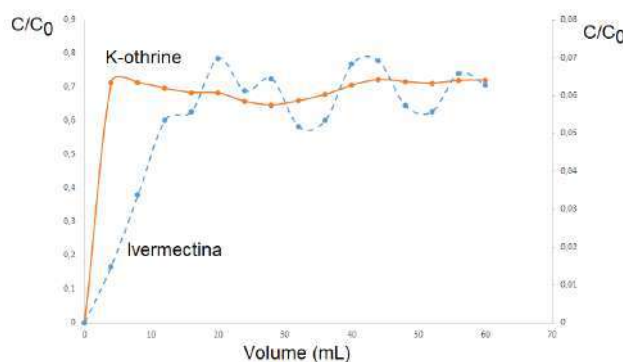
Highlights

In order to control pesticide residues present in the water, some analytical methods were adopted. Spinel ferrite, which is a magnetic nanoparticle, was used and its adsorptive capacity was measured.

Resumo/Abstract

Ivermectin belongs to the family of avermectins, and it is indicated for large animals such as horses and cows, and can be used also in humans to control infections caused by worms and parasites such as roundworm, scabies and lice, and restricted in some breeds of dogs and cats also in the treatment of scabies due to its toxicity. K-Othrine is a pyrethroid insecticide that must be diluted in water and used to control infestations of insects, ants, cockroaches, fleas, ticks, among others. However, when used recklessly, they can lead to contamination of water resources and soils, both of which may be lethal to some living beings. One of the recent applications of ferrites is the adsorption of potentially toxic substances such as drugs, dyes and heavy metals. This process is of extreme environmental importance opening up a new field of research in quest of materials that perform a high efficiency in this decontamination to diminish or extinguish the effects that these pesticides can cause to the environment and human health. This work had as objective to study the adsorption of the antiparasitic Ivermectin and of the insecticide K-Othrine through chromatographic columns containing CuFe_2O_4 . Ferrite was synthesized using the co-precipitation method (750°C) and characterized by infrared (KBr) and the columns were mounted at approximately about 3,0000 and 6,0000 g. The concentrations of the solutions were $1\ \mu\text{g}/\text{mL}$ Ivermectin and $25\ \mu\text{g}/\text{mL}$ K-Othrine. Aliquots of 4.00 mL were read at 240 nm (Ivermectin) and 270 nm (K-Othrine) on the UV-visible spectrophotometer. Figure 1 shows the adsorption column rupture curves of the solutions of Ivermectin and K-Othrine. CuFe_2O_4 adsorbed 94% relative to Ivermectin concentration with mean C/C_0 ratio of 0,055 (SD = 0.00643) and 30% relative to K-Othrine with mean C/C_0 of 0,695 (SD = 0.0288). Comparing the adsorptive activity of the compounds, it can be seen that Ivermectin presented higher adsorption than K-Othrine.

Figure 1: Column rupture curves containing copper ferrite ($m = 6,0000\ \text{g}$) for solutions of Ivermectin ($1,00\ \mu\text{g}/\text{mL}$) a) and K-othrine ($25\ \mu\text{g}/\text{mL}$)



Agradecimentos/Acknowledgments

To FAPEMIG and UFSJ.

Área: MAT*(Inserir a sigla da seção científica para qual o resumo será submetido. Ex: ORG, BEA, CAT)***Nºde Inscrição: 01270***(Inserir o número de inscrição do autor que fez a submissão)*

The influence of organic stabilizers on photocatalytic activity of titania

Daniel Esteves Bessa Moreira (IC),¹ Bruno A. T. Menezes (PG),¹ Juliana Fonseca de Lima (PQ)¹
daniel.estevesbm@gmail.com;

¹Departamento de Química Geral e Inorgânica, Instituto de Química - UERJ, campus Maracanã, Rio de Janeiro – RJ.
 Palavras Chave: Nanomaterials, Photocatalysis, Cerium, Dyes).

Highlights

Different types of nanometric titania, TiO₂, were synthesized via sol-gel method using three types of organic linkers to enhance photocatalytic activity. The stabilizers were lactic acid, acetylacetone and glycerol. The photocatalytic tests were made by the degradation of methylorange and methylene blue at room temperature under visible and UV lamps. The more decolorization rate the better is the photocatalytic behavior. This work aims to improve the well known propriety of titania as a photocatalyst.

Resumo/Abstract

Recently, the society had been suffering a lot with the environmental contamination from pollutants species such as pesticides and organic dyes. The inadequate discard of dyes can contaminate aquatic environment, for example, forming layers that difficult the solar rays penetration into deep waters and decreasing photosynthesis in the media, resulting in less aquatic life.

Knowing that, today there is a necessity to propose new methods to reduce the pollutants level on the environment. Photocatalysis is an Advanced Oxidation Process (AOP) that works when a required amount of energy is given to the photocatalyst, forming the electron/hole pair. Usually, researchers use titanium dioxide, known as titania.

In this work, nanostructured TiO₂ were synthesized with different amount of Cerium in mol. Cerium has a optimum redox potential ($E^0 = +1,34$ V) improving the photocatalytic activity of titania. They key of the work was the stabilizers, which was lactic acid, acetylacetone and glycerol. The mixed oxides were prepared by the sol-gel method with a reflux time of approximately 24 hours (Figure 1).

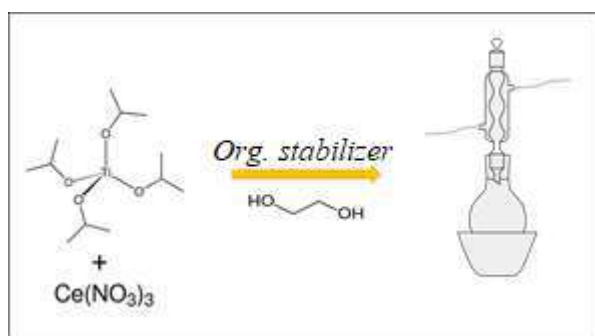


Figure 1: Synthesis of materials

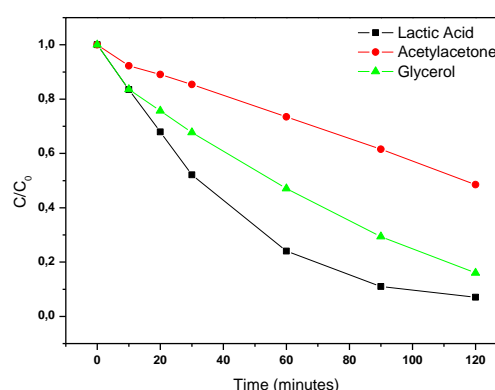


Figure 2: Dye decolorization.

The materials were characterized by XRD, SEM, Raman and DRS. The photocatalytic activity was measured by the degradation of two dyes separately and the UV-Vis spectrum was collected for each material. The decolorization rate reached values up to 90% for methylorange for lactic acid as stabilizer under UV radiation. The effect of the stabilizer change the photocatalytical properties of the material.

[1] A. Houas, Appl. Catal. B Environ., 2001, 31, 145–157.

[2] Martins, T. S.; Hewer, T. R. L.; Freire, R. S.; Quím. Nova, 30(8), 2001 – 2006, 2007

[3] E. L. Moreira, Dissertação de Mestrado, Universidade do Estado do Rio de Janeiro, 2012.

Área: ORGNº de Inscrição: 01271

Mid Infrared Spectroscopy (mid-FTIR) and Chemometrics Tools for Rapid and Cheap Analysis of Peppers (*Capsicum sp.*)

Mariane S. Silva (IC),¹ Marcos M. Martins (IC),¹ Luís S. R. Vale (PQ),¹ Fabiana A. Marques (PQ).^{1*}

marianess97@hotmail.com; fabiana.marques@ifgoiano.edu.br

¹ Departamento de Química IF Goiano – Campus Ceres.

Keywords: *Capsicum sp.*, Mid-Fourier transform infrared, Multivariate Analysis.

Highlights

Presence of functional groups evidence presence higher capsaicin content. Results showed that Mid-FTIR spectroscopy combined with multivariate analysis can be efficient for discrimination of peppers.

Abstract

The peppers has been recognized to have antioxidant activity due to the presence of metabolites with well-known antioxidant capacities such as ascorbic acid, vitamin E, provitamin A, carotenoids, xanthophylls, and phenolic compounds, which are present in connection with sugars. In addition the class of compounds responsible for pungency are the capsaicinoids caused by the direct effect of capsaicin and its analogues on the pain receptors in the mouth and throat. Due to the high complexity of these samples, sophisticated analysis and separation techniques have been used to determine the characteristic metabolites of pepper. In particular the high efficiency chromatography coupled with mass spectrometry. However, these techniques are expensive, complicated, laborious, destructive, and time-consuming methods that require skilled personnel and large amounts of solvents and reagents. Fourier Transform Infrared Spectroscopy (Mid-FTIR) is a method that has been proposed and proven to be an excellent alternative to traditional methods due to the low cost, response velocity, simple handling. **Mid-FTIR spectra acquisition.** Spectra were obtained using a Shimadzu® IR Affinity-1 Spectrometer, for this 1 mg of sample (*Capsicum baccatum*, *Capsicum frutescens*) was macerated with 50 mg of bromide sodium FTIR grade, divided into to (Top Seed), and the strain IFET 1572 developed in the BAG (Active Germplasm Bank) of the Goiano Federal Institute - Campus Ceres, in addition to a lineage also developed in the BAG of the chili pepper. The mid-infrared spectrum of each sample was obtained in duplicate at room temperature over the wavenumber interval of 4000 - 400 cm^{-1} ; each spectrum was an average of 64 scans at a resolution of 4 cm^{-1} and recorded as transmittance units. **Multivariate analysis.** The relationships between samples were obtained through of the analysis for principal components (PCA) using XLSTAT® software, supplement of Excel. The dataset were submitted transformation (log) and then normalized through the pare to scaling. The mean infrared bands were assigned using data from the literature (Chen and Wu, 2009). The main evidences were: 3600 - 300 cm^{-1} (OH, stretching of water), two peaks at 2950-2800 cm^{-1} referring to the CH stretching bound of methylene groups and the peaks due to carbonyl presence (C = O) at 1750 - 1710 cm^{-1} range. In the region called the fingerprint region, the characteristic amide band at 1650 cm^{-1} C = O stretching, and the band of OH stretching overtone of water at the same range 1650 cm^{-1} can be observed. The PCA demonstrated the formation of two groups, which were divided between the commercial samples and the samples developed on the Ceres campus. This was an important evidence that the technique is useful for discrimination between cultivars. The peaks that contributed most to this separation were reflected to C = O signals of amides, indicating that the level of capsaicin between the samples was different. Thus, this method may contribute to the rapid characterization of unknown cultivars in terms of level of pungency and further studies will be carried out with the aim of developing a model for quantification of active principles of pepper.

Chen, D., Wu, Z.. *J Agric Sci* 1, 2009, 94–100.

Acknowledgments

IF Goiano Campus Ceres and PIBIC program for opportunity.

Spectroscopic characteristics of the novel *cis*-[Ru(dcbH₂)₂(cbz₂-phen)](PF₆)₂ compound

Mariana Neri Pastorelli (IC), André Sarto Polo (PQ)*

mariana.pastorelli@aluno.ufabc.edu.br; andre.polo@ufabc.edu.br

Centro de Ciências Naturais e Humanas, Universidade Federal do ABC, Santo André, Brazil

Palavras Chave: *Ruthenium(II) polypyridyl compound, absorption spectrum, emission spectrum, photophysics*

Highlights

The *cis*-Ru(dcbH₂)₂(cbz₂-phen)](PF₆)₂ compound was obtained and characterized. It has an intense absorption on the visible region and a broad emission band, typical of ³MLCT lowest lying excited state.

Resumo/Abstract

Ru(II) coordination compounds have favorable characteristics to be a dye-sensitizer for Dye-Sensitized Solar Cells (DSSCs) and other energy conversion devices, due to their intense light absorption in the visible region of the spectrum and excited states suitable to participate in their processes. Another interesting feature is the change on their properties by modulating the characteristics of the ligands aiming to adjust since its light absorption until its photoreactivity. In this work, it is described the synthesis of *cis*-Ru(dcbH₂)₂(cbz₂-phen)](PF₆)₂, dcbH₂ = 4,4'-dicarboxylic acid-2,2'-bipyridine and cbz₂-phen = 4,7-dicarbazole-1,10-phenanthroline, figure 1a, which is a promising candidate for energy conversion process. The ligand dcbH₂ is responsible by the chemical adsorption of the dye in the semiconductor surface and allows a good electronic coupling between its excited state and the conduction band of the oxide, while the cbz₂-phen it's a 1,10-phenanthroline derivative and has been studied aiming to adjust the characteristics compound.

The *cis*-Ru(dcbH₂)₂(cbz₂-phen)](PF₆)₂ complex was successfully obtained by refluxing *cis*-[Ru(dcbH₂)Cl₂] and cbz₂-phen (1:1) in N,N'-dimethylformamide for 12h, adding NH₄PF₆ (1:10) the solid was crystalized (yield = 30%). The absorption spectrum of the compound in phosphate buffer (pH 8) exhibits an intense band in the visible region, with absorption maximum in 460 nm ($\epsilon = 2,8 \times 10^4 \text{ L mol}^{-1} \text{ cm}^{-1}$). The emission spectrum exhibits a broad and non-structured emission band, typical of a ³MLCT excited state, centered at 625 nm ($\phi_{em} = 0.071$), using [Ru(phen)₃]²⁺ as reference, figure 1b.

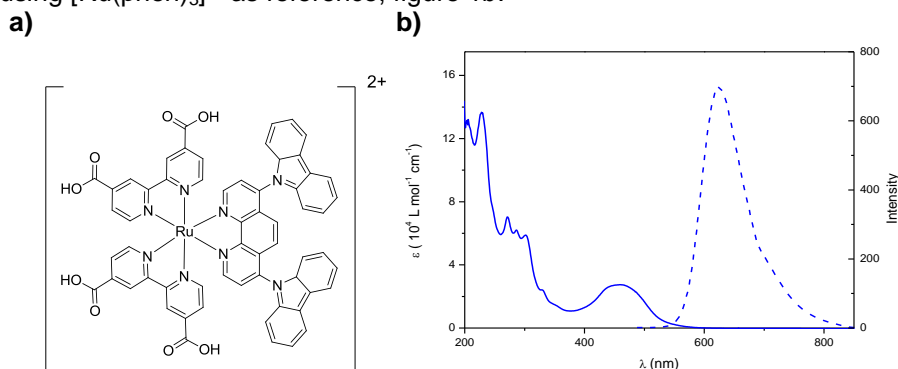


Figure 1. a) Structure of *cis*-[Ru(dcbH₂)₂(cbz₂-phen)] b) Absorption spectrum (solid) and Emission spectrum (dash) of *cis*-[Ru(dcbH₂)₂(cbz₂-phen)](PF₆)₂ in phosphate buffer (pH 8) at T= 298K and $\lambda_{ex} = 458 \text{ nm}$.

The compound was successfully prepared and exhibits interesting properties to be used in energy conversion processes. Further investigations of its characteristics are been carried out.

Agradecimentos/Acknowledgments

FAPESP (2016/21993-6; 2018/24609-8)

Área: AMB

Nº de Inscrição: 01273

Avaliação sazonal de águas subterrâneas como ferramenta na prospecção mineral.

Waleria M. Lima (IC)¹, Gilmara A. C. Fortes (PQ)²; Deomar P. da Costa (PQ)^{3*}
deomar.costa@ifgoiano.edu.br

¹Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia Goiano, Rod. 154 Km 03, CP 51, CEP 76.300-000, Câmpus Ceres - GO. ²Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia Goiano, Avenida Vereador José Benevenuto Filho, Qd 11 S/N - Setor Leste Universitário, Ipameri - GO, 75780-000; ³ Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia Goiano, Rod. 154 Km 03, CP 51, CEP 76.300-000, Câmpus Morrinhos - GO.

Palavras Chave: água subterrânea, prospecção mineral, sazonalidade, Vale do São Patrício.

Highlights

Seasonal groundwater assessment as a tool in mineral prospecting. O norte do estado de Goiás se destaca como um promissor reservatório de minério de alto potencial econômico, tendo 3 mineradoras instaladas na região do vale do São Patrício, diante disso análise química das águas dos poços artesianos mostrou uma alternativa na prospecção geotécnica indireta vantajoso e barato comparado ao processo direto (solo). Tivemos uma quantidade expressiva de Mn (3,0 mg/L), Zn (0,8 mg/L) e Cu (0,8 mg/L).

Resumo/Abstract

No estado de Goiás, o vale do São Patrício é conhecido pelo seu potencial em reserva mineral e também pela salinidade elevada de suas águas subterrâneas. Diante disso, analisamos amostras de água de poços artesianos de 8 municípios do vale do São Patrício nos seguintes parâmetros: Fe, Zn, Cu, Pb, Ca, K, Mn, condutividade elétrica, pH e dureza; as coletas foram realizadas nos períodos chuvoso (fevereiro de 2017) e seco (agosto de 2017), característica climática do Cerrado Goiano. Os resultados apontaram condutividade elétrica máxima de 400 $\mu\text{mS/cm}$ e dureza média de 80 ppm no período chuvoso, já no período seco, a condutividade foi de 120 $\mu\text{mS/cm}$ e dureza 8 ppm. No período chuvoso, verificou-se concentração de Mn de 3,0 mg/L, quantidade 20 vezes maior que a máxima recomendada do metal em água pela Organização Mundial da Saúde (OMS) e concentração de Zn de 0,8 mg/L. No período seco, evidenciou-se concentração alta de Cu (0,8 mg/L). A elevada concentração dos metais Mn, Zn e Cu nos chama a atenção pelo fato de que são metais de baixa solubilidade na sua forma mineral, a saber: manganês nas formas de óxido braunita $2\text{Mn}_2\text{O}_3 \cdot \text{MnSiO}_3$, hausmannita Mn_3O_4 , manganita $\text{Mn}_2\text{O}_3 \cdot \text{H}_2\text{O}$; zinco na forma de sulfetos blenda ou esfalerita (ZnS), willemita (Zn_2SiO_4), smithsonita (ZnCO_3), calamina ou hemimorfita ($2\text{ZnO} \cdot \text{SiO}_2 \cdot \text{H}_2\text{O}$), wurtzita (Zn,Fe)S; e cobre na forma de sulfetos, calcopirita (CuFeS_2) calcocita (Cu_2S), covelita (CuS), bornita (Cu_5FeS_4), tetraedrita ($(\text{CuFe})_{12}\text{Sb}_4\text{S}_{13}$) enargita (Cu_3AsS_4). O elemento Fe, muitas vezes associado a presença de Mn, não foi detectado, provavelmente devido ao pH próximo de 7 das amostras de água, que favorece a formação de óxido. Essa pesquisa permitiu constatar que a prospecção geotécnica indireta (análise de água subterrânea) é mais vantajosa que as técnicas de perfuração, devido ao baixo custo de análise, e mostrou-se útil e promissora quando amostrada no período chuvoso.

Agradecimentos/Acknowledgments



Theoretical evaluation of quinoline-phosphoramidate compounds as corrosion inhibitors for low carbon steels

Gustavo S. Proença¹ (IC), Paula Romanhi¹ (IC), Cindy J. de Oliveira¹ (IC), Luana A. Machado² (PG), Raphaela de M. Baêso³ (PQ), Marcos C. de Souza² (PQ), Julliane Yoneda¹ (PQ), Leandro F. Pedrosa^{1,2*} (PQ).

gustavosonnewend@id.uff.br; leandropedrosa@id.uff.br

¹ Institute of Exact Sciences, Department of Chemistry, UFF, CEP 27213-145, Volta Redonda, RJ, Brazil.

² Institute of Chemistry, Department of Organic Chemistry, UFF, CEP 24020-141, Niterói, RJ, Brazil.

³ Laboratory of Ultrasound, INMETRO, CEP 25250-020, Duque de Caxias, RJ, Brazil.

Keywords: Corrosion Inhibitor, Quinolones, Phosphoramidates, Computational Chemistry.

Highlights

We study the theoretical properties by DFT calculations of quinoline-phosphoramidates synthesized by our research group as corrosion inhibitors for low carbon steels.

Resumo/Abstract

In Brazil, the estimated costs related to corrosive processes are in the range of US \$ 15 billion per year, saving about US \$ 5 billion through the use of prevention and control methods. Corrosion is a spontaneous process and is present in the petroleum industry, where the attack on metal surfaces of industrial equipment is verified. Corrosion inhibitor is a substance or mixture of substances which reduces or eliminates the corrosive process.¹ Adsorption inhibitors are usually organic compounds containing unsaturations and / or strongly polar groups containing nitrogen, oxygen, phosphorus or sulfur. Phosphoramidates have received great attention in the recent decades of studies and patents as corrosion inhibitors for the oil industry.² The use of chemical quantum calculations is an important tool in the study of the correlation between molecular structure and corrosion inhibition efficiency. Furthermore, the theoretical study allows for pre-selection of compounds with structural features necessary to act as organic corrosion inhibitors. In this context, quinoline-phosphoramidate compounds (**2a-c**), **Figure 1**, had their properties calculated for studied using the AM1 method for a first optimization and then it was used the B3LYP/6-311G(d,p) method in gas phase, for better optimization.

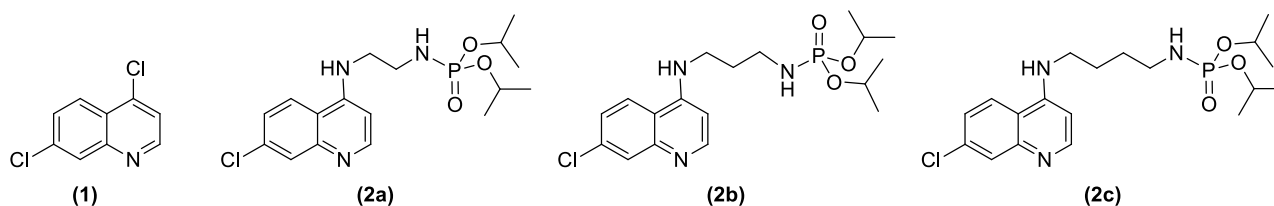


Figure 1: Quinoline-phosphoramidates (**2a-c**) theoretically studied as corrosion inhibitors.

In addition, were calculated HOMO, LUMO energies and energy gap (ΔE) values. Corrosion inhibition efficiencies of molecules are closely associated with their reactivities or stabilities. The calculated quantum chemical parameters such as the highest occupied molecular orbital energy (E_{HOMO}), lowest unoccupied molecular orbital energy (E_{LUMO}), the energy gap between E_{HOMO} and E_{LUMO} (ΔE), dipole moments (DM), molecular volume (MV), sum of the total negative charge (TNC), global hardness (η), softness (σ), chemical potential (μ), electronegativity (χ) and global Electrophilicity (ω) are important and useful tools to compare the corrosion inhibition performances of molecules.^{3,4} The DFT calculations of quinoline-phosphoramidates (**2a-c**) allowed determining theoretically the best corrosion inhibitor for low carbon steel.

REFERENCES

¹ Gentil, V. Corrosão. 5. ed. Rio de Janeiro: LTC-Livros Técnicos e Científicos S.A, **2007**.

² Redmore, D., et al. *United States Patent U3997293*, **1976**.

³ Khaled, K. F.; *Appl. Surf. Sci.*, **2010**, 256, 6753.

⁴ Mert, B. D.; et al. *Corros. Sci.*, **2011**, 53, 4265.

Área: _ORG N° de Inscrição: 1276

Initial studies of regioselective synthesis of aryl ethers via a sulfonyl transfer reaction

Thayná A. Bibiano (IC)¹, Marcelo L. F. Lima (IC)¹, Angelo A. T. da Silva (PQ)*¹

thaynabibiano@gmail.com; angelo.silva@ifrj.edu.

¹Instituto Federal de Educação Ciência e Tecnologia do Rio de Janeiro (IFRJ), campus Nilópolis

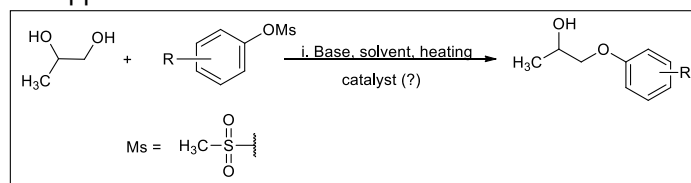
Palavras Chave: Aryl ether, Diol, Regioselective, Sulfonyl.

Highlights

Regioselective aryloxylation protocol in diols. Sulfonyl transfer reaction. The yields were obtained by GC-MS. The products are important for the synthesis of β -blockers.

Resumo/Abstract

The synthesis of structurally-defined bioactive molecules is a growing challenge for modern organic synthesis. Many of these structures are polyhydroxylated and its complex scaffolds are present in several molecules of biological interest [1]. Though there are many options available to modify hydroxyl groups, difficulties arise when the process involves polyhydroxylated molecules [2]. Thus, despite the myriad of options for selective activation and protection of polyols, none of these methodologies results in the formation of oxygen-aryl bond (aryl ether) regioselectivity. The objective of this work was to improve the protocol of regioselective formation of aryl ether in alicyclic polyols by transferring sulfonyl in basic medium. Phenyl mesylated and the racemic propane-1,2-diol were the reagents previously chosen for the initial reactions, by using a procedure previously established by the group [3] (Scheme 1). In this, the best yield and selectivity result (55% of product C1-OPh) of protection of the primary position was achieved with the use of cesium carbonate as base and heating so that the sulfonyl transfer cycle was performed, according to the work of Sach and collaborators [4]. Aryl mesylates were readily prepared from mesyl chloride in basic medium [5]. Different reaction conditions were tested by modifying the temperature, the base and its concentration. The products were isolated and purified by conventional methods to identify them by spectrometric techniques (IR, ¹³C and ¹H NMR). The reaction yields were obtained by GC-MS and compared to a standard isolated product. The establishment of a more efficient protocol will allow its application in other aryl mesylates and other polyols to verify the robustness of the procedure and for future application in other studies.



Scheme 1 General procedure for the regioselective synthesis of aryl ethers.

- [1] S.G. Warren, P. Wyatt, *Organic Synthesis: The Disconnection Approach*, 2. ed., reprinted, Wiley, Chichester, 2011.
- [2] X. Sun, H. Lee, S. Lee, K.L. Tan, *Nat. Chem.* 5 (2013) 790–795.
- [3] A.A.A.T. da da Silva, M.L. FELICIO, V.M.F. CERQUEIRA, RELATÓRIO TÉCNICO-CIENTÍFICO - PIBICT 2016-2017, IFRJ, Nilópolis, 2017.
- [4] N.W. Sach, D.T. Richter, S. Cripps, M. Tran-Dubé, H. Zhu, B. Huang, J. Cui, S.C. Sutton, *Org. Lett.* 14 (2012) 3886–3889.
- [5] M. Marcotullio, V. Campagna, S. Sternativo, F. Costantino, M. Curini, *Synthesis* 2006 (2006) 2760–2766.

Agradecimentos/Acknowledgments

Financial support from IFRJ (PROCIÊNCIA) and CNPq.

Área: MED

(Inserir a sigla da seção científica para qual o resumo será submetido. Ex: ORG, BEA, CAT)

Nº de Inscrição: 01277

(Inserir o número de inscrição do autor que fez a submissão)

Synthesis and Pharmacological evaluation of pomalidomide derivatives useful to treat sickle cell anemia.

Thais Regina Ferreira de Melo (PG)¹, Brian Dulmovits(PG)², Guilherme Felipe dos Santos Fernandes(PG)¹, Cristiane M. de Souza (PG)³, Carolina Lanaro (PQ)³, Chung Man Chin(PQ)¹, Lionel Blanc (PQ)², Fernando Ferreira Costa (PQ)³ and Jean Leandro dos Santos (PQ)^{1*}.

trfmelo@gmail.com; santosjl@fctfar.unesp.br

¹ São Paulo State University (UNESP), School of Pharmaceutical Sciences, Araraquara, 14800-903, Brazil;

²Laboratory of Developmental Erythropoiesis, The Feinstein Institute for Medical Research, Manhasset NY, 11030, US;

³Faculty of Medical Sciences, State University of Campinas - UNICAMP, Campinas, 13083-970, Brazil.

Palavras Chave: pomalidomide derivatives, NO-donor, HbF inducer, sickle cell anemia

Highlights

Pomalidomide derivative TMD1604 (2.5µM) induces γ -globin gene expression at levels superior of hydroxyurea (10µM).

TMD1604 (2.5µM) increases cGMP levels in HUVEC cells and decreases TNF- α levels in monocytes.

Resumo/Abstract

Sickle cell anemia (SCA) is a inherited hemolitical anemia characterized by a mutation in the β -globin gene. This mutation promotes polymerization of hemoglobin molecules that change the structure of the erythrocyte promoting sickling of the cell. Moreover, the increased adhesion of blood cells into vessel and pro-inflammatory cytokines like TNF- α contributing to the increasement of the vaso-occlusive process.[1] Hydroxyurea (HU) and L-glutamine are the only drugs available for treatment. HU beneficial effects are associated with nitric oxide (NO), generated after biotransformation. NO has beneficial effects on the disease such as vasodilatation, inhibition of platelet aggregation and fetal hemoglobin (HbF) production.[2] It is well established that fetal hemoglobin (HbF) induction is a promising strategy to reduce clinical severity of SCD. [3] In this aspect, it was demonstrated that pomalidomide induce γ -globin gene expression at levels superior to that of HU without its deleterious effects[4]. In this context, in this work were synthesized compounds using molecular hybridization approach of the pomalidomide (TNF- α inhibitor subunit) with the furoxan ring (1,2,5-oxadiazol-2-N-oxide) as NO donor .Compounds were synthesized in yields ranging from 13 to 30%. The compounds demonstrated ability to release NO at levels ranging from 1 to 30%. In CD34+ cellular cultures, compound TMD1604 at 2.5 μ M concentration was able to induce γ -globin and HbF while HU was active only at 10 μ M. Compound TMD1604 also increased cGMP levels in HUVEC cells and decrease TNF- α levels in monocytes. Preliminary studies of the mechanism of action have shown that compound TMD1604 does not interfere with transcription factors such as BCL11A, IKAROS, LRF and histone acetylation levels. Our results indicate that, the mechanism of action of this compound differs from the parental drug pomalidomide. These results suggest that compound TMD1604 is a promising prototype for the development of new drugs for treatment of SCA.

References: ¹ BUNN, H.F. N Engl J Med **1997**, 337, 762–769. ² KING, S.B.. Curr. Med. Chem., **2003**,10, 437-452. ³ COKIC, V.P. et al., J. Clin. Invest., **2003**,111, 2, 231-239; ⁴ Meiler, S. et a., Blood, **2011**, 118, 4, 1109–1112.

Agradecimentos/Acknowledgments

FAPESP

Preparation and characterization of palladium-based polymeric composite: application in coupling reaction with greener approaches

Elvis N. Nishida^a (PG), **Laíze Zaramello^a** (PQ), **Elder C. Leopoldino^a** (PG), **Ricardo F. Affeldt^a** (PQ), **Higor A. Centurion^b** (PG), **Renato V. Gonçalves^b** (PQ), **Bruno S. Souza^{a,*}** (PQ)

nishida.qmc@gmail.com; bruno.souza@ufsc.br

^aLaboratório de Catálise e Fenômenos Interfaciais (LaCFI) QMC-UFSC

^bLaboratório de Nanomateriais e Cerâmicas Avançadas (NaCA), IFSC-USP

Keywords: Palladium, coupling reaction, Green Chemistry, polymer

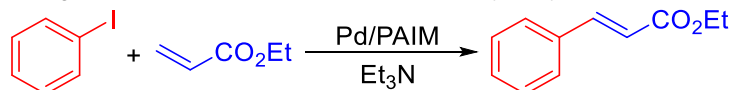
Highlights

A novel palladium-based polymeric composite Pd/PAIM was prepared. The catalytic activity was evaluated in the Heck-Mizoroki coupling reaction. The reaction works under mild conditions and in green solvents.

Abstract

In line with environmental issues, many efforts have been made on the development of green reaction methodologies, such as replacement of toxic solvents¹ and recovery of precious metal catalysts.² One interesting strategy is functionalization of commercial polymers with different organic moieties aiming to entrap the expensive metal, while maintaining access to reactants due to polymer swelling.³ In the present work we report the preparation, characterization and use of a novel palladium-based polymeric composite, Pd/PAIM, in the Heck-Mizoroki coupling reaction. The preliminary results are shown in **Table 1**.

Table 1. Heck-Mizoroki coupling reaction between iodobenzene and ethyl acrylate at various reaction conditions.

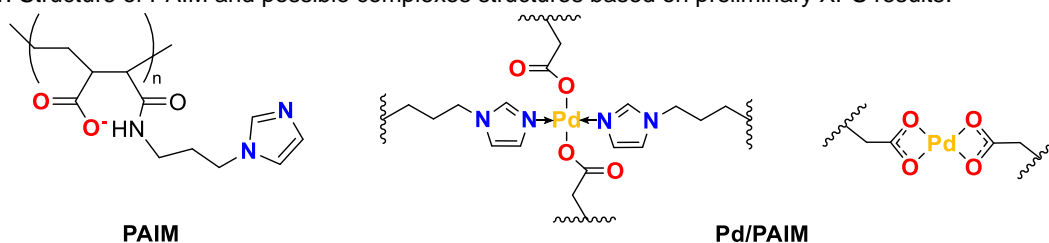


| Entry | mol% Pd | T (°C) | t (hours) | Solvent | Product Conversion ^a (%) |
|-------|---------|--------|-----------|-----------------------------|-------------------------------------|
| 1 | 0.5 | 80 | 24 | H ₂ O | 67 |
| 2 | 1.0 | 90 | 24 | H ₂ O/2-Propanol | 75 |
| 3 | 0.5 | 90 | 24 | H ₂ O/2-Propanol | 88 |
| 4 | 0.5 | 100 | 2 | 1-Butanol | >95 |

Reaction conditions: iodobenzene (0.5 mmol), ethyl acrylate (1.0 mmol), Et₃N (1.0 mmol). ^aConversion determined by GC/MS.

Scheme 1 shows the structure of PAIM along with a representation of the Pd/PAIM complexes based on preliminary XPS results. Recycle experiments are being carried out in our laboratories.

Scheme 1. Structure of PAIM and possible complexes structures based on preliminary XPS results.



¹Lipshutz, B. H. *et al*, *Acs Sustain Chem Eng*, **2016**, *4*, 5838.

²Munnik, P., *et al*, *Chem Rev*, **2015**, *115*, 6687.

³Sato, T., *et al*, *ChemCatChem*, **2015**, *7*, 2141.

Aknowledgments

CAPES, CNPq, INCT-Catálise, FAPESC and UFSC for the financial support.

Cooperative catalysis for reductions and reductive aminations using formic acid as hydrogen source

Jhonatan L. Fiorio(PG),¹ Thaylan P. Araújo (PG),¹ Eduardo C. M. Barbosa (PG),¹ Jhon Quiroz (PQ),¹ Pedro Henrique Cury Camargo(PQ),¹ Matthias Rudolph (PQ),² A. Stephen K. Hashmi (PQ),² Liane M. Rossi (PQ),^{1*}

lrossi@iq.usp.br; lrossi@iq.usp.br

¹ Instituto de Química Universidade de São Paulo, São Paulo 05508-000 (Brazil); ² Ruprecht-Karls-Universität Heidelberg, Heidelberg, 69120 (Germany)

Palavras Chave: Gold nanoparticles, transfer hydrogenation, formic acid, reduction, green chemistry

Highlights

Gold nanoparticles with appropriate ligands catalyze green reductions and reductive aminations using formic acid as hydrogen source. Z-alkenes and secondary amines were obtained in high yields.

Resumo/Abstract

Hydrogenation reactions are usually carried out using molecular hydrogen as reductant, however, these reactions typically require high H₂ pressure, which hampers the reaction's selectivity control, often leading to substrate over-reduction, moreover, elaborate experimental setups are often required. An attractive alternative is to employ inexpensive and readily available hydrogen donors, a strategy known as transfer hydrogenation (TH). Among the various hydrogen donors used in TH, formic acid (FA, HCOOH) has emerged as a green and bio-renewable hydrogen carrier as well as a means of utilizing CO₂. In an effort to shed light on the generality of cooperative catalysis using gold-amine systems under study in our research group [1], we studied here the influence of different amines ligands on the catalytic activity of gold-catalyst in transfer hydrogenation reactions (Figure 1). We noticed that the Au/SiO₂ catalyst performance correlates well with the increase in the pK_a value of the N-containing ligands, and ligands with high pK_a values (>9) are able to assist gold to perform the reaction. To gain insights into the reaction pathway the reaction was performed with deuterium-labeled formic acids HCOOD, DCOOH, and DCOOD to measure the kinetic isotope effect (KIE). When comparing the rates of the hydrogenation reactions of 1a with labeled formic acids, a primary kinetic isotope effect of 5.2 and 2.1 is observed on the formic (CH/CD) and the acidic (OH/OD) position, respectively, while the kinetic isotope effect upon double isotopic substitution is 5.5. This means that both the bond to the formic hydrogen and that to the acidic hydrogen are broken or formed in the rate-determining step in the present alkyne reduction reaction, consistent with previous cases of transfer hydrogenations reactions. The Au/SiO₂ catalyst was also employed in the synthesis of secondary amines from reductive amination of readily available nitro and carbonyl compounds using formic acid.

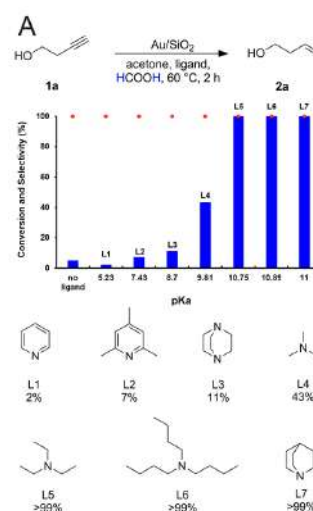


Figure 1. A) Screening of auxiliary ligands for 3-butyne-1-ol 1a hydrogenation with Au/SiO₂ catalyst. Reaction conditions: 0.5 mmol of 1a, 25 mg of Au/SiO₂, 5 mmol of formic acid, 3.2 mmol of ligand, 2 mL of acetone, 60 °C, 2 h. Determined by GC using

[1] J.L. Fiorio, N. López, L.M. Rossi, ACS Catal. 7 (2017) 2973–2980.

Agradecimentos/Acknowledgments

The authors are grateful to the Brazilian government agencies FAPESP (grant numbers 2016/16738-7, 2015/21366-9 and 2015/26308-7), Serrapilheira Institute (grant number Serra-1709-16900), CNPq, and CAPES for financial support. L. M. R and P.H.C.C. thank CNPq for the research fellowships. J.Q., T.P.A., and E.C.M.B. thank FAPESP for the fellowships (grant numbers 2016/17866-9, 2017/07564-8, and 2015/11452-5, respectively). J.L.F. also thanks CAPES-DAAD-CNPQ for his scholarship (Grant 88887.161404/2017-00).

Síntese, estrutura cristalina e propriedades magnéticas de compostos tetra- e heptanucleares contendo ligante β -dicetonato e íons Co^{II} e Ni^{II}

Esther S. Areas (PG),^{1*} Stéphane Soriano(PQ),² Guilherme P. Guedes (PQ)¹, Maria G. F. Vaz(PQ)¹

esther.areas@gmail.com

¹Instituto de Química, Universidade Federal Fluminense; ²Instituto de Física, Universidade Federal Fluminense.

Palavras Chave: Magnetismo molecular, Compostos polinucleares, Difração de raios X, SMM.

Highlights

Synthesis, crystal structure and magnetic properties of tetra- and heptanuclear compounds containing a β -diketonate ligand and Co^{II} and Ni^{II} ions. M_4 and M_7 complexes showed a cubane or dicubane-like structures and presented predominant ferromagnetic interactions.

Resumo

Compostos de coordenação polinucleares vêm sendo estudados na área de magnetismo molecular visando sistemas que se comportem como *Single Molecule Magnets* (SMMs). Devido à relaxação lenta da magnetização em baixas temperaturas, esses compostos são potenciais candidatos para aplicações em dispositivos de armazenamento de dados a nível molecular.^[1] A principal estratégia para obtenção de SMM com maiores temperaturas de bloqueio e barreira para reversão da magnetização baseia-se atualmente na utilização de íons com uma contribuição orbital para o momento magnético, tais como Co^{II} e alguns íons lantanídeos.^[2,3] Além deste fator, a arquitetura molecular tem um importante papel para o aumento do momento magnético total da molécula, uma vez que pode induzir interações ferromagnéticas entre os portadores de momento magnético.^[4] Neste trabalho foram obtidos quatro novos compostos de coordenação do tipo $[\text{M}_4(\text{tbta})_4(\text{OMe})_4(\text{MeOH})_4]$ e $[\text{M}_7(\text{tbta})_6(\text{OH})_8(\text{isoPrOH})_6]$, onde **tbta** é o ligante β -dicetonato 1,1,1-trifluoro-5,5-dimetil-2,4-hexadionato e M são os íons Co^{II} (para **1a** e **2a**) ou Ni^{II} (para **1b** e **2b**). Os compostos $[\text{M}_4(\text{tbta})_4(\text{OMe})_4(\text{MeOH})_4]$ foram utilizados como precursores na substituição do ligante metanol por isopropanol, resultando nos respectivos sistemas heptanucleares. As estruturas cristalinas mostraram que em todos os compostos os íons metálicos são hexacoordenados e estão dispostos de maneira alternada, ocupando os vértices de uma arquitetura cúbica do tipo M_4O_4 (**1a** e **1b**) ou dicúbica M_7O_8 (**2a** e **2b**) (Figura 1). Os cátions estão ligados entre si através de uma ponte $\mu_3\text{-O}$ [MeO^- (**1a** e **1b**) ou HO^- (**2a** e **2b**)], exibindo ângulos de ligação $\text{M}-\text{O}-\text{M}$ próximos de 96° , que favorece interações ferromagnéticas entre os centros metálicos.^[4] De fato, medidas de magnetização em função da temperatura revelaram a presença de interações ferromagnéticas predominantes em **1a**, **2a** e **1b**. Os estudos sobre o comportamento magnético de **2b** e medidas magnéticas no modo AC estão em andamento.

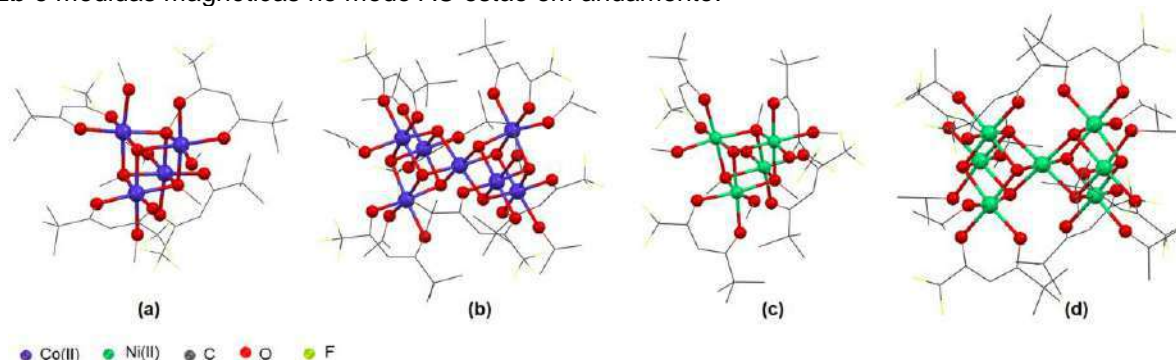


Figura 1: Estruturas moleculares dos compostos **1a** (a), **2a** (b), **1b** (c) e **2b** (d). Os átomos de hidrogênio foram omitidos.

[1] Xu, C. Y., *et al.*, *Polyhedron*, **2019**, 160, 272–278.

[2] Escobar, L. B. L., *et al.*, *Inorg. Chem.*, **2018**, 57, 326–334.

[3] Modak, R., *et al.*, *Inorg. Chem.*, **2016**, 55, 10192–10202.

[4] Guedes, G. P., *et al.*, *Inorg. Chem. Comm.*, **2013**, 37, 101–105.

Agradecimentos/Acknowledgments

Agradecemos às agências de fomento CAPES, FAPERJ e CNPq, aos laboratórios LDRX-UFF e LMBT-UFF.

Área: BIO

(Inserir a sigla da seção científica para qual o resumo será submetido. Ex: ORG, BEA, CAT)

Nº de Inscrição: 01281

(Inserir o número de inscrição do autor que fez a submissão)

Expression of Methyltransferases hTrm9L e Trm112 from *Homo sapiens* for Future Structure Solution

Renato F. Penteado (PG)^{1*}; Jorge Iulek (PQ)¹
renatoferras.p@gmail.com ; iulek@uepg.br

¹State University of Ponta Grossa, UEPG.

Keywords: Methyltransferases, Protein Purification, Protein 3D Structure

Highlights

- Methyltransferases take part in protein synthesis yet they modify chemically tRNA molecules for correct folding
- Determination of structures of human methyltransferases hTrm9L and Trm112 can give insights about their function in humans.
- Enzyme hTrm112 could be expressed in self induction media and purified by means of affinity chromatography

Abstract

Transfer RNA (tRNA) takes part on the fundamental process of protein synthesis. Its function is to transport aminoacids that will be used during protein synthesis in the ribosome. For this task to be accomplished correctly, many tRNA molecules need chemical modifications, like some nucleoside methylation, to assure their correct folding and its correct decodification¹. The methylation process is performed by enzymes called methyltransferases (Trm) and uses S-adenosylmethionine (SAM or AdoMet) as a methyl group donor². The complex Trm9/Trm112 (in which Trm9 is the *de facto* methyltransferase and Trm112 is an auxiliary subunit) is conserved in eukaryotes and Trm9 presents two orthologues in humans, namely, ABH8 e hTrm9L. This work aims at expressing human hTrm9L and Trm112 heterologously for future structure solution.

Escherichia coli BL21(DE3) cells were transformed by electroporation with plasmids pET21b(+) that harbored the coding genes of which subunit. Cells that were effectively transformed were selected by growth in media supplemented with ampicillin. Subsequently, transformed cells were propagated in 5 mL of liquid medium ZYP-5052 (with a composition to specifically express the proteins through self induction)³ at 37 °C for 22 h. Media were centrifuged and cells were promptly resuspended in lysis buffer (20 mM Tris-HCl, 200 mM NaCl, pH = 7.5); they were sonicated for 5 min. The resulting suspension was centrifuged to separate the cell debris. Samples from total lysis fraction and of the soluble and insoluble fractions were taken for analysis by SDS-PAGE. A Ni²⁺ affinity chromatography of the total lysed fraction was also accomplished. The SDS-PAGE results from expression tests of the Trm112 protein indicated an intense band in the expected position for molecular mass of circa 14 kDa (theoretical mass 14,199 kDa), nevertheless, in the lane that corresponds to the insoluble fraction. Yet, in the SDS-PAGE experiments for subunit hTrm9L, no bands were observed that could be attributed to this enzyme.

We conclude that enzyme hTrm112 is satisfactorily expressed in self induction media and can be purified by means of affinity chromatography. Nevertheless, new tests must be accomplished to stabilize it in solution. Concerning hTrm9L, new cell transformation experiments must be accomplished. Once both proteins are satisfactorily produced, the next step is to solve their structure, either by x-ray crystallography or CryoEM.

¹Létoquart, J.; van Tran, N.; Caroline, V.; Aleksandrov, A.; Lazar, N, van Tilbeurgh, H.; Liger, D.; Graille, M. *Nucleic Acids Research*, 2015, 43, 10989-11002.

²Schubert, H. L.; Blumenthal, R. M.; Cheng, X. *Trends in Biochemical Sciences*, 2003, 28, 329-335.

³Studier, F. W. *Protein Expression and Purification*, 2005, 41, 207–234.

Acknowledgments

CAPES e UEPG.

Synthesis of quinazoline based hybrids: Quinazoline-Chalcones and Quinazoline-Dihydropyrimidinones.

Eduardo B. Mass (PG),*¹ Gilmar V. Duarte (IC),¹ Dennis Russowsky (PQ).¹

eduardobustosm@hotmail.com

¹Departamento de Química, UFRGS

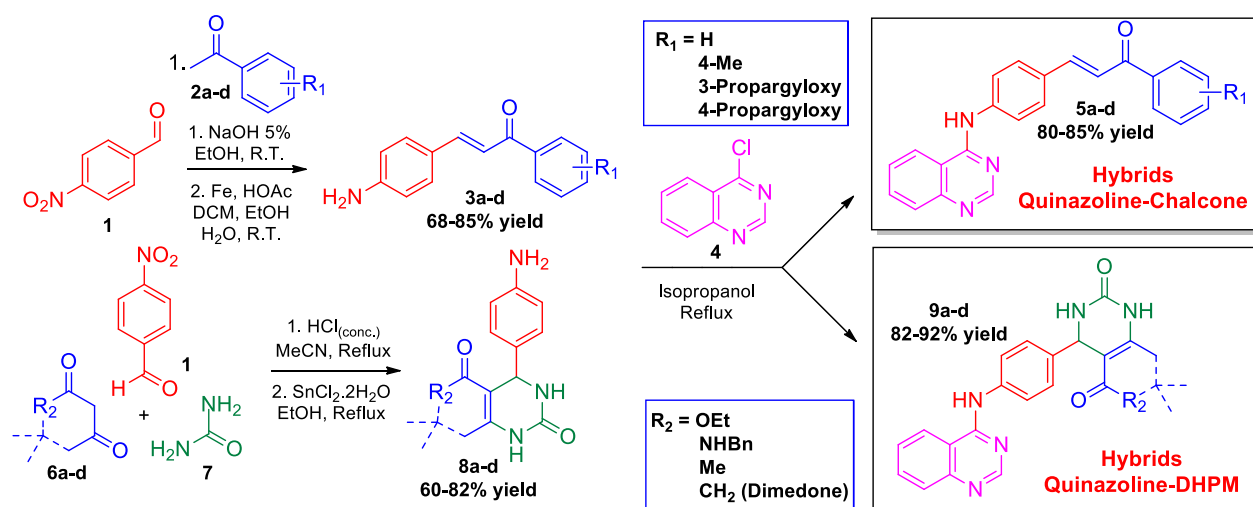
Palavras Chave: quinazoline, chalcone, claisen-schmidt, nitro reduction, aromatic nucleophilic substitution,

Highlights

Eight novel Quinazoline-Chalcones and Quinazoline-Dihydropyrimidinones hybrid molecules were designed and synthesized to produce potentially multifunctional bioactive compounds. The design was based in the individual biologic activities of each compound. The hybrid compounds were obtained in good yields from the key amino-derivatives via the nucleophilic aromatic substitution on the quinazoline component.

Abstract

The main objective of this work was to produce new potential biologically active molecular hybrids based in chalcones and/or dihydropyrimidinones connected to quinazoline core. The amino-chalcone derivatives (**3a-d**) were synthesized in two steps from the Claisen-Schmidt condensation and subsequent reduction of nitro group under Fe/AcOH medium. On the other hand, the amino-dihydropyrimidinones (**8a-d**) were obtained from the Biginelli multicomponent reaction followed by the nitro group reduction in presence of SnCl₂·2H₂O. The hybrids Quinazoline-Chalcones **5a-d** and Quinazoline-Dihydropyrimidinones **9a-d** were synthesized in reasonable to good yields, through a simple nucleophilic aromatic substitution reaction. The synthetic route to achieve the designed products can be viewed in Scheme 1, above.



Scheme 1. Synthetic route to Quinazoline-Chalcones and Quinazoline-Dihydropyrimidinones.

All compounds were fully characterized by usual ¹H NMR, ¹³C NMR and IR spectroscopy. The biological assays to infer about the cytotoxic activity, acetylcholinesterase inhibition and antioxidant activities of all compounds are under current investigation.

Acknowledgments



Área: _____ Nº de Inscrição: _____
 (Inserir a sigla da seção científica (Inserir o número de inscrição do autor para qual o resumo será submetido. Ex: ORG, BEA, CAT) que fez a submissão)

Comparação de métodos de extração abrangentes para estudos metabolômicos em cana-de-açúcar.

Luan C. C. Ruiz (PG), Alberto J. Cavalheiro (PQ)

luanccr@gmail.com

¹Departamento de Química Orgânica – Instituto de Química – UNESP

Keywords: On-Line Extraction, Untarget metabolomics analysis, Sugarcane

Highlights

Evaluation of the On-Line Extraction (OLE) coupled UPLC-DAD-MS for untarget metabolomics analysis of sugarcane, compared to other high efficiency extraction methods.

Resumo/Abstract

Convencionalmente a preparação de amostras para análises metabolômicas abrangentes de tecidos vegetais envolve coleta, interrupção do metabolismo, secagem, moagem, extração, filtração do extrato líquido, eliminação do solvente, extração em fase sólida, secagem do eluato, solubilização de resíduos na concentração desejada, filtração e análise. Para simplificar esses procedimentos, aumentar a abrangência da extração/análise e diminuir as fontes de erros, um método de extração em linha, acoplado ao UPLC-DAD-MS é proposto para *fingerprinting* metabolômico e comparado com outros quatro métodos de extração que usam UEA e ASE. Cana-de-açúcar foi escolhida para este estudo por ter amplo interesse econômico e sólida base de dados metabólicos na literatura. Foram obtidos *fingerprintings* dos extratos de folhas, entrenós e raízes, comparados sob critérios de abrangência, eficiência, reprodutibilidade, rapidez e robustez. O acoplamento OLE-UPLC-DAD-MS foi promissor em todas as análises, superando os outros modelos em quantidade dos compostos extraídos, eficiência de extração e simplicidade, pois utilizou 100 a 1000 vezes menos material vegetal para obter os resultados em uma única etapa. Claramente os procedimentos multietapas para preparação dos extratos são fontes significativas de erros, gastos de solventes e tempo, já que o método proposto apresenta *fingerprinting* diferente dos demais. Estes dados oferecem novas perspectivas para análises metabolômicas *untargeted*.

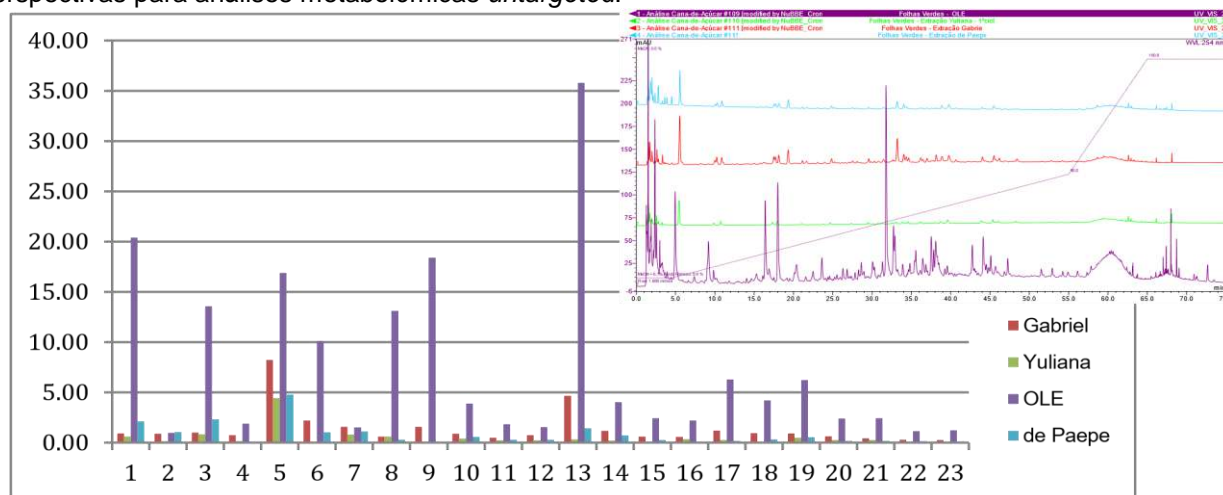


Figura 1: Comparação da área (mAU*min) de 23 bandas cromatográficas obtidas por quatro métodos de extração das folhas de cana-de-açúcar. Gabriel: extração por ultrassom (UEA), Yuliana e de Paepe: extração por solvente pressurizado (ASE). OLE: extração *on line*.

Agradecimentos/Acknowledgments

Os autores agradecem aos órgãos de fomento CNPq, CAPES e FAPESP.

Síntese e caracterização de um novo composto lamelar trocador de cátions para a imobilização de metaloporfirinas para fins catalíticos

Carolina M. Terzi (IC)^{1,2}, Fernando Wypych (PQ)², Shirley Nakagaki(PQ)^{1*}

*shirleyn@ufpr.br; carolterzi97@gmail.com

¹Laboratório de Bioinorgânica e catálise e ²Laboratório de Química de Materiais Avançados - Departamento de Química, Centro Politécnico, Curitiba - PR - UFPR

Palavras Chave: Porfirina, HDL, Imobilização, Catálise, Oxidação.

Highlights

Synthesis and characterization of a new layered cation exchanger compound for immobilization of metalloporphyrins for catalytic purposes. A LDH intercalated with $[\text{Na}(\text{H}_2\text{O})_6]^+$ was prepared and investigated as a cation exchanger solid using Nile Blue A dye and metalloporphyrins.

Resumo/Abstract

Layered Double Hydroxides (LDH) are layered compounds with similar structure to the natural mineral brucite ($\text{Mg}(\text{OH})_2$), and usually follow the general formula $\text{M}^{2+}_{1-x}\text{M}^{3+}_x(\text{OH})_2(\text{A}^n)_{x/n}\cdot y\text{H}_2\text{O}$, where M^{2+} and M^{3+} are metal ions octahedrally coordinated with hydroxide anions. The presence of metal ions M^{2+} and M^{3+} generates an excess of positive charge in the layers and, to keep the neutrality of the structure, there are anions intercalated in the interlayer domain¹. These compounds are known to be anion exchangers and the common molar ratios of $\text{M}^{2+}/\text{M}^{3+}$ varies between 2 and 4. However, there are rare natural minerals in which the molar ratio of $\text{M}^{2+}/\text{M}^{3+}$ is 2:1 and they present a generic composition of $(\text{Na}(\text{H}_2\text{O})_6)[\text{M}^{2+}_2\text{Al}_3(\text{OH})_{18}(\text{SO}_4)_2]\cdot 6\text{H}_2\text{O}$. The mineral Natroglaucocerinite ($\text{M}^{2+} = \text{Zn}$) is one of them² and it has the rare cation exchanger ability. In this work, a compound with composition similar to the mineral Natroglaucocerinite, named **Natro**, was prepared by the co-precipitation method by increasing the pH⁴. Solutions of NaOH, ZnSO_4 and $\text{Al}_2(\text{SO}_4)_3$ were slowly added to a solution of Na_2SO_4 ; after precipitation, the solid was maintained in aqueous solution for 24 h and, following that period, was washed several times. Then, it was kept in aqueous dispersion under refrigeration.

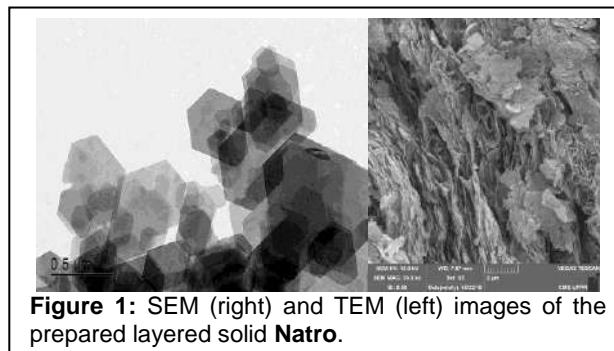


Figure 1: SEM (right) and TEM (left) images of the prepared layered solid **Natro**.

The obtained compound was characterized by several techniques and the cation exchanger ability was tested using cationic species e.g dyes and metalloporphyrins with future catalytic purposes. The images obtained by SEM and TEM analyses showed the expected layered morphology for **Natro** and the EDS analysis indicated that the solid obtained had the wanted composition (O =65.1%; Na=7.3%; Al=8.7%; S=4.1%; Zn=14.2%). The ability to exchange cations of **Natro** is due to the presence of $[\text{Na}(\text{H}_2\text{O})_6]^+$ ions in the interlayer domain of the layered solid. It was tested by the intercalation reaction of two cationic species, the Nile Blue A dye and the manganese porphyrin $[\text{Mn}(\text{TMPyP})]^{5+}$. The results showed that the solid prepared presented high capacity to interact with cationic species confirming that the layered compound **Natro** is indeed a cation exchanger, unlike usual LDH, that are anion exchangers. Further studies about the maximum capacity of cation exchanges and anion exchanges are being studied along with the applicability of the compounds obtained to act as catalyst in oxidation reaction, when presenting metalloporphyrins as the immobilized cation.

References:

- 1Crepaldi, E.L.; Valim, J.B. *Quim. Nova* **1998**, *21*, 300.
- 2Sotiles, A.R.; Baika, L.M.; Grassi, M.T.; Wypych, F. *J. Am. Chem. Soc.*, **2019**, *141*, 531.
- 3Dolphin, D.; Traylor, T.G.; Xie, L.Y. *Acc. Chem. Res.* **1997**, *30*, 251.
- 4Rachid, M. *Dissertação da Universié Blaise Pascal*, **2006**, Clermont-Ferrand II.

Agradecimentos/Acknowledgments

UFPR, CNPq, Capes.

42ª Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química: Eixos Mobilizadores em Química

Área: AMB

Nº de Inscrição: 01285

Investigation of the Availability of Elements in Coal Fly Ashes using EDTA Extraction and the ICP-MS Technique

Bárbara Arpini (IC), ¹Marcos F. Ferrão (PQ), ¹Sandra Maria Maia (PQ)^{1*}.sandramaia@iq.ufrgs.br.¹Departamento de Química Inorgânica, IQ - UFRGS,

Keywords: Coal fly ashes, EDTA extraction, ICP-MS, Elements availability, Environmental impact.

Highlights

Improper storage of coal-fired waste can lead to environmental contamination
EDTA: leaching agent to predict solid waste metal availability
Arsenic and Mo showed high % available in coal fly ashes

Abstract

The coal combustion in a power plant produces bottom and fly ashes and usually these combustion residues are improperly stored at the plant site or on-site disposal. As a consequence an environmental contamination can be produced. The determination of leaching inorganic pollutant in solid waste, such as coal and ash is an important topic for further industrial applications and solid waste management. Environmental contamination caused by coal ash disposal and also their further industrial application require the knowledge of their total metal concentration besides the available metal fraction to other environmental compartments.¹ In the literature² is reported the use of EDTA as a leaching agent to predict solid waste metal availability. The objective of this work was to evaluate the availability of As, Cd, Co, Cr, Cu, Mn, Mo, Ni, Pb, V and Zn in coal fly ashes produced by coal power plants from the south of Brazil and to predict probable elements which might contribute to the environmental contamination. The total elements concentration in coal fly ashes were determined by ICP-MS technique, after acid decomposition in metal block. In a preliminary study, applying an experimental design and surface response methodology, the compromise conditions: EDTA 0.05 mol L⁻¹ (pH 7), 1 g of sample and contact time of 60 min with agitation were chosen for extraction of the ashes. Samples were weighed in 50 mL polyethylene flasks, 20 mL EDTA was added, shaken for 60 min and allowed to stand overnight. After centrifugation (35 min at 3000 rpm), the supernatants were taken and diluted with 0.01 mol L⁻¹ HNO₃ for analysis by ICP-MS. Yttrium was used as internal standard to minimize matrix interferences. Once the available concentration values of the elements of interest were obtained, it was possible to calculate the % available of the elements for coal fly ashes samples, according to the equation below:

$$\% \text{ available} = \frac{\text{available element concentration} \times 100}{\text{total element concentration}}$$

In this study four coal fly ashes samples from Candiota and four from Charqueadas power plants were analysed. The preliminary results showed that As and Mo were the elements more extracted in comparison to the others. Flues *et al.*¹ observed the same behaviour for elements like As and Mo which ones were also the most extracted from the coal fly ashes from Figueira power plant (PR, Brazil). According to these authors the elements that could be a potential problem for soil contamination are As, Mo and Cd, due to their mobility and toxicity, and with lower risk are the elements Pb, Zn and Mn.

References:

¹Flues, M, Sato, IM, Scapin, MA, Cotrim, MEB, Camargo, IMC, *Fuel*, 103, 2013, 430.²Garrabants AC, Kosson DS, *Waste Manage.*, 20, 2000, 155.

Acknowledgments

PROPESQ - BIC

Phenolics and antioxidant activities of *Eugenia punicifolia* extracts microencapsulated with Xanthan gum

Catarina dos Santos (PQ); Manoela Martins (IC)
catarina.santos@gmail.com; manoela.m18@gmail.com

¹Departamento de Ciências Biológicas, FCL-Unesp Assis

Key words: flavonoids, phenolic compounds, microencapsulation and antioxidant activity.

Highlights

The *Eugenia punicifolia* hydroethanolic extracts was microencapsulated with xanthan gum in order to preserve its antioxidant activity and their phenolic compounds.

Abstract

Eugenia punicifolia, common in the Brazilian cerrado plant, is popularly used for treatment of various diseases, also possess anti-inflammatory, antinociceptive and antiulcerogenic activities^{1,2}. Usually, those activities are correlated to their phenolic compounds^{1,2}. However, such compounds exhibit sensitivity to temperature and light, which could decrease the range of *E. punicifolia* pharmacological applications. Encapsulation with xanthan gum would protect these compounds and increase circulation time. The present abstract shows the results for the evaluation of the phenolic and flavonoid encapsulation efficiency from microencapsulated *E. punicifolia* hydroethanolic extracts with xanthan gum (Mesh 80 and 200-Cotia Foods). It was also established a parallel among encapsulated and non-encapsulated and the radical scavenging capacity, measured by DPPH. For each extract was used 5 g of dried and crushed leaves/50 ml solvent (EtOH:H₂O 70:30 v/v) (collected in Assis-SP). The solution was kept under dynamic maceration for 2h and filtered. The residue was reextracted twice more. Encapsulated and non-encapsulated extracts were analyzed to concentration of total phenolics and flavonoids and antioxidant activities³⁻⁵. Statistical analyzes were made with levels of 95% significance in Excell. From the phenolic compounds, it was obtained an encapsulation efficiency of 36.27% (Mesh 80) and 23.46% (Mesh 200), for the flavonoid, 63.79% (Mesh 80) and 65.97% (Mesh 200). The antioxidant activity of the extract was preserved, with good release of the compounds in acidic medium (pH 4.5 and 5) and retention of the compounds in the gum in lightly basic medium (pH 7.4) (Figure 1a and 1b).

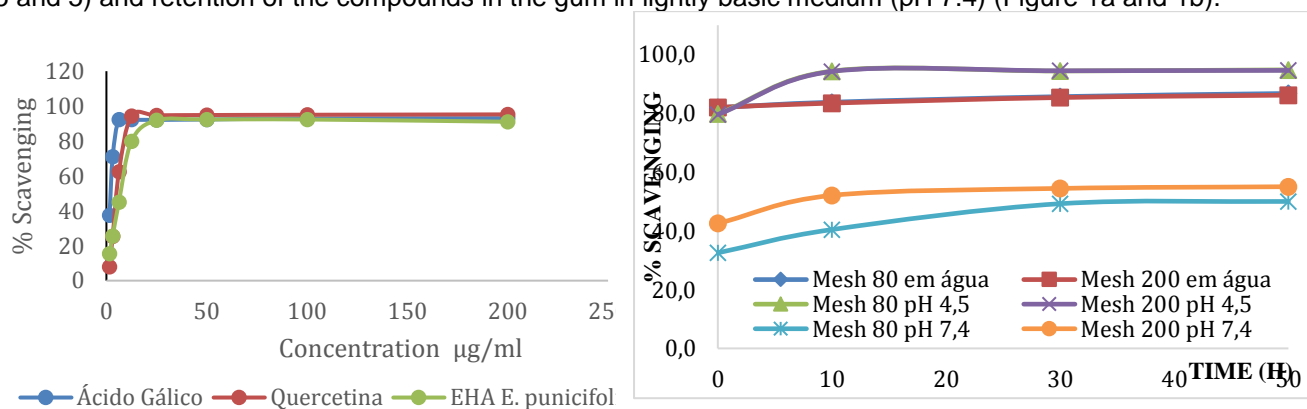


Figure 1. a) EHAEP scavenging capacity compared to Gallic acid and Quercetin. b) Scavenging capacity in different pHs

Acknowledgments

Fapesp (grant number 2015/22528-2)

- (1) Costa, M. F.; Jesus, T. I.; Lopes, B. R. P.; Angolini, C. F. F.; Montagnoli, A.; Gomes, L. de P.; Pereira, G. S.; Ruiz, A. L. T. G.; Carvalho, J. E.; Eberlin, M. N.; et al. *BMC Complement. Altern. Med.* **2016**, *16* (1). (2) Périco, L. L.; Rodrigues, V. P.; Ohara, R.; Bueno, G.; Nunes, V. V. A.; Santos, R. de C. dos; Camargo, A. C. L.; Júnior, L. A. J.; Andrade, S. F. de; Steimbach, V. M. B.; et al. *World J. Gastroenterol.* **2018**, *24* (38), 4369–4383. (3) Hillis, W. E.; Swain, T. *J. Sci. Food Agric.* **1959**, *10* (10), 533–537. (4) Enujiugha, V. N.; Talabi, J. Y.; Malomo, S. A.; Olagunju, A. I. *Food Nutr. Sci.* **2012**, *03* (01), 7–13. (5) Laine, P.; Kylli, P.; Heinonen, M.; Jouppila, K. *J. Agric. Food Chem.* **2008**, *56* (23), 11251–11261.

Área: FIS

Nº de Inscrição: 01287

Temperature effect on the production of aqueous nitrogen fertilizer by non-thermal atmospheric air plasma

Samantha T. Ohse (IC) e ¹ Péricles I. Khalaf (PQ)¹

stohse@hotmail.com; pericles@utfpr.edu.br

¹Departament of Chemistry, UTFPR, Pato Branco

Keywords: nitrogen fertilizer, non-thermal plasma, nitric acid, nitrous acid, ammonium

Highlights

- Haber-Bosh process employed to produce nitrogen fertilizer precursors causes a lot of emissions;
- Non-thermal plasma is an environmentally friendly alternative to nitrogen fixation;
- Employing atmospheric air, aqueous HNO₃, HNO₂ and NH₄⁺ were produced;
- Decreasing temperature led to an increase in the rate constant and final concentration for all of the species

Abstract

Although nitrogen element is quite abundant on the planet (roughly 78 % of the atmosphere in its gaseous phase), human beings and other animals cannot synthesize it, needing to get nitrogen containing compounds from food sources, known as biologic fixation. However, the increase on the world population and the intensification of the agricultural practices led to a decrease of the biological fixation causing soil depletion, thus making plants cultivation more difficult. Nowadays, Haber-Bosh process is the most widely industrially employed process to obtain ammonia (NH₃), reacting atmospheric N₂ with hydrogen (H₂), in the presence of catalysts, employing high temperatures (400-600 °C) and pressures (200-400 atm). Although this process supports roughly 40 % of the world population, it has serious negative aspects, both economic and environmental, because of its CO₂ emissions and the necessity of non-renewable natural gas (98 % CH₄) as hydrogen source. In order to avoid these negative impacts, nitrogen fixation was performed by non-thermal plasma in this work, using atmospheric nitrogen as the nitrogen source. The effect of temperature (5 and 25 °C) was investigated on the production of nitrogen containing species, namely, nitric acid (HNO₃), nitrous acid (HNO₂) and ammonium (NH₄⁺). In the plasma setup, a circulating thermostatic bath was employed to control the temperature of the plasma reactor, containing initially 100 mL of ultrapure water. Air plasma was generated above the liquid surface (gap = 5 mm) through a high voltage transformer (17 kV), connected to the electrodes of the reactor. All of the species were analyzed by UV-VIS spectrophotometry, employing quartz cuvettes, and their concentrations were determined through calibration curves. Solution pH was measured at the beginning (t = 0) and the end of each experiment (t = 180 min). All of the species obeyed a zero-order reaction kinetics, increasing linearly each species concentration over time. The observed rate constant (k_{obs}) increased with the decrease of temperature for all of the species. For HNO₃ production, k_{obs} was 56.88 mg L⁻¹ min⁻¹ (5 °C), decreasing to 35.26 mg L⁻¹ min⁻¹ at 25 °C. For HNO₂ production, k_{obs} = 3.42 mg L⁻¹ min⁻¹ (5 °C), decreasing to 1,31 mg L⁻¹ min⁻¹ at 25 °C. Table 1 shows the quantity of the species produced over 180 min plasma treatment in function of temperature.

Table 1. Quantification of the nitrogen species produced by non-thermal air plasma, in function of temperature.

| T (°C) | [HNO ₃] (%) | [NO ₃] (g/L) | [NO ₂] (g/L) | [NH ₄ ⁺] (mg/L) | Total elemental N (%) |
|--------|-------------------------|--------------------------|--------------------------|--|-----------------------|
| 5.0 | 1.00 | 9.9 | 0.6 | 2.1 | 0.24 |
| 25.0 | 0.61 | 6.0 | 0.2 | 0.6 | 0.15 |

From Table 1, HNO₃ is the main product followed by HNO₂ and then NH₄⁺. Decreasing temperature increases the production of all of the produced nitrogen species. As a result of acidic species production, the pH decreased from 7.3 (t = 0) to 0.6 (t = 180 min). Preliminary results from our group showed that all of the produced nitrite is converted to nitrate in 7 days, avoiding nitrification necessity in soil. Energetic efficiency for the process is under investigation, in order to evaluate an industrial feasible process.

Acknowledgments

To UTFPR (Pato Branco Campus).

Green light-emitting diode based on Eu²⁺-doped silicate for traffic signals and circadian rhythm control

Airton G. Bispo-Jr, (PG),¹ Sergio A. M. Lima, (PQ)¹ Rute A. S. Ferreira, (PQ),² Luis D. Carlos, (PQ)² Ana M. Pires (PQ)^{1*}

airton.germano.junior@gmail.com; ana.maria@unesp.br (*)

¹ Dept. of Chem. and Biochem., São Paulo State University, Brazil; ² Department of Physics and CICECO-Aveiro Institute of Materials, University of Aveiro, Portugal.

Keywords: Ba₂SiO₄:Eu²⁺, Light-emitting diodes, Green-emitting LEDs, Solid-state lighting.

Highlights

- Solid-state lighting;
- High-efficient and photostable green-emitting LED prototypes based on Eu²⁺-doped Ba₂SiO₄;
- UV down-shifting green light-emitting diodes as a tool to solve the “green-gap”.

Abstract

The impact of light emitting diodes (LEDs) on energy savings and price has opened up new and exciting frontiers in solid-state lighting (SSL) enabling the fabrication of high-brightness and monochromatic LEDs. Such LEDs find applications in architecture, displays, traffic signals as well as plant growth, food technology and human phototherapy, since monochromatic light is helpful to regulate Human and plant circadian rhythm.^[1] In particular, green light (520 nm) plays a special role in the circadian rhythm control because the human eyes have the biggest sensitivity in the green spectral range^[2] and it also suppresses melatonin production, being helpful to reset body clock, correct hyperpigmentation and eliminate skin spots.^[3] However, the development of green-emitting LEDs challenges the SSL engineering due to the so-called “green gap”, i.e., the lack of high-efficient green-emitting semiconductors.^[4] To overcome this obstacle, an alternative approach based on the combination of near-UV emitting LEDs with green-emitting phosphors (UV down-shifting phosphor for LEDs, PC-LEDs) has emerged in the last years.^[5] Therefore, inspired by the possibility of fabricating high-efficient and photostable green-emitting LEDs, we fabricated LED prototypes by coating a near-UV-emitting LED (365 nm) with films of Ba₂SiO₄:Eu²⁺ dispersed in poly(methyl methacrylate) (PMMA). The Ba₂SiO₄:Eu²⁺ was synthesized by the sol gel route^[6] and after the PMMA incorporation, the emission spectrum reveals a broad band centered at about 509 nm with intriguing absolute emission quantum yield values up to 0.50±0.05. The emission of the LED prototype lies in the green spectral region with Commission Internationale d’Eclairage (CIE) colour coordinates of (0.182;0.533) and luminous efficacy of 7.2±0.1 lm/W, among the best values in the literature. The radiant flux of the prototype was monitored for 180 hours under continuous operation, evidencing high colour stability. Therefore, the findings reported here confirm that by immobilizing the Ba₂SiO₄:Eu²⁺ phosphor in the PMMA polymer, enhanced quantum yield green emitting films were obtained with applications as down-shifting coatings for near-UV emitting LEDs for traffic light, displays and control of Human circadian rhythm.

Acknowledgments

FAPESP (Grant No. 2016/20421-9 and 17/21995-1). Funding was also provided by Fundação para a Ciência e a Tecnologia (FCT), EU/FEDER COMPETE within the scope of the projects CICECO-Aveiro Institute of Materials, POCI-01-0145-FEDER-007679 (FCT Ref. UID /CTM /50011/2013) and WinLED project n.º 30351. Andrei Kovalevsky from CICECO-Aveiro Institute of Materials is also acknowledged for help in the heat treatments.

[1] Nature, 563 (2018) 493–500; [2] Nat Rev Neurosci. 15 (2014) 443–454;

[3] Nature Photonics, 3, (2009) 432–434; [4] Phys. Status Solidi RRL, 12 (2018) 1800173;

[5] Water Research 132 (2018) 177-189; [6] RSC Adv., 2017, 7, 53752.

Área: ANA

Nº de Inscrição: 01289

Emulsion Breaking Extraction for the Determination of Tin in Edible Oil Samples by Graphite Furnace Atomic Absorption Spectrometry

Antonio Francisco da Silva (PG),¹ Rodrigo Papai de Souza (PQ),² Ivanise Gaubeur (PQ)^{1*}.

antonio.silva@ufabc.edu.br; ivanise.gaubeur@ufabc.edu.br

¹Laboratório de Espectroanalítica Molecular e Atômica (LEMA), Centro de Ciências Naturais e Humanas, UFABC – Universidade Federal do ABC, Santo André, São Paulo, Brasil.

²Centro de Tecnologia em Metalurgia e Materiais, IPT - Instituto de Pesquisas Tecnológicas, São Paulo, Brasil.

Palavras Chave: *Sample preparation, Edible oil, Emulsion breaking, Atomic absorption spectrometry*

Highlights

Sample preparation for complex oil samples. Extraction procedure combined with Graphite Furnace Atomic Absorption Spectrometry method. Metal determination in Edible Oil samples.

Abstract

Sample preparation for oil samples remains a challenge in analytical chemistry. Conventionally, can be carried out by either a simple dilution in an adequate organic solvent with the aim of reducing the viscosity or a complete sample digestion in an acid medium using a microwave oven. However, this traditional preparation methods generally promotes the analyte dilution. The formation of emulsions and microemulsion among these samples and surfactant (in an acid medium) has become an attractive alternative for metal determination. Emulsion breaking is an alternative procedure, and it is based on heating or centrifugation of this emulsion. In this context, the present work reports the development of a new analytical method for the determination of tin in edible oil samples. On the basis of the emulsion-induced extraction, which is carried out by forming a stable emulsion between the oil and an aqueous phase containing a surfactant and acid solutions, the method consists in breaking the emulsion and separating the phases, allowing the small amount of aqueous phase containing analyte to be retrieved and further analyzed by an instrumental technique. In the proposed method, a water-in-oil emulsion was prepared by mixing the edible oil sample with an acid solution (HNO₃) of Triton X-114. Next, the emulsion was broken by heating or centrifugation and the acidic aqueous phase deposited at the bottom of the flask was retrieved for the determination of Sn by Graphite Furnace Atomic Absorption Spectrometry (GF AAS). The method was optimized in univariate way by evaluating the influence of several parameters, such as the extractant (HNO₃) and the surfactant (Triton X-114) concentration, the temperature and centrifugation time for breaking the emulsion. The optimum results were obtained when the procedure was performed with 1 g of the sample and 1 mL of the extractant solution containing 2% (w/v) of Triton X-114 and 3% (v/v) of HNO₃. In addition, emulsion breaking was accomplished by heating the emulsion at 90°C. Quantification of Sn in the aqueous extracts was performed by external calibration with aqueous standard solutions, which simplified the procedure. The detection and quantitation limits (LOD and LOQ) for the determination of Sn in the oil samples were, respectively, 1.11 µg kg⁻¹ and 3.71 µg kg⁻¹. The method developed was applied in samples of edible oil and it stands out by allowing the pre-concentration of the analyte and by getting rid of a complex matrix, facilitating the quantification step.

LIMA, L.C., PAIXÃO, T.R.L.C., NOMURA, C.S., GAUBEUR, I. Combination of Dispersive Liquid-Liquid Microextraction and Emulsion Breaking for the Determination of Cu(II) and Pb(II) in Biodiesel and Oil Samples. *Energy Fuels*, 31, 9491–9497, 2017.

Acknowledgments

São Paulo Research Foundation (FAPESP) grant 2016/23878-0, National Research Council (CNPq) grant #309881/2015-3 and Multiuser Central Facilities (UFABC) for experimental support.

Cadeia catiônica Cu^{II}-Radical com ânions [Ln(hfac)₄]⁻: raro exemplo de distorções alongadas/comprimidas da geometria octaédrica

Mateus S. de Souza (IC),¹ Samira G. Reis (PQ),¹ Danilo Stingham (PQ),¹ Carolina S. Bortolot (PG),¹ Rafael A. A. Cassaro (PQ),² Guilherme P. Guedes (PQ),¹ Fernando de C. da Silva (PQ),¹ Vitor F. Ferreira (PQ),¹ Miguel A. Novak (PQ),³ Stéphane Soriano (PQ),⁴ Maria G. F. Vaz (PQ).¹

mateus_soares@id.uff.br; mariavaz@id.uff.br

¹Instituto de Química, UFF; ²Instituto de Química, UFRJ; ³Instituto de Física, UFRJ; ⁴Instituto de Física, UFF.

Palavras Chave: Polímeros de Coordenação, Complexos Heterometálicos, Magnetos de uma única molécula.

Highlights

Cationic Cu^{II}-Radical chain with [Ln(hfac)₄]⁻ anions: rare example of elongated/compressed distortions of the octahedral geometry

Field-induced single molecule magnet behavior in Dy-based 2p-3d-4f complexes. Alternated elongated and compressed Jahn-Teller distortion in copper(II)-radical chains.

Resumo/Abstract

Novos materiais moleculares capazes de apresentar relaxação lenta da magnetização e histerese magnética têm sido bastante explorados devido a potencial aplicação tecnológica desses sistemas.¹ Uma estratégia interessante para sintetizar esses compostos é a utilização de radicais nitronil nítróxido para a construção de complexos heterospin 2p-3d-4f.² Dessa forma, nesse trabalho foi sintetizado o radical 1-(*m*-toluolil)-1*H*-1,2,3-triazol-4-(3,3,4,4-tetrametil-2-oxil-5-oxidil-imidazol) (TITrzNIT) e a partir desse sintetizou-se os complexos {[Cu₂(TITrzNIT)₂(hfac)₃][Ln(hfac)₄]-C₇H₁₆]_n (Ln = Gd (**1**), Tb (**2**) e Dy (**3**)) (figura 1), onde hfac = hexafluoroacetilacetato.³ Nestes complexos duas moléculas do radical se coordenam de forma bidentada ao cobre através de um átomo de oxigênio do grupo nítróxido e um átomo de nitrogênio do anel triazol formando a unidade {Cu(hfac)(TITrzNIT)₂}⁺. O outro átomo de oxigênio do grupo nítróxido se coordena a um segundo íon cobre(II) originando um polímero de coordenação unidimensional (Figura 1). Esses íons cobre(II) se encontram em geometria octaédrica com distorções do tipo Jahn-Teller alongadas e comprimidas que se alternam na cadeia,

sendo um exemplo raro.³ As cadeias catiônicas possuem contra-íons [Ln(hfac)₄]⁻, nos quais o íon lantanídeo se encontra em uma geometria trigonal prismática biaumentada (C_{2v}). No espectro eletrônico na região do UV-vis foi possível destacar bandas referentes a transições π-π* dos ligantes TITrzNIT e hfac na faixa de 259 a 351nm; e a transições internas do ligante ou TCML, na faixa de 400 a 640nm. Através do ajuste dos dados de medidas magnéticas DC para o complexo **1** verificou-se a existência de interações ferro- e antiferromagnéticas entre o radical e os íons cobre(II) na cadeia. Além disso, o complexo **3** apresentou relaxação lenta da magnetização sob campo magnético externo atribuída ao ânion com anisotropia magnética [Dy(hfac)₄]⁻.

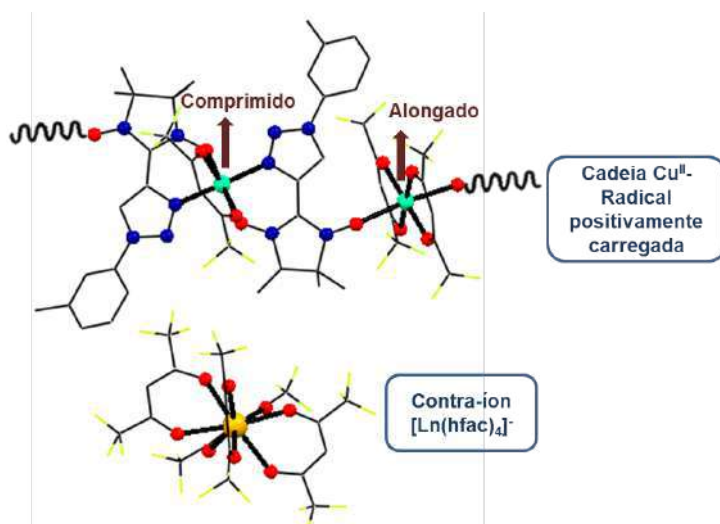


Figura 1: Estrutura dos complexos 1-3.

1 Leuenberger, M. N.; Loss, D. *Nature* **2001**, *410*, 789

2 Zhu, M. *et al. Inorg. Chem. Frontiers* **2016**, *3*, 994

3 de Souza, M. S. *et al. Inorg. Chem.* **2019**, *58*, 1976.

Agradecimentos/Acknowledgments

À FAPERJ, CAPES e ao CNPq pelo apoio financeiro. Ao LDRX-UFF, a FAPESP/UFSCAR, o LAME-IQ-UFF e ao laboratório de baixas temperaturas do IF-UFRJ pelo uso de suas infraestruturas laboratoriais.

Área: INO N°de Inscrição: 01292

Cerium phosphate coated with polymers potentially applicable as ultraviolet absorption filters

Marrary das Chagas Silva (PG)¹; **Ayla R. B. S. Galaço** (PG)¹; **Juliana F. Lima** (PQ)², **Oswaldo A. Serra** (PQ)¹

marrary.silva@usp.br; osaserra@usp.br

¹ University of São Paulo, Department of Chemistry, FFCLRP-USP.

² Rio de Janeiro State University, DQGI - IQ - UERRJ

Keywords: Cerium, Ultraviolet Radiation, UV Protection, Sunscreens, Polyvinylpyrrolidone (PVP)

Highlights

Cerium phosphate coated with polymers potentially applicable as ultraviolet absorption filters. Increase of skin cancer related to solar exposition.

Abstract

In the last 50 years have been observed an increase of skin cancer, almost 90% is related to solar exposition. The effects of UV radiation can be reduced by using sunscreens. Inorganic filters with cerium compounds are a good alternative in substitution of zinc and titanium oxides commonly used. Cerium compounds have low catalytic activity and more embracing absorption than the oxides cited, because of that, their use in sunscreens is promissory. Cerium phosphate presents high chemical and thermal stability, low solubility, photochemically inert and ideal size to be included in formulations what is an advantage to sunscreens application. CePO_4 is not soluble in aqueous solution and it prejudices its applicability once it is difficult to be disperse with uniformity in the formulations. One idea to

overcome this problem is to disperse CePO_4 in polymers. The synthesis of CePO_4 was made in presence of polyvinylpyrrolidone (PVP) by homogeneous precipitation. The product of synthesis was characterized by UV-Vis spectroscopy showing high absorption in UV-A and UV-B, Infrared spectroscopy with vibrational frequencies corresponding to tetrahedral phosphate, and photocatalytic activity. The last one was provided by Rancimat[®] test where the photocatalytic activity of castor oil is strongly reduced in the presence of CePO_4 as shown in Fig 1.

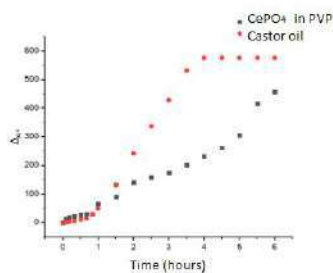


Figure 1. Photocatalytic Activity of Castor Oil and CePO_4 in PVP.

LIMA, J. F.; FIGUEREDO MARTINS, R.; NERI, C. R.; SERRA, O. A.; $\text{ZnO}:\text{CeO}_2$ nanopowders with low catalytic activity as UV absorbers. Applied Surface Science, 255 (2009) 9006-9009.

BOUTARD, T.; ROUSSEAU, B.; COUTEAU, C. et al. Comparison of photoprotection efficiency and antiproliferative activity of ZnO commercial sunscreens and CeO_2 . Materials Letters, 108 (2013) 13-16.

Acknowledgments

The authors would like to thank Brazilian agencies CAPES, CNPq and FAPESP for the financial support for this work.

Área: MED

Nº de Inscrição:01293

New hybrid trifluoromethylquinolines as antiplasmodium agents

Renata M. R. J. da Silva (PQ),^{1,2} Marília O. Gandi (PG),^{1,2,3} Jorge S. Mendonça (PQ),^{1,2} Alcione S. Carvalho (PQ),² Julia Penna Coutinho (PQ),³ Anna C. C. Aguiar (PQ),³ Antoniana U. Krettli (PQ)³ and Nubia Boechat (PQ)^{2*}

mariliaolivagandi@gmail.com; nubia.boechat@far.fiocruz.br

¹Programa de Pós-Graduação Farmacologia e Química Medicinal, Instituto de Ciências Biomédicas, UFRJ, Av. Carlos Chagas, 373 - bl. K, 2º andar, sala 35 - Prédio do Centro de Ciências da Saúde, Cidade Universitária, Ilha do Fundão - Rio de Janeiro - RJ, 21941-902, Brazil; ²Departamento de Síntese Orgânica, Instituto de Tecnologia em Fármacos - Farmanguinhos - Fiocruz, Rua Sizenando Nabuco, 100 Manguinhos, Rio de Janeiro - RJ, 21041-250, Brazil; ³Faculdade de Farmácia Universidade Iguazu-UNIG, Av. Abílio Augusto Távora, 2134. Nova Iguaçu – RJ, 26275-580, Brazil; ⁴Laboratório de Malária, Instituto René Rachou, Fiocruz/MG, Avenida Augusto de Lima, 1715, Barro Preto, Belo Horizonte - MG, 30190-002, Brazil de Química, UFJGG.

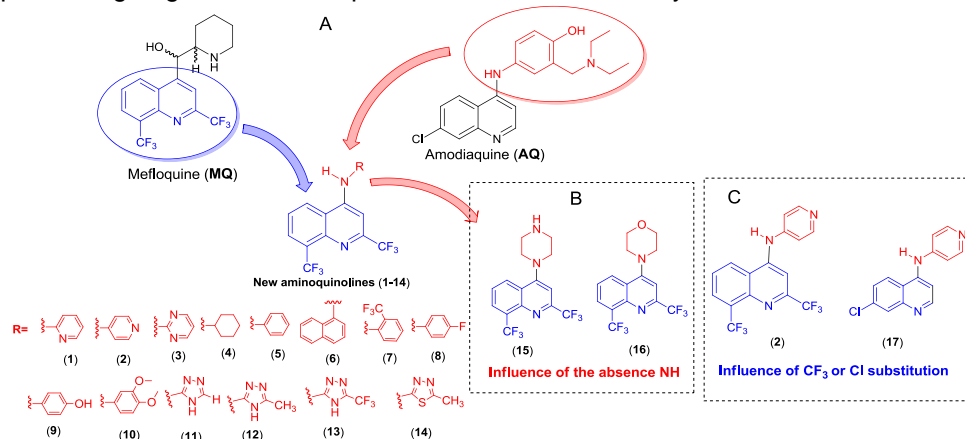
Keywords: Malaria; *P. falciparum*; Quinoline; Hybrids; Mefloquine; Amodiaquine

Highlights

We designed and synthesized seventeen novel quinolines using tool of medicinal chemistry. All compounds exhibited anti-*P. falciparum* activity *in vitro* and three showed antimalarial activity.

Resumo/Abstract

Malaria remains a major public health problem worldwide, and it is responsible for high rates of morbidity and mortality. Resistance to current antimalarial drugs has been identified, and new drugs are urgently needed. In this study, we designed and synthesized seventeen novel quinolines based on the structures of mefloquine and amodiaquine using ring bioisosteric replacement and molecular hybridization of the functional groups.



The compounds were evaluated *in vitro* against *P. falciparum* and *in vivo* in mice infected with *P. berghei*. All derivatives presented anti-*P. falciparum* activity with IC₅₀ values ranging from 0.083 to 33.0 μM. The compound with the best anti-*P. falciparum* activity was N-(5-methyl-4H-1,2,4-triazol-3-yl)-2,8-bis(trifluoromethyl)quinolin-4-amine (12) which showed an IC₅₀ of 0.083 μM. The three most active compounds were selected for antimalarial activity tests against *P. berghei*-infected mice. Compound 12 was the most active on the 5th day after infection, reducing parasitemia by 66%, which is consistent with its *in vitro* activity. This is an important result as 12, a simpler molecule than mefloquine, does not contain the stereogenic center, and consequently, its synthesis in the laboratory is easier and less expensive. This system proved promising for the design of potential antimalarial compounds.

Acknowledgments: CAPES - Finance Code 001; CNPq; FAPERJ; FAPEMIG; FIOTEC

References and notes: -Malaria site: all about Malaria 2018 Available online: <http://www.malariasite.com/> accessed in July 2018; -World Health Organization (WHO) 2018 Malaria <http://www.who.int/en/news-room/fact-sheets/depril/malaria> accessed in July 2018; - Boechat, N. *et al.* *Molecules*, 2012, 17, 8285.

Área: ELE

Nº de Inscrição: 01295

Nanometric manganese dioxide/activated carbon composite as electrode material of supercapacitors

Samuel H. Mattoso (IC),^{1*} Juliana B. Falqueto (PG),¹ Nerilso Bocchi (PQ),¹ Rafael L. Zornitta (PG),² Luís Augusto M. Ruotolo (PQ),² Romeu C. Rocha-Filho (PQ),¹ Sonia R. Biaggio (PQ)¹

mattosopiano@gmail.com

¹Dep. of Chemistry; ²Dep. of Chemical Engineering, UFSCar, C.P. 676, 13560-970 São Carlos, SP, Brazil.

Keywords: Supercapacitor, Manganese dioxide, Activated carbon, Composite.

Highlights

A new nanometric MnO₂/activated carbon (from polyaniline) composite is proposed for use as electrode material for supercapacitors, yielding promisingly high specific capacitance values.

Abstract

Manganese dioxide (MnO₂) is being intensively studied as electrode material for supercapacitors due to its low cost, low toxicity and high theoretical specific capacitance. However, this material has limitations such as a low conductivity and specific surface area (SSA), which are important attributes for use in energy storage devices.¹ With the aim of minimizing those limitations, the ongoing work is investigating a composite material consisting of nanometric MnO₂ and activated carbon from polyaniline (PAC) with values of conductivity and SSA much larger than those of the MnO₂. Nanometric MnO₂ in the potassium birnessite phase was synthesized via a hydrothermal microwave methodology using KMnO₄ as the manganese precursor and acetone as the reducing agent. The reaction was performed in a microwave reactor (850 W) at 100 °C under magnetic stirring for 5 min.² As described by Zornitta *et al.*³, PAC was obtained by carbonizing polyaniline doped with *p*-toluenesulfonate in a tubular furnace at 500 °C under N₂ atmosphere, activated with KOH and submitted to another heat treatment at 850 °C also under N₂ atmosphere. The resulting material was then washed with a HCl solution. The composite electrodes were prepared by mixing MnO₂, PAC and polyvinylidene difluoride in the mass proportion of 50:45:5, respectively, and dispersed in *N*-methylpyrrolidone, resulting in a slurry that was deposited on graphite substrates by dropping. Cyclic voltammetry (CV) and charge/discharge tests (CD) were performed to electrochemically characterize these electrodes, as shown in Fig. 1. From these measurements, the calculated values of specific capacitance were 4.2 × 10² F g⁻¹ at 1 mV s⁻¹ and 4.6 × 10² F g⁻¹ at 0.5 A g⁻¹, respectively. Such preliminary results indicate that the nanometric MnO₂/PAC composite is a promising electrode material for use in supercapacitors. New experiments are now in progress in our laboratory to investigate the effect on the capacitance response of different mass proportions of nanometric MnO₂ and PAC in the composite material.

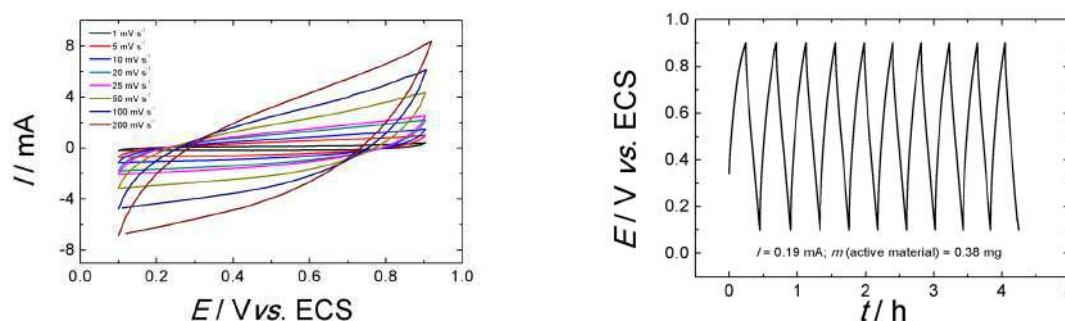


Figure 1: CV and CD tests obtained for a MnO₂/PAC electrode in 0.1 mol L⁻¹ Na₂SO₄, using Pt as counter electrode.

References:

1. WANG, G.; ZHANG, L.; ZHANG, J. A review of electrode materials for electrochemical supercapacitors. *Chem. Soc. Rev.*, **41**, 797, 2012.
2. ZUTIM, P. Synthesis, characterization and electrochemical tests of nanometric manganese dioxide as supercapacitors electrode material. São Carlos, PPGQ – UFSCar (Master's Dissertation), 2018.
3. ZORNITTA, R.L.; GARCÍA-MATEOS, F.J.; LADO, J.J.; RODRÍGUEZ, J.; CORDERO, T.; HAMMER, P.; RUOTOLO, L.A.M. High-performance activated carbon from polyaniline for capacitive deionization. *Carbon*, **123**, 318, 2017.

Acknowledgments

São Paulo Research Foundation – FAPESP (grant no. [2018/19759-0](#)), CNPq and CAPES.

Área: MEDNº de Inscrição: 01296

A multidimensional liquid chromatography method for monitoring on flow the activity of PNP-Mt immobilized enzyme

Ananda C. de Castro (IC)¹, Diógenes S. Santos (PQ)², Leonardo K. B. Martinelli (PQ)², Luiz Augusto Basso (PQ)², Marcela C. de Moraes (PQ)^{1*}

ananda_villa@hotmail.com; mcmoraes@id.uff.br

¹Departamento de Química, UFF; ²Centro de Pesquisas em Biologia Molecular e Funcional, PUC-RS

Palavras Chave: Biocromatografia, Multidimensional, Purina Nucleosídeo Fosforilase, Inibidor, Tuberculose.

Highlights

A multidimensional LC method was developed and validated for monitoring on flow the activity of PNP-Mt immobilized onto the internal surface of fused silica capillaries. Kinetic and inhibition studies were conducted with proposed method.

Abstract

Purine Nucleoside Phosphorylase (PNP) is a key enzyme in the purine salvage pathway and catalyzes the cleavage of deoxyribonucleosides to the corresponding purine base and sugar-1-phosphate in presence of inorganic phosphate (Pi). PNP from Mycobacterium tuberculosis (MtPNP) has been considered an attractive target for drug development against tuberculosis^[1]. Therefore, the development of analytical tools for the fast identification of specific inhibitors for this enzyme has become an interesting task. A promising approach is the use of immobilized enzymes reactors (IMERs) for on-flow screening studies. MtPNP-IMER was prepared by the covalent immobilization onto a fused silica capillary, based on previously published conditions for human PNP^[2]. For the on-flow multidimensional chromatography activity assay, the MtPNP-IMER was inserted in the first dimension (HEPES 100 mM pH 7.4, 0.05 mL/min) and an octyl column (Phenomenex Chrospher RP-8, 150 x 4.6mm, 5 μ M, 100 Å) in the second dimension. Inosine and the formed hypoxanthine, respectively substrate and product of the enzymatic reaction, were separated in the analytical column by the use of a mobile phase containing 1% TEA pH 6.0: MeOH (95:5), at a flow rate 0.8 mL/min, and $\lambda = 249$ nm. The activity of the immobilized MtPNP was monitored by the direct quantification of formed hypoxanthine. Kinetic studies showed that the K_M value for the substrate inosine using the immobilized enzyme ($59,19 \pm 2,61 \mu\text{M}$) is similar to that one measured for the enzyme in solution ($40 \pm 3 \mu\text{M}$)^[3]. The kinetic study for the phosphate substrate using the immobilized enzyme ($614,79 \pm 113,85 \mu\text{M}$), also showed results close to the free enzyme ($583 \pm 108 \mu\text{M}$)^[3]. In the characterization of the DI4G inhibitor, was possible to determine an unprecedented IC_{50} value for Mt-PNP ($29,85 \pm 1,02 \text{nM}$). The inhibition mechanism exhibited a characteristic behavior of competitive inhibition with the inosine substrate and the inhibitor showed high affinity for the enzyme with $K_i = 34.79 \text{nM}$. These results revealed that the immobilized MtPNP retained its catalytic activity and represents a useful way of reutilizing the same amount of enzyme in diverse assays. Including in the screening of new inhibitors of MtPNP that can now be compared with the standard inhibitor DI4G by IC_{50} values.

^[1] R.G. Ducati et al./Archives of Biochemistry and Biophysics 486 (2009) 155–164

^[2] Moraes, M. C.; et all. Capillary bioreactors based on human purine nucleoside phosphorylase: A new approach for ligands identification and characterization. Journal of Chromatography (Print), v. 1232, p. 110-115, 2012.

^[3] Ducati, R.G. Especificidade de substrato e mecanismo cinético da enzima fosforilase de nucleosídeos purínicos de Mycobacterium tuberculosis. 2009. 68 f. Tese (Doutorado em Biologia Celular e Molecular) - Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre.

Acknowledgments



Influência do pH em amostras de vinho tinto colonial contendo antocianinas

Ana Karoliny S. Gomes (IC)^{1*}, Ygor R. Romano (IC)¹, Karen M. Silva (IC)², Louize A. E. Schneider (IC)¹, Natália C.T. Bender (IC)¹, Cássio Pacheco da Silva (PG)², Frank Herbert Quina (PQ)² e Leidi Cecilia Friedrich (PQ)^{*1}

*anakrol12.aksq@gmail.com

¹Universidade Federal do Paraná – Setor Palotina, Departamento de Engenharias e Exatas, Rua Pioneiro 2153, 85950-000, Palotina-PR; ²Instituto de Química, Universidade de São Paulo, Av. Lineu Prestes 748, Cidade Universitária, 05508-000, São Paulo-SP.

Palavras Chave: Vinho tinto, Flavonóides e pKa.

Highlights

Influence of pH on samples of colonial red wine containing anthocyanins. The data obtained show the effect of the pH in stability of anthocyanins present in wines samples.

Resumo/Abstract

As antocianinas são moléculas pertencentes ao grupo dos flavonoides (polifenóis) e compreendem o maior conjunto de pigmentos solúveis em água do reino vegetal. Essas moléculas são responsáveis pela cor de muitas frutas e legumes, como a uva e também são consideradas na indústria de alimentos como candidatas a corantes naturais alternativos aos aditivos corantes alimentares sintéticos. Entretanto, o seu uso ainda apresenta algumas limitações, pois diversos fatores físico-químicos influenciam a sua estabilidade. Um desses fatores é o pH, na qual as antocininas apresentam uma boa estabilidade em meio ácido. O objetivo desse trabalho é mostrar a influencia do pH em amostras de vinho tinto colonial.

O efeito do pH sobre os espectros de absorção indicaram uma banda de absorção molecular por volta de 520 nm, sendo essa banda bastante característica das antocianinas. À medida que o pH do meio começa a aumentar essa banda de absorção começa a perder intensidade, mostrando que as antocianinas começam a ser degradadas. Todos esses resultados confirmam o comportamento dessa classe de composto, já reportado na literatura¹, em relação ao efeito do pH sobre as estabilização de antocianinas naturais. E, com isso, para a amostra de vinho contendo antocianinas, obteve-se um pKa de 1,6.

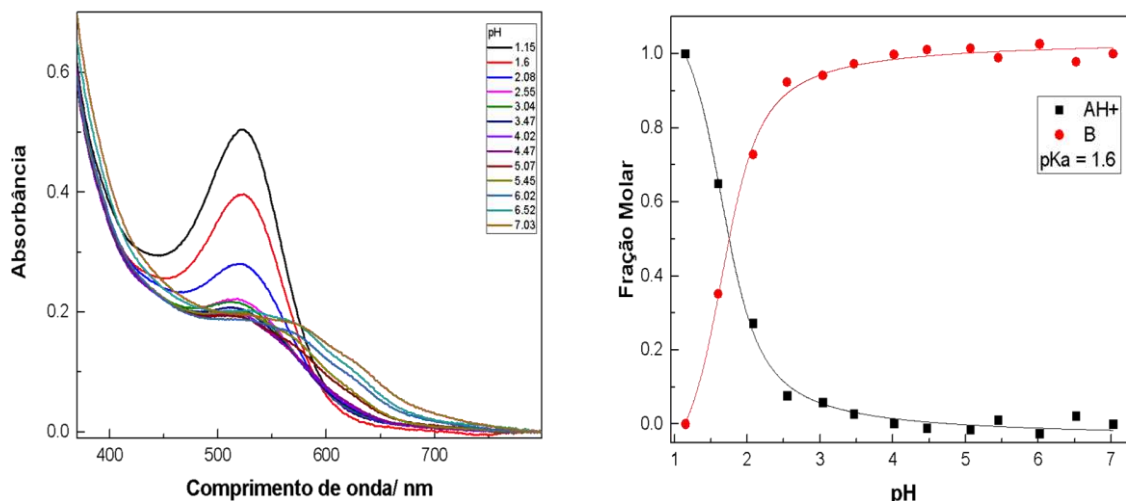


Figura 1: Espectro de absorção de antocianinas presente no vinho tinto em diferentes pHs e variação da fração molar das espécies presentes em meio aquoso, AH⁺ cátion flavílio e B base quinonoidal.

¹Santos-Buelga, C.; Mateus, N.; Freitas, V. J. Agricultural and Food Chemistry, 2014, 62, 6879-6884.

Agradecimentos/Acknowledgments

CNPq

42ª Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química: Eixos Mobilizadores em Química

Caracterização de Membranas de Celulose Bacteriana Oxidadas Seletivamente

Sandrielle Streit (IC),¹ Barbara S. Inoue (PG),^{2*} Andréia L. S. Schneider (PQ),² Marcia M. Meier (PQ),¹

sandrielle.streit@edu.udesc.br; marcia.meier@udesc.br

¹Departamento de Química, Universidade do Estado de Santa Catarina (UDESC); ²Departamento de Engenharia Química, Universidade da Região de Joinville (UNIVILLE)

Palavras Chave: Celulose Bacteriana, Cristalinidade, Grau de Oxidação, FTIR

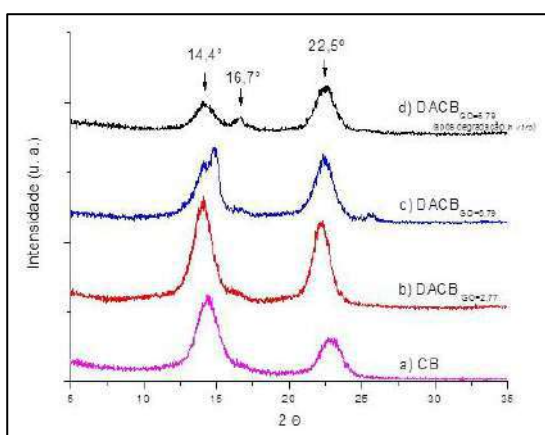
Highlights

Characterization of Selectively oxidized Bacterial Cellulose membranes. A selective oxidation of the chemical structure of bacterial cellulose (CB) was performed using NaIO_4 to form 2,3-dialdehyde cellulose (DACB), crystallinity and chemical structure were investigated.

Resumo/Abstract

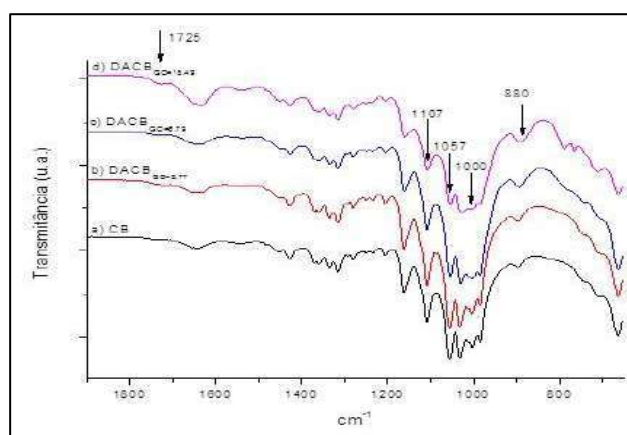
A celulose bacteriana (CB) é um biomaterial muito promissor para o tratamento de doenças periodontais, atuando como barreira durante o processo de regeneração tecidual guiada. O presente trabalho teve por objetivo promover a oxidação seletiva da estrutura química da CB, utilizando metaperiodato de sódio (NaIO_4), formando 2,3-dialdeído celulose bacteriana (DACB)¹. Três métodos de oxidação foram testados gerando diferentes graus de oxidação (GO): 2,8 %; 6,8 %; 15,5 %, indicando que o teor de grupos aldeídos formados é diretamente proporcional à concentração de NaIO_4 usada na oxidação. A difratometria de Raio-X (Figura 1) mostrou a perda de cristalinidade e sua dependência com GO. Medidas de FTIR (Figura 2) mostram a alteração dos sinais atribuídos às ligações ν C-O e ν C-C entre 1100 a 980 cm^{-1} , devido a formação de grupos aldeídos e quebra das ligações C2-C3 das unidades de glicose.

Figura 1: Difractogramas de Raio-X da CB, DACB_{GO=2,77}, DACB_{GO=15,49} e DACB_{GO=6,79}



Fonte: elaborado pelas autoras, 2018.

Figura 2: Espectros de FTIR da CB, DACB_{GO=2,77}, DACB_{GO=15,49} e DACB_{GO=6,79}



Fonte: elaborado pelas autoras, 2018.

Agradecimentos/Acknowledgments

A UDESC, FAPESC e CNPq. O presente trabalho foi realizado com apoio da Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior - Brasil (CAPES) - Código de Financiamento 001.

¹ SIGH, M.; RAY, A. R.; VASUDEVAN, P. Biodegradation studies on periodate oxidized cellulose. *Biomaterials*, v.3, p.16–20, 1982.

Photodegradation of the methylene blue dye using composites formed by MOFs and TiO₂ nanotubes

Emanuely José de Souza (PG)^{1,2*}, Giovanna Machado (PQ)^{1,2}, Bráulio Silva Barros (PQ)³

emanuelysouza.quimica@hotmail.com

¹Centro de Ciências Exatas e da Natureza, UFPE; ²Centro de Tecnologias Estratégicas do Nordeste – CETENE;

³Departamento de Química Fundamental, UFPE.

Keywords: Advanced oxidation process, Methylene blue, MOFs, Photocatalysis, TiO₂.

Highlights

The efficiency in the photodegradation of methylene blue solutions using MOFs with TiO₂ nanotubes irradiated by a solar simulator. The properties were characterized by UV-Vis and BET techniques.

Resumo/Abstract

Currently, the environment faces water pollution problems due to various industry sectors, in which several dyes are being used, and they cause contamination when rejected^a. They are hardly removed by traditional effluent treatment, and new processes are needed to reduce or eliminate these pollutants^b. Among them, the advanced oxidative processes (AOP) deserve attention. AOP used in this work was the heterogeneous photocatalysis provided with the synthesis of the composite formed by metal-organic frameworks (MOFs) and TiO₂ nanotubes (NT TiO₂). NT TiO₂ were obtained by anodization method. Typically, a potential of 30 V was applied to Ti foil and subsequent heat treatment. The composites were produced together with the syntheses of the MOFs. For the MOFs, titanium and iron were the metal precursors; the linkers were amino terephthalic acid and terephthalic acid. The composites formed were irradiated by solar simulator with a 150 W power xenon lamp for 180 minutes concomitantly with the methylene blue solution of 15 mg.L⁻¹. The degradation results indicate that the NT TiO₂ / MIL-125-NH₂ composite with 53.9% degraded dye. It is evident that the modification (addition of amino group) significantly improved the photocatalytic property, probably this material presented band gap more favorable for the photodegradation. Another aspect to be discussed is the photogenerated electrons, it is believed that the electrons originated from the conduction band of the MIL-125-NH₂ were transported to the TiO₂, allowing the separation of pairs e/h⁺, further increasing the degradation of the dye.

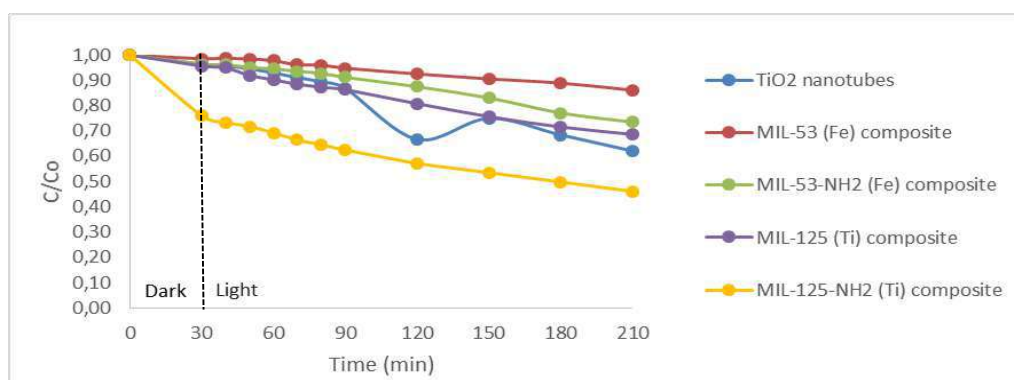


Figure 1. Comparison of the dye degradation against the different composites of titanium and iron

^aRUPA, E. J., ANANDAPADMANABAN, G., MATHIYALAGAN, R., YANG, D-C. Synthesis of zinc oxide nanoparticles from immature fruits of *Rubus coreanus* and its catalytic activity for degradation of industrial dye. *Optik*. v. 172, p. 1179-1186, 2018.

^bMURUGANANDHAM, M., SOBANA, N., SWAMINATHAN, M. Solar assisted photocatalytic and photochemical degradation of Reactive Black 5. *Journal of Hazardous Materials*. v. 137, p. 1371-1376, 2006.

Polímero de coordenação unidimensional de cobalto(II) com o diânion croconato e sulfeto de di(4-piridila): Preparação e Caracterização Estrutural.

Elias C. C. Belo (IC),^{1*} Sâmella C. J. Pfau (IC),¹ Siddharta O. K. Giese (PQ),¹ Humberto O. Stumpf (PQ)² Maria Vanda Marinho (PQ),³ Tatiana R. G. Simões (PQ)^{1*}

eliascoutocb@gmail.com; tatianarenat@gmail.com

¹Departamento de Química, Universidade Federal do Paraná, Curitiba – PR;

²Departamento de Química, Universidade Federal de Minas Gerais, MG, Brasil;

³Instituto de Química, Universidade Federal de Alfenas, Alfenas - MG

Palavras Chave: Polímeros de coordenação, Croconato, Sulfeto de di(4-piridila), Cobalto(II)

Highlights

One-dimensional cobalt-based coordination polymer with croconate dianion and di(4-pyridyl)sulfide: Preparation and Structural characterization.

- Use of the croconate and di(4-pyridyl) sulfide as spacer ligands;
- New coordination polymer with cobalt(II);
- Infrared analysis and Single-crystal ray-X diffraction.

Resumo

A construção de polímeros e redes de coordenação pelo processo de auto-organização de ligantes polidentados e íons de metais de transição é uma área de pesquisa em rápido crescimento.¹ Recentemente, a química de coordenação de íons de metais de transição usando oxocarbonos aromáticos benzenoides, $C_nO_n^{2-}$ ($n=5$, croconato) teve considerável atenção, pois esses ligantes possuem elétrons π extensivamente delocalizados em todo o anel dos átomos de carbono e oxigênio. Estes podem servir como ligantes polidentados para coordenar metais via vários modos de ligação.² Portanto, para a obtenção de um sistema estendido, neste trabalho utilizamos o ânion croconato, o íon cobalto(II) e o ligante flexível sulfeto de di(4-piridila) (4-dps) devido à versatilidade de suas conformações estruturais.³ Monocristais adequados para o experimento de difração de raios X por monocristal do composto $\{[Co(C_5O_5)(dps)(H_2O)_2] \cdot 2H_2O\}_n$ (**1**) foram obtidos a partir da mistura de soluções de sais de cobalto(II), croconato e do ligante 4-dps. O espectro de absorção na região do IV de **1** apresentou bandas em 3198 (m); (ν_{CH}), 3059 (m); ($\nu_{CC/CO/CN}$), 1662 (m), 1593 (s), 1518 (s), 1475 (s), 1419 (s); δ (anel piridínico), 1219 (m); δ_{CH} , 725 (m) que indicam a presença dos ligante 4-dps e croconato. A análise estrutural de **1** mostra a formação de um composto polimérico neutro em que cada íon Co(II) está ligado ao diânion croconato, o qual atua no modo de coordenação bidentado (Figura 1a). A extensão do polímero se dá através do ligante 4-dps que atua no seu modo de coordenação bis(monodentado) em ponte (Figura 1b). Completando a esfera de coordenação do íon cobalto(II) há duas moléculas de água, levando a uma geometria octaédrica distorcida. Na rede cristalina ainda pode ser observado duas moléculas de água de cristalização. As demais análises de caracterização estão em andamento e medidas magnéticas serão realizadas a fim de estudar a interação dos centros metálicos no polímero obtido.

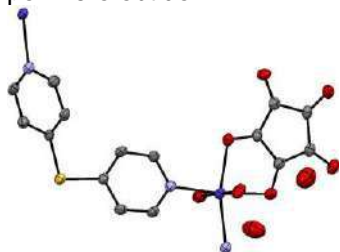
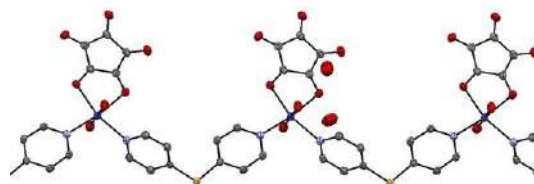


Figura 1.a) Unidade assimétrica de 1.



b) Representação do polímero 1.

Agradecimentos

¹Erleben, A.; *et al. Coordination Chemistry Reviews*, **2003**, 246, 203-228

²Manna, S. C.; *et al. Polyhedron*, **2007**, 26, 1105-1112

³Marinho, M. V.; *et al. Polyhedron*, **2012**, 45, 1-8



Mixed Matrix Membranes with MIL-53(Al) for gas separation

Jussara L. Miranda¹(PQ), Tatiana P. Abreu^{1*}(PG), Helen C. Ferraz²(PQ), Luiza C. Moura¹(PQ)

jussara@iq.ufrj.br ; tatiana.abreu26@gmail.com

¹Instituto de Química, UFRJ; ²Programa de Engenharia Química, COPPE, UFRJ.

Keywords: Metal Organic Frameworks, CO₂ capture, Polymer Membranes, Mixed Matrix Membranes

Highlights

Mixed matrix membranes with aluminium MOF were tested for permeability to CO₂, CH₄, N₂ and O₂ in order of testing their efficiency in gaseous separations and to making the process cheaper.

Resumo/Abstract

Metal-Organic Frameworks (MOFs) have been reported as materials for gas storage and separation¹. However, its cost for commercialization and consequent implementation is still high. The high selectivity of MOF can be exploited their dispersion in a polymer matrix. In this work, mixed matrix membranes were synthesized with dispersed MOF MIL-53(Al). The methodology of mixed membrane matrix synthesis (MMM) was done using modifications of Musselman² and Ferraz³. MMMs were analyzed by Scanning Electron Microscopy, Termogravimetric analysis and permeability analyses at 4 bar (Fig.1).

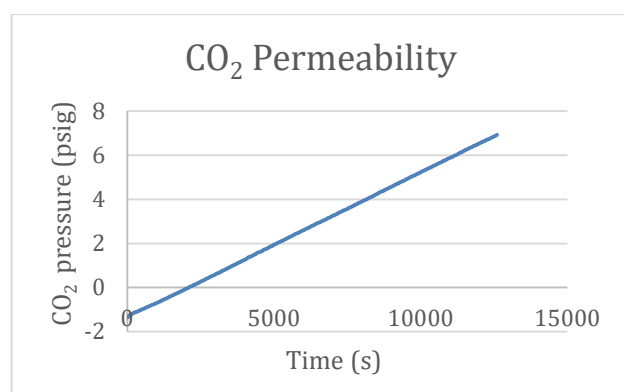


Figure 1. Permeability analyses of MMM for CO₂.

| Permeability at 4 bar (Barrer) | | |
|--------------------------------|---------|------|
| Gas | Polymer | MMM |
| CO ₂ | 42 | 82 |
| CH ₄ | 4.5 | 6.3 |
| N ₂ | 0.8 | 1.8 |
| O ₂ | 4 | 6.3 |
| Selectivity | | |
| α_{CO_2/CH_4} | 9.3 | 13 |
| α_{CO_2/N_2} | 52.5 | 45.5 |
| α_{CO_2/O_2} | 10.5 | 13 |
| α_{O_2/N_2} | 5 | 3.5 |

Table 1. Pure gas permeability and ideal selectivity of MMM and Polymer.

SEM of mixed matrix membrane showed a good dispersion of the MOF in the polymer. The termogravimetric analysis showed that MMM present thermal stability, decomposing at 573K. Pure gas permeability is determined by permeate side pressure increase, using a pressure transducer. The pressure vs. time graph indicates the pressure of the permeate gas (Fig.1). MMM containing MIL-53(Al) showed greater permeability compared to polymer for all gases. This indicates that the addition of MOF in the polymer matrix facilitates permeation due to the high adsorption capacity of MIL-53 (Al). MMM shows good selectivity over the polymer indicating that MMM is material with good potential in the gas separation field.

1. FALABELLA, E. S. A., ARROYO, P. A.; BARROS, M. A. S. D. and MIRANDA, J. L. The Future of Zeolite and MOF Materials in Zeolites and Metal-Organic Frameworks From lab to industry Edited by Blay, V.; Bobadilla, L. F and Garcia, A. C. Atlantis Press B.V. Amsterdam University Press B.V., Amsterdam 2018.
2. MUSSELMAN I.; et.al.; Microporous and Mesoporous Materials, 2014.
3. FERRAZ, H.; MIRANDA J. et.al.; Separation and Purification Technology, 2018.

Agradecimentos/Acknowledgments

CAPES
Pós-Graduação em Química, PGQu, IQ-UFRJ.

Área: INO

Nº de Inscrição: 01302

Heterogeneous catalysts as cytochrome P450 model: evaluation of catalytic activity in oxidation of triazine herbicides

Juliana A. Corrêa (IC)¹, Fabrício B. Zanardi (PG)¹, Lucas D. Zanatta (PG)¹, Yassuko Iamamoto* (PQ)¹

juliana.a.correa@hotmail.com; iamamoto@usp.br

¹Departamento de Química, Faculdade de Filosofia Ciências e Letras de Ribeirão Preto – USP – Brazil.

Keywords: Biomimetic catalysis, Metalloporphyrin, Heterogeneous catalysis, Magnetic composite, Cytochrome P450

Highlights

Manganese porphyrins were immobilized on magnetic composites with two different pore size. The catalysts were applied, as cytochrome P450 model, in the oxidation of three triazine herbicides.

Abstract

This work reports the continuation of studies of biomimetic catalysis with heterogeneous catalysts presenting two different pore size ($\text{Fe}_3\text{O}_4@n\text{SiO}_2@\text{MCM-41-MnP}$ and $\text{Fe}_3\text{O}_4@n\text{SiO}_2@\text{MCM-41(E)-MnP}$) [1]. Such systems combine the catalytic properties of metalloporphyrins (MeP) with the properties of magnetic nanoparticles (Fe_3O_4) and mesoporous MCM-41 silica matrix. The synthesis of Fe_3O_4 nanoparticles was followed by the surface coating with a thin silica layer ($\text{Fe}_3\text{O}_4@n\text{SiO}_2$) [2]. Then, it was performed the preparation of the mesostructured composites ($\text{Fe}_3\text{O}_4@n\text{SiO}_2@\text{MCM-41}$ and $\text{Fe}_3\text{O}_4@n\text{SiO}_2@\text{MCM-41(E)}$). In this step, mesitylene was incorporated as a structure expanding agent, thus yielding the $\text{Fe}_3\text{O}_4@n\text{SiO}_2@\text{MCM-41(E)}$ solid. The resulting composites were further functionalized with aminopropyl groups by the silylating agent APTES. This enabled the covalent immobilization of 5,10,15,20-

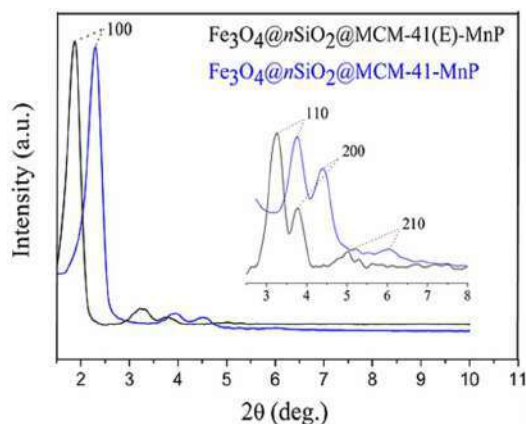


Fig.1: XRD patterns at low diffraction angles for the MCM-41 from the catalysts.

tetrakis(pentafluorophenyl) porphyrin manganese (III) (MnTPFPP) onto the composites via aromatic nucleophilic substitution reaction, to afford the $\text{Fe}_3\text{O}_4@n\text{SiO}_2@\text{MCM-41-MnP}$ and $\text{Fe}_3\text{O}_4@n\text{SiO}_2@\text{MCM-41(E)-MnP}$ catalysts. The XRD (Figure 1) [1] analysis confirmed that the hexagonal pore arrangement of MCM-41 silica was maintained in both catalysts. The expansion of the pores was confirmed by analysis of N_2 adsorption-desorption isotherms (2,48 nm for $\text{Fe}_3\text{O}_4@n\text{SiO}_2@\text{MCM-41-MnP}$ and 3,03 nm for $\text{Fe}_3\text{O}_4@n\text{SiO}_2@\text{MCM-41(E)-MnP}$). The catalytic performance of these systems was evaluated employing hydrocarbons, and showed excellent results [1]. In this sense, in order to evaluate the catalytic performance in the oxidation of more complex substrates, the catalysts are being tested in the biomimetic oxidation of triazine herbicides (terbuthylazine, atrazine and simazine). These are organochloride herbicides used in different agricultural crops in Brazil, such as, sugarcane, coffee, corn, rice and

cotton. Preliminary results with MnTPFPP, in homogeneous medium, were obtained in order to compare with the results of the heterogeneous catalysts. The catalysis in homogeneous medium shows that N-deethylation reaction is favored to occur than the N-deisopropylation reaction for all tested herbicides. The catalytic results in heterogeneous medium are being obtained.

Acknowledgments

The authors thank the Brazilian agencies CAPES, CNPQ and FAPESP (Proc. 2018/16679-6 (IC), 2018/17352-0 (IC) and 2018/18060-3 (PQ)).

[1] Zanardi, F. B. et al. Microporous Mesoporous Mater. 219 (2016) 161-171.

[2] Xu, Z. et al. J. Phys. Chem. C 114 (2010) 16343-16350.

[3] Ritter, H. et al. Microporous Mesoporous Mater. 121 (2009) 79-83.

Thiopheneporphyrins as biomimetic models of cytochrome P450: evaluation of catalytic activity in oxidation of triazine herbicides

Kelita Angelo de Paula (IC)¹, Fabrício B. Zanardi (PG)¹, Kleber T. de Oliveira (PQ)², Yassuko Iamamoto* (PQ)¹

kelita.paula@usp.br, iamamoto@usp.br

¹Departamento de Química, Faculdade de Filosofia Ciências e Letras de Ribeirão Preto – USP – Brazil.

²Departamento de Química, Universidade Federal de São Carlos – UFSCar – Brazil.

Keywords: Porphyrins, Biomimetic catalysis, Herbicides, Cytochrome P450

Highlights

Meso-tetrathienyl porphyrins synthesized with nitro groups, in order to explore how the presence of electron-withdrawing groups affects the catalysis.

The catalysts were applied in oxidation of three triazine herbicides.

Abstract

The heme enzymes present in the cytochrome P450 (P450) superfamily, are responsible for promoting several specific reactions under ambient conditions, among which the ability to functionalize C-H bonds and to promote selective oxidations is highlighted. In order to understand the catalytic potential of enzymes, several studies have focused on the preparation of synthetic porphyrins, known as metalloporphyrins (MeP), that are catalytically active, able to mimic the oxidation reactions that occur in the P450 enzymes. In this sense, this work consists of analysing the catalytic potential of thiopheneporphyrins, a class of porphyrins not exploited in P450 biomimetic catalysis. Therefore, the meso-tetra(thien-2-yl)porphyrin (H₂TThP) and 5-(5'-nitrothien-2'-yl)-10,15,20-tri(thien-2'-yl)porphyrin (H₂TTh(NO₂)P) were synthesized according to a literature procedure [1]; thereafter both were metalated with manganese(III) ion to afford the metalloporphyrins MnTThP and MnTTh(NO₂)P (Figure 1), respectively. In order to evaluate the catalytic performance in the oxidation of more complex substrates, the catalysts are being tested in the biomimetic oxidation of triazine herbicides (terbuthylazine, atrazine and simazine). These are organochloride herbicides used in different agricultural crops in Brazil, such as, sugarcane, coffee, corn, rice and cotton. Preliminary results showed that both catalysts MnTThP and MnTTh(NO₂)P favored the N-deethylation than N-deisopropylation reaction, for the atrazine oxidation. Besides that, the MnTTh(NO₂)P catalyst converted atrazine, into its biomimetic metabolite, approximately twelve times more than MnTThP catalyst (10.6% and 0.8%, respectively), indicating the greater reactivity for MnTTh(NO₂)P than MnTThP, probably associated to the presence of electron-withdrawing groups (-NO₂). The catalytic results with others substrates and optimizations are being obtained.

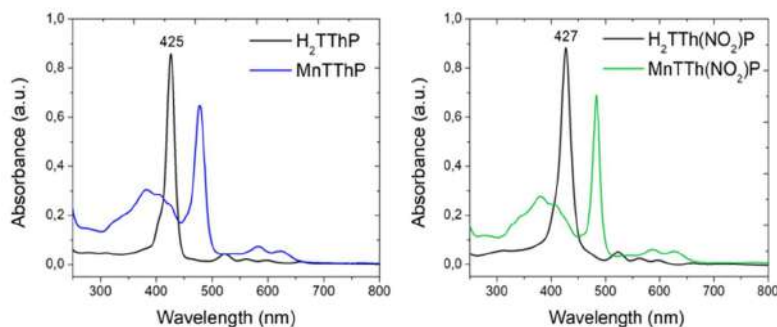


Figure 1. UV-vis analysis of insertion of Mn(III) ion on thiopheneporphyrins

Acknowledgments

The authors thank the Brazilian agencies CAPES, CNPQ and FAPESP (Proc. 2018/16679-6 (IC), 2018/17352-0 (IC) and 2018/18060-3 (PQ)).

[1] Momo, P. B. et al. Eur. J. Org. Chem. 2014, 21, 4536.

Design, synthesis and trypanocidal activity of 5-nitroimidazolic analogues of benznidazole

Ana Luiza S. Chagas (IC), ^{1,2} Carine R. Santos (PG), ^{2,3} Policarpo A. S. Junior (PQ), ⁴ Alcione S. de Carvalho (PQ), ² Nubia Boechat (PQ)²

alcione.carvalho@far.fiocruz.br; nubia.boechat@far.fiocruz.br

¹Química Industrial, Instituto de Química, Universidade Federal Fluminense-UFF, R. São João Batista, 2-188 - Centro, Niterói - RJ, 24210-00; ²Departamento de Síntese Orgânica, Instituto de Tecnologia em Fármacos -Farmanguinhos - Fiocruz, Rua Sizenando Nabuco, 100 Manguinhos, Rio de Janeiro - RJ, 21041-250; ³Programa de Pós-Graduação Farmacologia e Química Medicinal, Instituto de Ciências Biomédicas, UFRJ, Av. Carlos Chagas, 373 - bl. K, 2º andar, sala 35 - Prédio do Centro de Ciências da Saúde, Cidade Universitária, Ilha do Fundão - Rio de Janeiro - RJ, 21941-902; ⁴Instituto Rene Rachou, Laboratório de Parasitologia Celular e Molecular -Fundação Oswaldo Cruz, Av. Augusto de Lima, 1715 - Barro Preto, Belo Horizonte - MG, 30190-002.

Keywords: Chagas disease; anti-Trypanosoma cruzi; nitroimidazole; benznidazole

Highlights

Continuing the search for new molecular compounds against Chagas disease, this work reports the synthesis and biological evaluation of 5-nitroimidazolic analogues of benznidazole.

Resumo/Abstract

The nitroimidazole is one of the most important class of compounds against *T. cruzi*, due to its remarkable activities. This fact is associated to the nitro group attached to the imidazole ring, such as benznidazole (1) and megazole (2). However, the nitro group has also been associated with toxic activity.¹ Our research group has achieved promising results with the separation of these two activities, demystifying that the nitro group is solely responsible for the toxicological issue, for example compound 3.²⁻⁶ Continuing our study, we present in this work the synthesis of novel 5-nitroimidazoles derivatives (4-6) and their trypanocidal, mutagenic and genotoxic evaluation. These compounds were designed by bioisosterism strategies (Figure 1).

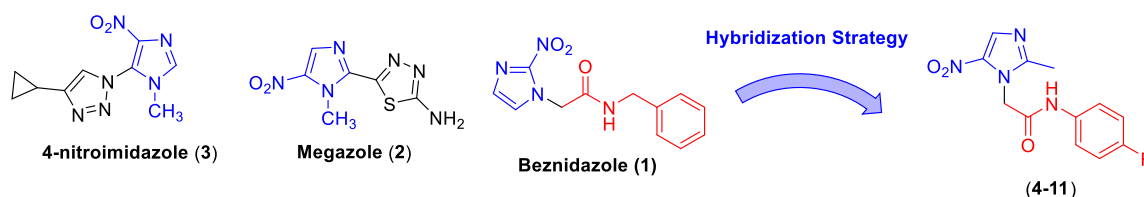


Figure 1. Rational approach to the design of 5-nitroimidazole derivatives (4-11).

The 5-nitroimidazoles derivatives (4-11) were synthesized by the nucleophilic substitution reaction between 2-chloroacetyl chloride and the respective amines, followed by the nucleophilic substitution reaction with 4(5)-nitroimidazole to give the desired products in overall good yields. The 5-nitroimidazoles derivatives were *in vitro* evaluated on trypomastigotes and amastigote forms of *T. cruzi* (Y strain). They will be further evaluated in regard to cytotoxicity and genotoxicity (comet assay) in human blood cells and *in vitro* mutagenicity (Ames test) on *Salmonella enterica* strains. With the results of biological and toxicological activities, it is expected to achieve the goal of the work in obtaining a more active and less cytotoxic substance than its prototype.

Acknowledgments: CAPES - Finance Code 001; CNPq; FAPERJ; FAPEMIG; FIOTEC.

References and notes: ¹José Bermudez, *et al.* *Acta Tropica*, 2016, **156**, 1-16; ²Juan B. Rodrigues, *Expert Opinion on Therapeutic Patents*, 2016, **26**, 993-1015; ³Eric Chatelain, *Journal of Biomolecular Screening*, 2015, **20**, 22-35; ⁴Boechat, N. *et al.* *Cytobios*, 2001, **105**, 83-90; ⁵Carvalho, A.S. *et al.* *Letters in Drug Design & Discovery* 2006, **3**, 98-101; ⁶Carvalho, A.S. *et al.* *Mem Inst Oswaldo Cruz*, 2014, **109**, 315-323; ⁶Boechat, N. *et al.* *Mem Inst Oswaldo Cruz*, 2015, **110**, 492-499.

Área: COL*(Inserir a sigla da seção científica para qual o resumo será submetido. Ex: ORG, BEA, CAT)***Nº de Inscrição: 01306***(Inserir o número de inscrição do autor que fez a submissão)***The nano-bio interface on nanobioplasmonic catalysts: enzyme-gold nanoparticle interaction to enhance enzymatic activity under light****Heloise Ribeiro de Barros (PQ),^{1*} Susana I. C. Torresi (PQ),¹ Pedro H. C. Camargo (PQ)¹****barroshr@usp.br**¹Chemistry Institute, São Paulo UniversityKey words: *designed nanomaterials, plasmonic nanoparticles, nanocatalysis, biocatalysis, CALB.***Highlights**

- Light-enhanced reaction by the stimulus of localized surface plasmon resonance (LSPR)
- Control and enhancement of enzymatic activity under illumination
- Nano-bio interface characterization by biophysicochemical studies

Resumo/Abstract

Nanobioplasmonic catalysts are designed by the association of nanocatalysts and biocatalysts with controlled catalytic properties under illumination since the stimulus of localized surface plasmon resonance (LSPR) of plasmonic nanoparticles.¹ In the present study, the interaction between lipase from *Candida antarctica* fraction B (CALB) and gold nanoparticles (AuNPs) (transmission electron microscopy image, Figure 1A) was analyzed to investigate the enhancement of enzymatic activity under illumination. It was observed that CALB-AuNPs structures led on an enhancement of approximately 30% of product conversion under illumination after 30 minutes of reaction monitoring (Figure 1B). Conversely, the catalytic activity of free CALB (without any support) in dispersion was decreased in the presence of light.

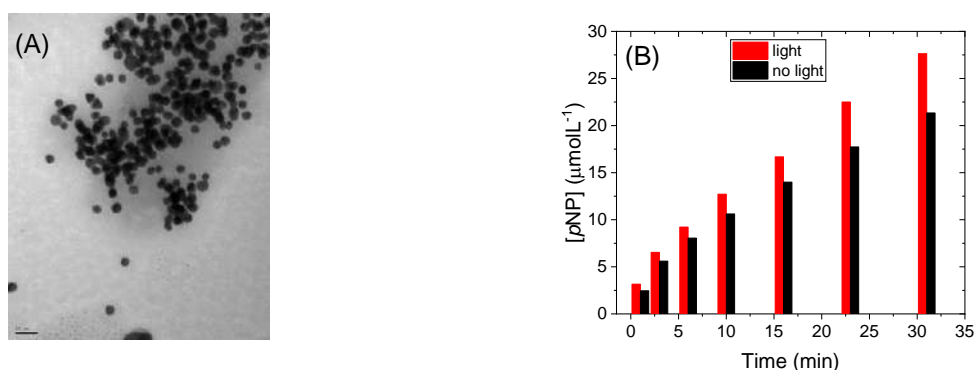


Figure 1. (A) Transmission electron microscopy image of CALB-AuNPs structures (Scale bar: 20nm). (B) Product formation catalyzed by CALB-AuNPs structures under no light and illumination, monitored by the absorbance at UV-Vis spectrum over time.

The enzymatic activity of CALB-AuNPs structures was correlated with their biophysicochemical properties studied by circular dichroism and fluorescence spectroscopy. Additionally, it was associated with the zeta potential values, dynamic light scattering (DLS) and UV-Vis spectroscopy pattern. To elucidate the catalytic behavior under illumination, temperature assays are being carried out to correlated the plasmonic catalytic mechanisms with the changes promoted in CALB conformation. Finally, the CALB-AuNPs structures acted as great nanobioplasmonic catalysts, with control and enhancement of enzymatic activity under illumination. Therefore, nanobioplasmonic catalysts can pave the way for novel approaches of designed materials for green chemistry, biocatalysis and nanocatalysis.

¹Wang, J., et al., *Chem. Eur. J.* 2017, 23(30), 7185-7190.

Agradecimentos/Acknowledgments

FAPESP (grants 2017/20892-4 and 2015/26308-7)

42ª Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química: Eixos Mobilizadores em Química

Lead-free Perovskite Cs₂AgBiI₆ thin film prepared by Ion Exchange of Cs₂AgBiBr₆ thin films

Isabella de Arandas Silva (IC),¹ Willian X. C. Oliveira (PQ),^{1,2} Ana Flávia Nogueira (PQ)¹.

isa.arandas@gmail.com;

¹Laboratório de Nanotecnologia e Energia Solar, Instituto de Química, UNICAMP; ²Departamento de Química, UFMG.

Palavras Chave: Perovskite, Lead-free, Solar cells, Energy, Ion exchange.

Highlights

Lead-free Perovskite Cs₂AgBiI₆ thin film preparation. Iodotrimethylsilane as iodide source for ion exchange. Structural and light absorbance evolution with time. Cs₂AgBiI₆ formation and degradation.

Abstract

The humankind's needs for energy is growing, but the environmental impacts must be considered when this demand is supplied. In this aspect, the solar energy is a convenient, clean and inexpensive. Nowadays the commercial solar cells used to harvest light are based on silicon, but recently the perovskite solar cells have emerged as promising technology, but the toxic lead used is a concern and thus, research on replacing this toxic element keeping the good optoelectronic properties is urgently needed. From the possible elements able to substitute lead and keep the perovskite structure, we can highlight the bismuth. It reaches perovskite structure sharing the octahedral sites with a monovalent cation, usually silver. To be processed in solution, halogen atoms are used as anions and the heaviest the atom the better is it light harvesting. However, Cs₂AgBiI₆ has shown to be unstable at ambient atmosphere and once prepared, precipitation gives rise to Cs₃Bi₂I₉, CsI and AgI.^[1] The objective of this work is to prepare Cs₂AgBiI₆ thin films from stable bromide analog by anion exchange and evaluate the time scale of this transformation and stability at different conditions, using UV-visible spectra and X-ray powder diffraction techniques.

Anion exchange was carried out using TMSI (iodotrimethylsilane)^[2] in nitrogen atmosphere. First, we noticed a visible color change of the films: from yellow (bromide perovskite film^[3]) to dark red (possible Cs₂AgBiI₆) and then to orange when exposed to air and/or moisture (Cs₃Bi₂I₉). The Cs₂AgBiBr₆ consumption was monitored by the bleaching at the background of 437 nm maxima at UV-visible spectra and the degradation of Cs₂AgBiI₆ with the appearance of a narrower band at 494 nm, associated with Cs₃Bi₂I₉. The time scale for Cs₂AgBiBr₆ transformation is about 120 min (Figure 1a) and once Cs₂AgBiI₆ film is formed a broad band takes place with absorption edge at ca. 700 nm. Exposed to humid air, the dark red Cs₂AgBiI₆ film undergoes degradation in a few seconds (Figure 1b). X-ray powder pattern reveals the complete conversion and non-degradation of the structure after 24 h immersed in TMSI (Figure 1c). The perspectives of this work is determine the kinetics constants of both transformations and obtain Cs₂AgBiI₆ films with good morphology from initial Cs₂AgBiBr₆ to be applied in perovskite solar cells.

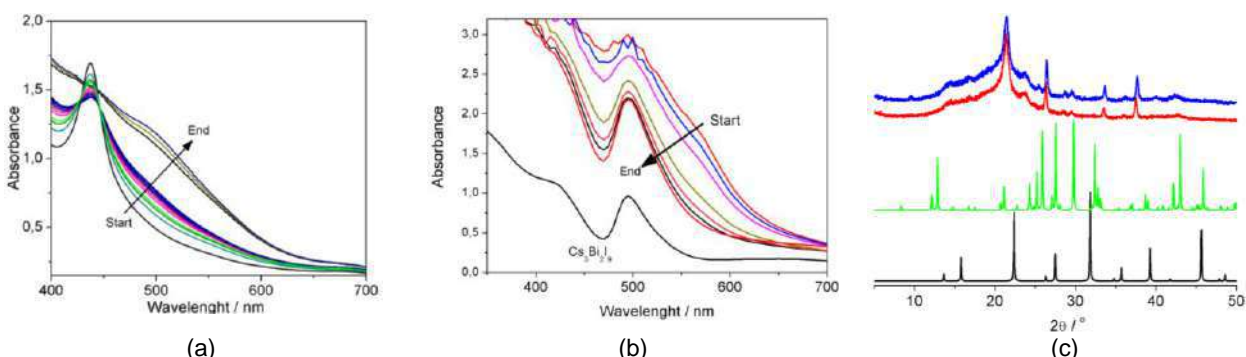


Figure 1. (a) UV-vis spectra with time of Cs₂AgBiBr₆ soaked in TMSI solution. Total time of experiment = 2 hours and (b) Cs₂AgBiI₆ film in open air. Total time of experiment = 25 seconds. (c) X-ray pattern of Cs₂AgBiBr₆ film soaked for 1h (red) and 24h (blue) in TMSI solution and comparison with Cs₂AgBiBr₆ (black) and Cs₃Bi₂I₉ (green).

1 – C. N. Savory, A. Walsh, D. O. Scanlon. *ACS Energy Lett.* **2016**, *1*, 949–955.

2 – S. E. Creutz, E. N. Crites, M. C. de Siena, D. R. Gamelin. *Nano Lett.* **2018**, *18*, 1118-1123.

3 – W. Gao, C. Ran, J. Xi, B. Jiao, W. Zhang, M. Wu, X. Hou, Z. Wu. *ChemPhysChem* **2018**, *19*, 1–6.

Derivatives of Deoxycholic Acid and Anticholinesterase Activity

Telma L. G. de Lemos (PQ),¹ Gisele R. Aguiar (PG),^{1*} Emerson Yvay A. de Sousa (PG),¹ Francisco José Q. Monte (PQ),¹ Raimundo B. Filho (PQ),² Abílio José F. N. Sobral (PQ),³ Maria Teresa S. Trevisan (PQ),¹ Anderson F. de Sousa (PG).¹

tlemos@dqoi.ufc.br; giselerocha88@yahoo.com.br

¹Departamento de Química Orgânica, UFC; ²Departamento de Química – UFRRJ; ³Departamento de Química, UC

Keywords: *Bile acids, Deoxycholic acid, Anticholinesterase activity.*

Highlights

Eight derivatives were obtained;

Moderate anticholinesterase activity without reports in the literature;

Promising compounds in the treatment of Alzheimer's disease.

Resumo/Abstract

Bile acids are amphipathic molecules produced by hepatocytes and stored in the gallbladder along with other components of the bile. When free, they can be divided into two major groups: primary (colic and chenodeoxycholic acid) and secondary (deoxycholic, lithocholic and ursodeoxycholic acids).¹ The pharmacological interest in these acids is related to the fact that they are building blocks ideal for the synthesis of new molecules that can be recognized at the molecular level.² In this context, the objective of the work is to obtain derivatives of deoxycholic acid for the determination of anticholinesterase activity, which until the present moment have not been reported in the literature. Eight derivatives (Figure 1) were obtained, which were characterized using their spectral data (1D NMR, IR and GC-MS) as compared to literature data, as well as tested in the acetylcholinesterase enzyme inhibition assay (Table 1). All derivatives had lower inhibition values than the standard Eserine salt (10 mm), while derivatives **2**, **3**, **4c** and **4d** presented moderate results (7-8 mm), being able to select them as potential compounds for use in the treatment of Alzheimer's disease.

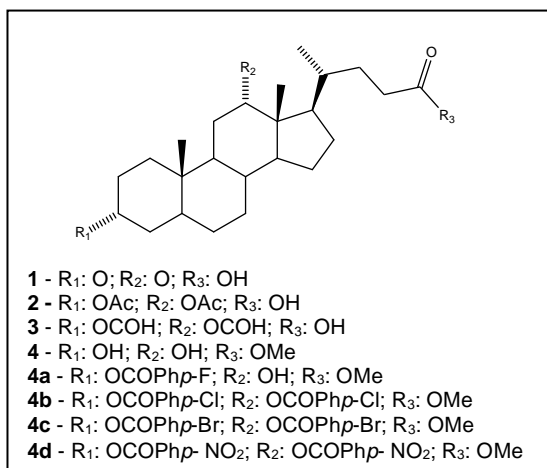


Figure 1. Deoxycholic acid derivatives.

| Compounds | Inhibition values (mm) |
|--------------------------|------------------------|
| 1 | 6 |
| 2 | 8 |
| 3 | 8 |
| 4 | 6 |
| 4a | 5 |
| 4b | 5 |
| 4c | 7 |
| 4d | 7 |
| standard of Eserine salt | 10 |

References:

¹BJEDOV, S. *et al. Steroids*, v. 120, p. 19-25, 2017

²FERNÁNDEZ, L. R. *et al. Steroids*, v. 108, p. 68-76, 2016

Agradecimentos/Acknowledgments



Characterization and electroanalytical performance of self-assembled monolayer gold electrode for hormone determination in the Billings Dam.

Fábio H. F. Batista (PG),¹ Thays S. Lima (PG),¹ Tiago L. Ferreira (PQ),¹ Norberto Gonçalves (PQ),¹ Lucia Noda (PQ),¹ Hueder P. M. de Oliveria (PQ),² Fabio R. Simões (PQ),³ Lúcia Codognoto* (PQ).¹

fabiohfbatista@gmail.com; luciacodognoto@gmail.com

¹Departamento de Química, UNIFESP Campus Diadema, SP. ²Universidade Federal do ABC – Santo André, SP

³Departamento de Ciências do Mar, UNIFESP, Santos, SP.

Palavras Chave: Self-assembled Monolayers, Estrone, Voltammetry, Gold Modified Electrode, supply dam.

Highlights

Modification of gold electrode by self-assembled monolayers. Characterization by EIS and Raman Spectroscopy. Electrochemical determination of estrone in natural waters.

Abstract

Estrone is a natural estrogenic compound classified as endocrine disruptor produced by the human body that can also be produced from estradiol oxidation.¹ The usage of pharmaceutical compounds containing estrone increases the pollution of waterbodies affecting the water quality. However, the concentration of these compounds is generally low, making their determination difficult.² The modification of gold electrodes (Au) by self-assembled monolayers (SAM) is performed by spontaneous formation of one or more layers of thiols.³ The use of gold electrodes modified with SAM (AuSAM) may allow the development of chemical sensors and increase sensibility and selectivity of the electrodes.⁴ Studies of modification of AuSAM with 2-mercapto-5-methylbenzimidazole (MMB) were performed and your potentiality in the determination of estrone was evaluated. EIS characterization showed an increase in charge transfer resistance with coverages of 60% for AuMMB. Raman spectra for AuMMB showed characteristic bands indicates the presence of MMB. The electrochemical oxidation of estrone was pH dependent, pH 7.0 was chosen for the electrochemical studies. The presence of the MMB SAM avoided the passivation of the surface of the electrode (Fig. A). To obtain the analytical curves, we chose the square wave voltammetry and the optimized parameters were $\Delta E_s = 6$ mV, $a = 70$ mV and $f = 80$ s⁻¹. Two analytical curves were constructed: in solution prepared with Milli-Q water (Fig. 1B, $I_p = -0.156 \mu\text{A} + 0.079 \pm 0.001$ A/mol [estrone], $DL = 2.17 \times 10^{-7}$ mol L⁻¹ and $QL = 2.91 \times 10^{-6}$ mol L⁻¹) and in Billings Dam natural water sample (Fig. 1C, $I_p = -0.143 \mu\text{A} + 0.054 \pm 0.003$ A/mol [estrone], $DL = 6.71 \times 10^{-7}$ mol L⁻¹ and $QL = 3.85 \times 10^{-6}$ mol L⁻¹). In the natural water sample a second oxidation process was obtained (Fig. 1C) due to the presence of nitrite ions in the sample, nevertheless, an analytical curve was possible to be constructed. These results indicate that the AuMMB electrode is suitable for the quantification of estrone in natural waters.

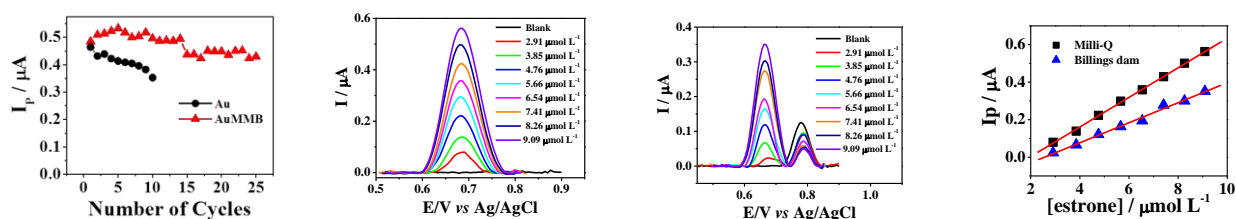


Fig. 1 – Peak current vs number of registered voltammograms for estrone 10 μmol L⁻¹ in BR buffer 0.1 mol L⁻¹, pH 7.0, $v = 100$ mV s⁻¹ (A), SWV for estrone in Na₂SO₄ 0.1 mol L⁻¹ using ultrapure Milli-Q water (B) and water from Billings dam (C) and analytical curves (D).

References:

- [1] AN, J. et al. Science of the Total Environment, 633 (2018) 1148–1155.
- [2] ROCHA, M. J. et al. Environ Monit Assess, 188 (2016) 101.
- [3] Gooding, J. J. et al. Electroanalysis, 15 (2003) 81–96.
- [4] Codognoto, L. et al. Talanta, 72 (2007) 427–433.

Acknowledgments

CNPq, Fapesp and Capes.

Semi-synthesis and biological evaluation of fucosterol derivatives

Francisco E. F. da Silva (PG),^{1*} Fábio do N. Ávila (PG),¹ Otilia D. L. Pessoa (PQ),¹ José G. M. da Costa (PQ),² Gilvandete M. P. Santiago (PQ).³

gil@ufc.br; erivaldo_009@hotmail.com

¹Departamento de Química Orgânica e Inorgânica, UFC; ²Departamento de Química Biológica, URCA; ³Departamento de Farmácia, UFC

Palavras Chave: *Lobophora variegata*, Fucosterol derivatives, Antibacterial activity, Cytotoxic activity.

Highlights

Fucosterol and its derivatives have been evaluated as antibacterial and cytotoxic agents showing inhibitory results only against the growth of different bacteria.

Abstract

Fucosterol (1) is a sterol isolated in significant amounts from algae, seaweed and diatoms, and exhibits antioxidant, anti-inflammatory, antidiabetic, cytotoxic, antifungal and antibacterial properties. In view of its medical potential, several ester derivatives were performed. This work describes the isolation and characterization of fucosterol (1), and the preparation of four derivatives: fucosterol *p*-fluorobenzoate (2), fucosterol *p*-chlorobenzoate (3), fucosterol *p*-bromobenzoate (4) and fucosterol *p*-nitrobenzoate (5), as well as its antibacterial and cytotoxic properties. Initially, fucosterol (1) was isolated from the seaweed *Lobophora variegata* ethyl acetate extract. Subsequently, the derivatives (2–5) were obtained from the esterification reaction of fucosterol (1) with four different aromatic carboxylic acids in the presence of dicyclohexylcarbodiimide (DCC) and 4-*N,N*-dimethylamino pyridine (DMAP), to afford fucosterol benzoates in yields of 81 to 89% (Figure 1). The antibacterial activity of fucosterol (1) and its derivatives (2–5) was evaluated by the microdilution method on *Klebsiella pneumoniae* (ATCC 10031), *Escherichia coli* (ATCC 10536), *Pseudomonas aeruginosa* (ATCC 15442), *Streptococcus mutans* (ATCC 0046) and *Staphylococcus aureus* (ATCC 6538) (Table 1). Additionally, fucosterol (1) and its derivatives (2–5) were subjected to the MTT assay for the evaluation of their cytotoxic effects on MCF-7, HL-60, and HCT-116 human cancer cells lines. No compound showed significant inhibition. This is the first report on the antibacterial activity of fucosterol and their ester derivatives.

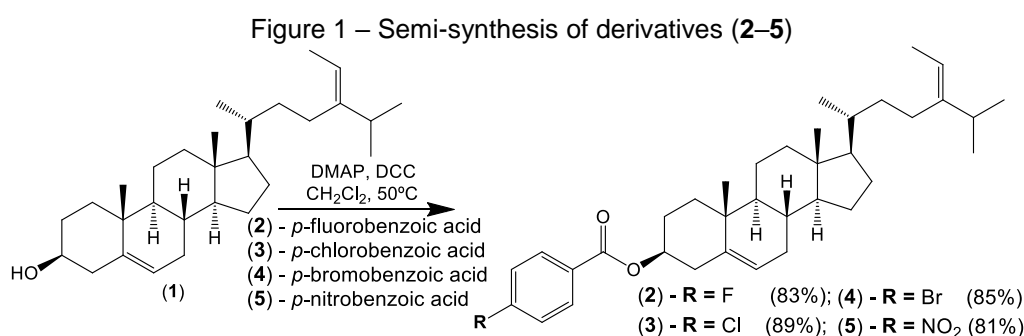


Table 1 – Values of the minimal inhibitory concentration (MIC) of compounds (1), (2), (3), (4) and (5)

| Compound | MIC (µg/mL) | | | | |
|----------|-----------------------------|-----------------------------|---------------------------|---------------------------------|---------------------------------|
| | <i>S. aureus</i> (12624) | <i>S. mutans</i> (00446) | <i>E. coli</i> (25922) | <i>P. aeruginosa</i> (15442) | <i>K. pneumoniae</i> (10031) |
| (1) | 512 | 512 | 128 | 512 | 512 |
| (2) | ≥1024 | ≥1024 | 512 | 512 | 256 |
| (3) | ≥1024 | 256 | 256 | 256 | ≥1024 |
| (4) | 512 | ≥1024 | 512 | 512 | 512 |
| (5) | 512 | ≥1024 | 512 | 512 | 512 |

Acknowledgments

The authors thank the Brazilian agencies CAPES and CNPq for fellowships and financial support.
 42ª Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química: Eixos Mobilizadores em Química

Recovery of rare earth elements contained in discarded fluorescent lamps solid waste using acid treatment and silica-based adsorbents

Ariane T. Mitsuvara (IC),¹ Thaís C. A. Silva (IC),¹ Ysabela M. Thomeo (IC),¹ Elias P. Ferreira Neto (PQ),¹ Sidney J.L. Ribeiro (PQ),^{1*}

a.mistuhara@gmail.com; sidney@iq.unesp.br

¹Institute of Chemistry, São Paulo State University (UNESP), Araraquara-SP, Brazil;

Keywords: rare earth elements, recovery, recycling, hydrochloric acid, adsorption, silica nanoparticles.

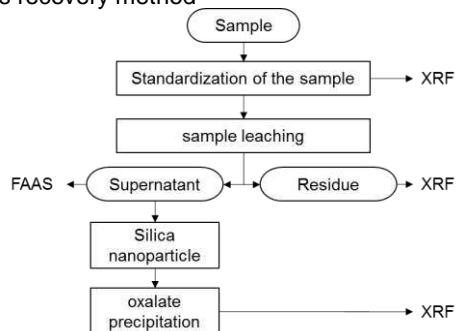
Highlights

- Rare-earth elements yttrium (Y) and europium (Eu) could be identified, concentrated and quantified;
- Monodisperse silica nanoparticles with controlled diameter were obtained by Stöber method

Abstract

This project aims to develop an industrially applicable method for expanding and popularizing the recycling of rare-earth elements contained in discarded fluorescent lamps solid waste. The proposed method consists in acid extraction using hydrochloric acid at different concentrations and temperatures, a pre-concentration of extracted rare-earth elements by adsorption/desorption using silica-based adsorbents, and precipitation in the form of rare-earth oxalates. The process is illustrated in Figure 1 scheme.

Fig 1. Schematic illustration of proposed rare-earth elements recovery method



Acid treatment using hydrochloric acid was shown to be effective in extracting Yttrium and Europium from the solid waste derived from grinded fluorescent lamps. XRF and FAAS analysis results (Table 1) both confirm extraction of the metals from the solid.

While tested acid concentrations were found to not result in significantly different extraction efficacy, use of heating at 80°C was shown to be critical to effective leaching of Y(III) and Eu(III).

Table 1. Eu and Y concentration in solid residues and supernatants after different acid treatments

| Integral sample | RESIDUE (XRF) / SUPERNATANT (FAAS) | | | | |
|--------------------|------------------------------------|--------------------|--------------------|-------------------|-------------------|
| | 25°C HCl treatment | | 80°C HCl treatment | | |
| | 0,5M | 1,0M | 0,5M | 1,0M | |
| XRF (%w/w) | Y: 13,3 Eu: 1,3 | Y: 11,5 Eu: 0,9 | Y: 9,5 Eu: 0,8 | Y: 0,1 Eu: 0,3 | Y: 0,1 Eu: 0,3 |
| FAAS (mg/L) | - | Y: 59 Eu: 22 | Y: 82 Eu: 28 | Y: 317 Eu: 75 | Y: 356 Eu: 67 |

In order to obtain silica-based adsorbents, a sol-gel route consisting of hydrolysis-policondensation of alkoxysilane precursor in basic ethanolic solution was employed (Stober method). SEM analysis evidenced that prepared silica nanoparticles show narrow monodisperse size distributions and that a good control of their diameter in the range of 70-400 nm can be achieved simply varying the catalyst (NH₄OH) concentration. Undergoing studies are focusing on further functionalization of obtained silica nanoparticles with rare-earth chelating groups and testing them as improved adsorbents for selective pre-concentration and subsequent recovery of the rare-earth elements extracted from recycled fluorescent lamps solid waste.

Acknowledgments



Synthesis of fluorescent Seleno- and Telluro-azaBODIPY for detection of oxidizing endogenous species

Pedro G. Spinello (IC),¹ Natália Takata (IC),² Alcindo A. dos Santos (PQ),² Rogério A. Gariani (PQ).¹

pedroguillem@hotmail.com

¹Departamento de Química, UDESC; ²Instituto de Química, USP.

Palavras Chave: Selenium, Tellurium, azaBODIPY, ROS.

Highlights

Synthesis of new selenium and Tellurium containing azaBODIPY-based probe was synthesized for selective and sensitive detection of ROS. These fluorophores present emission on the near infrared region, which make them potential probes for biological applications because its less invasive to human body. The synthesis of aza-dipirromethane and azaBODIPY core occurred without major problems, in this way the investigations for the insertion of the Se and Te are in progress.

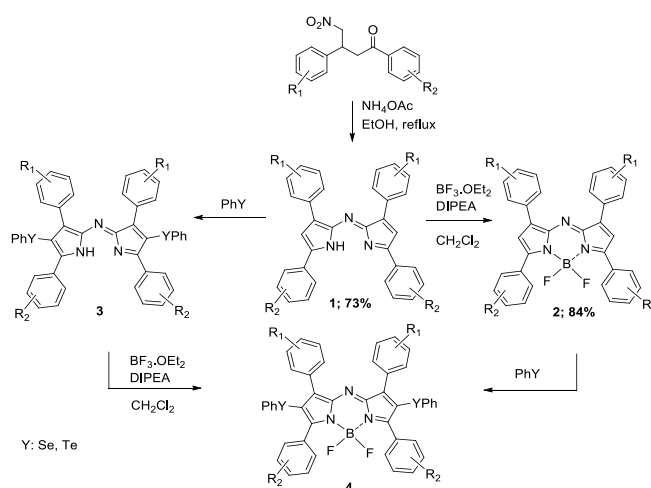
Abstract

Reactive oxygen species (ROS) are very important for the maintenance of biological system, between those important species it's possible to find peroxide, superoxide, hydroxyl and hypochloride groups. Besides, the imbalance of these species in the human body causes stress in the biological system and possibly can cause cellular damage, cancer and also diseases such as Parkinson's or Alzheimer's [1].

This work consists in the preparation of seleno- and telluro-azaBODIPY derivatives and their application for the identification of endogenous ROS. These fluorophores present emission on the near infrared region [2], which make them potential probes for biological applications [3]. Preparation of Se- and Te-BODIPY was idealized in order to mediate on/off fluorescence process by Photoinduced Electron Transfer (PET) [4]. The suppressed fluorescence process (imposed by PET) will be restored by oxidation of the Se or Te atoms through the action of endogenous ROS leading to an on/off fluorescent sensor, able to identify these entities, related to biochemical disorders [5].

The synthetic strategy is presented below by the scheme 1. The synthesis of the aza-dipirromethane (**1**) and azaBODIPY (**2**) core was successfully carried out, presenting yields in the 70~90% average. Therefore, the methodologies related to the introduction of Se and Te atoms are under investigation.

Scheme 1: Synthetic strategy to Se- and Te-azaBODIPY.



Acknowledgments

Authors thanks to UDESC, USP, FAPESP (2016/09579-0), CNPq, CAPES, FINEP AND FITEJ.

References: [1] Deshmukh P.P., et al, *Sensors and amp; Actuators: B. Chemical*, v. 281, p. 8-13, **2019**. [2] LOUDET, A., BURGESS, K. *Chem. Rev.* v. 107, p. 4891-4932, **2007**. [3] Kobayashi, H. et al. *Chem. Rev.* v. 110, p. 2620-2640, **2010**. [4] YU, F. et al. *Journal of the American Chemical Society*, v. 133, n. 29, p. 11030-11033, **2011**. [5] JIAO L. et al. *The Journal of organic chemistry*, v. 79, n. 4, p. 1830-1835, **2014**.

Área: INONº de Inscrição: 01315

Acetaldehyde and cyclohexanone aldol condensation catalyzed by metalloporphyrin-based solids

Everton Henrique dos Santos (PG),¹ Guilherme Sippel Machado, (PQ)², Fernando Wypych (PQ)³ and Shirley Nakagaki (PQ),^{1*}

*shirleyn@ufpr.br; everhs1@gmail.com

^{1,2}Laboratório de Bioinorgânica e Catálise, ³Laboratório de Química de Materiais Avançados - Departamento de Química - Universidade Federal do Paraná, - CP 19032, fax: +55-41-33613186, CEP 81531-980, Curitiba, PR, Brazil.

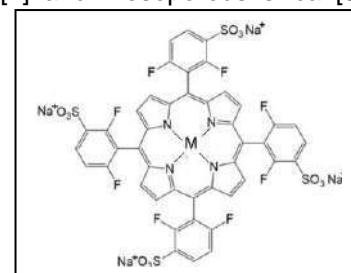
Palavras Chave: *Porphyrins, Aldol condensation, Heterogeneous catalysis, Layered Solids, Mesoporous silica;*

Highlights

In this work it was prepared four different metalloporphyrin-based solids and they were applied as catalyst in aldol condensation reactions between acetaldehyde and cyclohexanone.

Resumo/Abstract

Metalloporphyrins (MP) have high versatility and potential application as catalyst in a range of reactions to produce important compounds to pharmaceutical and chemical industry [1]. Usually they are applied in homogeneous systems and shows some drawbacks such as bimolecular interactions and self-destructive, besides that the impossibility of recover and reuse. These facts difficult the scale up of the catalytic reactions. One way explored by the academy research to remedy these problems is the MP immobilization onto various organic or inorganic matrices, such as layered compounds [2] and mesoporous silica [3]. Besides that, catalytic solids based on immobilized MP can combine different properties presented by the support solid and the inherent catalytic property of the MP generating multifunctional catalysts to different purpose such as aldol condensation. To proceed with the aldol condensation by basic or acid mechanism, it is required a Bronsted basic site, for example using a layered materials such as layered double hydroxides (LDH) or layered hydroxide salts (LHS) that can act as Bronsted basic sites from the hydroxyls present in the layer surface [4] or also, using MP that can behaves as Lewis acid sites [5] and activate the carbonyl group, making the solid resulted by the MP immobilized on layered compound an interesting multifunctional catalyst, being possible to apply them as catalyst to this reaction. In this work the anionic manganese(III)porphyrin **[Mn(TDFSP)] (MnP)** (Figure) was synthesized and immobilized on three different solids support previous prepared, in order to obtain solid catalysts for heterogeneous catalytic process: 1) Zn/Al 2:1 layered double hydroxide (LDH), 2) Santa Barbara Amorphous - **SBA-15** mesoporous silica and 3) Hexagonal Mesoporous Silica - **HMS**). The **MnP** and the resulted solid catalysts characterized by UVVIS, FTIR, ¹H NMR, TEM, SEM, powder XRD, BET and TG techniques. Also, the analogue iron(III)porphyrin ([Fe(TDFSP)] – **FeP**) was immobilized onto a layered hydroxide salt zinc hydroxide nitrate (**ZHN**) [2]. The prepared solids were investigated as catalyst and showed promising catalytic results to the aldol condensation between cyclohexanone and acetaldehyde.



[1] D. Dolphin, T.G. Traylor, L.Y. Xie, Acc. Chem. Res. 30 (1997) 251.

[2] G.S. Machado, G.G.C. Arízaga, F. Wypych, S. Nakagaki, J. Catal. 274 (2010) 130.

[3] V.H.A. Pinto, J.S. Rebouças, G.M. Ucoski, E.H. Faria, B.F. Ferreira, R.A.S.S. Gil, S. Nakagaki, Appl. Catal. A: Gen. 526 (2016) 9.

[4] L. Hora, V. Kelbichová, O. Kikhtyanin, O. Bortnovskiy, D. Kubička, Catal. Today 223 (2014) 138.

[5] C. Zou, T. Zhang, M.-H. Xie, L. Yan, G.-Q. Kong, X.-L. Yang, A. Ma, C.-D. Wu, Inorg. Chem. 52 (2013) 3620.

Agradecimentos/Acknowledgments



Área: ORG

(Inserir a sigla da seção científica para qual o resumo será submetido. Ex: ORG, BEA, CAT)

Nº de Inscrição: 01316

(Inserir o número de inscrição do autor que fez a submissão)

Seleno-funcionalização de indóis mediados por peróxido de hidrogênio-uréia (UHP)**Julia R. Menezes (IC)¹, Mylena M. Goulart (IC)¹, Fabio Z. Galetto (PQ)², Juliano A. Roehrs (PQ)^{3*} e Juliano B. Azeredo (PQ)^{1*}****juliarosa.m@hotmail.com; jbraunquimico@gmail.com; julianoroehrs@pelotas.ifsul.edu.br**¹ Programa de pós-graduação em ciências farmacêuticas -Universidade Federal do Pampa, campus Uruguaiiana, RS;² Departamento de Química, Universidade Federal de Santa Catarina, Florianópolis-SC, Brasil; ³ Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia Sul-Rio-Grandense, IFSul, Pelotas, RS, Brazil.

Palavras Chave: Peróxido de hidrogênio-ureia, Selênio-funcionalização e Indol

Highlights

The seleno-functionalization of indole mediated by urea hydrogen peroxide (UHP).

The seleno-functionalization of aromatic rings can be promoted by urea hydrogen peroxide (UHP).

Resumo/Abstract

Na área da síntese de compostos orgânicos, sempre buscou-se a obtenção de produtos que contenham átomos de calcogênio, em especial, o átomo de selênio, devido ao seu apelo biológico.¹ Nesse contexto, a seleno-funcionalização de heterociclos nitrogenados são de grande importância uma vez que esses núcleos compõem a estrutura de diversas moléculas com atividades farmacológicas.² Por outro lado, o aduto de peróxido de hidrogênio-ureia (UHP) vem sendo empregado com êxito em reações de oxidação como método alternativo e fonte mais segura de peróxido de hidrogênio (H₂O₂), em virtude de ser um reagente sólido, de baixo custo, fonte anidra de peróxido e comercialmente disponível.³ Tendo em vista, o presente trabalho tem como objetivo avaliar o potencial de clivagem oxidativa do UHP na ligação Se-Se de disselenetos de diorganoíla, com o propósito de formar espécies de selênio eletrofilicas a fim de reagir com sistemas arílicos ativados. Com a finalidade de definir a melhor condição para a reação entre indol (**1**) e o disseleneto de difenila (**2**) em um meio contendo 1 equivalente de UHP e ácido acético como aditivo, para a formação do produto desejado (**3**), realizou-se a avaliação da variação de solventes, na quantidade de 1 mL, quantidade adequada de aditivo e da temperatura de reação (Tabela 1). O melhor resultado obtido foi utilizando acetonitrila, na presença de 0,025 mL de ácido acético glacial em 4 horas de reação a 80°C, obtendo 92% de rendimento (Entrada 6).

Tabela 1. Otimização das condições reacionais

| # | Solvente | Ác. Acético glacial (mL) | Tempo (h) | T(°C) | Rendimento isolado (%) |
|---|---------------------|--------------------------|-----------|-----------|------------------------|
| 1 | Etanol | 0,025 | 4 | 80 | 62 |
| 2 | Metanol | 0,025 | 4 | 80 | 43 |
| 3 | DMF | 0,025 | 4 | 80 | 42 |
| 4 | THF | 0,025 | 4 | 80 | 23 |
| 5 | Tolueno | 0,025 | 4 | 80 | 16 |
| 6 | Acetonitrila | 0,025 | 4 | 80 | 92 |
| 7 | Acetonitrila | 0,025 | 2 | 80 | 35 |
| 8 | Acetonitrila | 0,015 | 4 | 80 | 56 |
| 9 | Acetonitrila | 0,040 | 4 | 80 | 76 |

**UHP**
Oxidante anidro¹ S. Santoro, J. B. Azeredo, V. Nascimento, A. L. Braga, L. Sancineto e C. Santi, *RSC Adv.*, 2014, **4**, 31521² C. W. Nogueira, G. Zeni e J. B. T. Rocha. *Chem. Rev.*, 2004, **104**, 6255³ R. S. Varma, K. P. Naicker, *Org. Lett.*, 1999, **1**, 189.

Área: QPNNº de Inscrição: 01317

Identification of the compounds and evaluation of the antibacterial activity of *Celtis ehrenbergiana* leaves.

Heloísa A. Padilha (IC)¹, Mylena da S. Vargas (PG)^{1*}, Gabriel Gollino (PG)¹, Jefferson Soares (PQ)², Vanessa Bley Ribeiro (PQ)¹, Elton L. Gasparotto Denardin (PQ)², Fabiane M. Farias (PQ)¹

heloisaaioffi@hotmail.com; mylena_vargas@hotmail.com

¹Programa de Pós-Graduação em Ciências Farmacêuticas; ²Programa de Pós-Graduação em Bioquímica; Universidade Federal do Pampa – Campus Uruguaiiana, BR 472, Km 592, Uruguaiiana, RS

Palavras Chave: Identificação, compostos, atividades, plantas, extrato.

Highlights

Celtis ehrenbergiana is used as a healing, anti-inflammatory and antifungal. In this study, nine compounds were identified by GC-MS, MICs were higher than 100 µg/mL, so had no antibacterial action.

Resumo/Abstract

As plantas medicinais podem apresentar tanto efeitos terapêuticos quanto indesejáveis, como sinais de toxicidade e interações medicamentosas. *Celtis ehrenbergiana* (CANNABACEAE) é utilizada na fronteira Oeste do Rio Grande do Sul como cicatrizante, anti-inflamatório e antifúngico tópico, mas não existem estudos na literatura que identifiquem sua composição ou suas atividades farmacológicas. O objetivo deste trabalho foi analisar os constituintes do extrato metanólico das folhas da espécie por cromatografia gasosa, acoplada a espectrometria de massas (CG-EM) e avaliar a possível atividade antibacteriana pelo método de microdiluição em caldo. O extrato aquoso (EA) resultou da decocção das folhas em água destilada, com filtração e liofilização do resíduo aquoso. O extrato metanólico bruto (EMB) foi obtido pela maceração das folhas secas e trituradas em metanol, até o esgotamento do material vegetal, com posterior eliminação do solvente em evaporador rotatório à pressão reduzida. O EMB foi fracionado por partição em solventes com polaridade crescente (hexano, diclorometano, acetato de etila e butanol), resultando nas respectivas frações. O EMB foi analisado por CG-EM nas seguintes condições: hélio (99,999%) gás transportador a um fluxo constante de 0,95 mL/min; 1 µL de volume de injeção; modo de injeção Splitless. A temperatura do forno foi programada a partir de 50°C em 5 min, com aumento de 10°C; atingindo 280°C em 30 min. Foram identificados nove compostos principais, por comparação com a biblioteca do equipamento (85% de similaridade). As substâncias químicas majoritárias foram ácido 5-hidroxipipercolico (14,63%); trans-esqualeno (10,39%); estigmast-5-en-3-ol, oleato (15,57%); vitamina E (28,50%) e γ-sitosterol (13,52%), que apresentam potencial antioxidante e antidiabético. Ácido n-hexadecanóico (8,08%), ácido linolênico (3,41%), fitol (3,89%) e ácido palmítico (2,01%) possuem característica anti-inflamatória descrita na literatura (APARNA, 2012). O efeito sinérgico destas substâncias pode estar relacionado ao possível efeito anti-inflamatório sugerido para a espécie no seu uso popular. Os ensaios *in vitro* para a análise da atividade antibacteriana foram realizados pelo método de microdiluição em caldo (CLSI, 2015), utilizando os extratos aquoso, metanólico e as frações obtidas pelo fracionamento do EMB, os quais foram testados frente à cepas Gram-positivas e negativas. A *C. ehrenbergiana* apontou concentrações inibitórias mínimas (CIM) maiores que 512 µg/mL e 256 µg/mL para essas bactérias, respectivamente. A literatura indica até 100 µg/mL como valor de referência para extratos vegetais ativos, sendo assim, a espécie não apresenta ação antibacteriana. Sugere-se que as ações anti-inflamatórias sejam devido o sinergismo entre ácido 5-hidroxipipercolico e ácido linolênico e que a planta não é um antibacteriano promissor, não excluindo a possibilidade de um efeito cicatrizante.

APARNA, Vasudevan et al. Anti-inflammatory property of n-hexadecanoic acid: structural evidence and kinetic assessment. *Chemical biology & drug design*, v. 80, n. 3, p. 434-439, 2012.

CLSI. Clinical and Laboratory Standards Institute. Performance Standards for Antimicrobial Susceptibility Testing; Fifteenth Informational Supplement. Document M100-S25 (ISBN 1-56238-556-9). Clinical and Laboratory Standards Institute, 940 West Valley Road, Suite 1400, Wayne, Pennsylvania 19087-1898 USA, 2015.

Agradecimentos/Acknowledgments

Ao Laboratório de Farmacognosia e Química Orgânica, ao Laboratório de Estudos Físico-Químicos e Produtos Naturais e a UNIPAMPA.

42ª Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química: Eixos Mobilizadores em Química

Área: MAT

Nº de Inscrição: 01318

One-step microwave assisted synthesis of PEDOT:PSS/PANI/Pt composite and electrochemical assessment

Paloma B. Barreto (PG),¹ Letícia B. V. Sales (PG),¹ Jeice M. Santos (PG),¹ Rhauane A. Galvão (PG),¹ Larissa A. Santa-cruz (PG),¹ Johan R. González-Moya (PQ),¹ Giovanna Machado (PQ)¹.

paloma.barreto@cetene.gov.br

¹Centro de Tecnologias Estratégicas do Nordeste, CETENE.

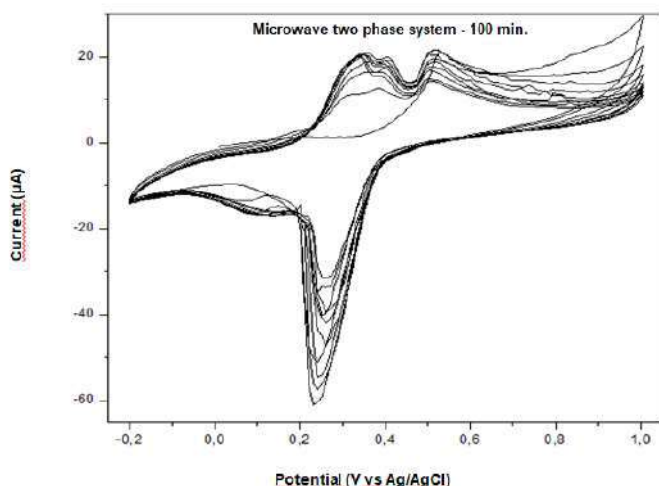
Keywords: Composite, Polyaniline, Platinum, Microwave, Conductive polymers

Highlights

The composite were obtained by oxidative reaction in a two phase system. Its electrochemical activity was evaluated by cyclic voltammetry in order to assess the conductive film formation.

Resumo/Abstract

Among the most studied conductive polymers, polyaniline (PANI) stands out, as it forms the emeraldine salt (green) through the process of doping by protonation, being this its conductive form. Thus, this reversible behavior characteristic of doping brings different possibilities in the construction of devices. Thereby, the use of metallic salts as oxidants in polymerization process has grown as they lead to the formation of metallic nanoparticles adhered to the polymer network. On the other hand PEDOT: PSS is widely used as anode in organic photovoltaic devices so that sulfonate groups of PSS are still free to interact. Thus the nanocomposites were obtained through a biphasic synthesis (aqueous / organic) for 100 min in microwave and compared with the same synthesis obtained at room temperature for 24 hours. In the aqueous phase are PEDOT: PSS, HCl, H₂PtCl₆; and in the organic phase (chloroform) the aniline monomer. The samples were characterized by Ultraviolet-Visible Spectroscopy (UV-Vis); High Resolution Transmission Electron Microscopy (HRTEM) and the electrochemical characterization made by Cyclic Voltammetry (VC) in thin PEDOT: PSS / PANI / Pt films deposited by spin coating. The results showed polyaniline in its conductive form, emeraldine salt, was obtained and confirmed by the formation of the characteristics bands in 787nm, 430nm and 340nm seen by the UV-Vis spectra for the two synthesis. HRTEM showed that biphasic synthesis in microwave presented morphology of clusters formed by electrostatic interactions of the polyaniline chain with PSS. The formation of platinum nanoparticles was not completely clear by HRTEM. The cyclic voltammetry of biphasic microwave synthesis (MW) showed better electrochemical activity due to the effect of lower reaction time coupled with radiation, which leads to products with more crystalline domains with high current-response that facilitate redox reactions with well-defined peaks.



The results showed polyaniline in its conductive form, emeraldine salt, was obtained and confirmed by the formation of the characteristics bands in 787nm, 430nm and 340nm seen by the UV-Vis spectra for the two synthesis. HRTEM showed that biphasic synthesis in microwave presented morphology of clusters formed by electrostatic interactions of the polyaniline chain with PSS. The formation of platinum nanoparticles was not completely clear by HRTEM. The cyclic voltammetry of biphasic microwave synthesis (MW) showed better electrochemical activity due to the effect of lower reaction time coupled with radiation, which leads to products with more crystalline domains with high current-response that facilitate redox reactions with well-defined peaks.

Kinyanjui, J. M., Harris-burr, R., Wagner, J.

G., Wijeratne, N. R. & Hatchett, D. W. Hexachloroplatinate-Initiated Synthesis of Polyaniline / Platinum Composite. 8745–8753 (2004).

Agradecimentos/Acknowledgments

To FACEPE and CETENE.

Área: MAT

(Inserir a sigla da seção científica para qual o resumo será submetido. Ex: ORG, BEA, CAT)

Nº de Inscrição: 01319

(Inserir o número de inscrição do autor que fez a submissão)

Photocatalytic activity of Ta₂O₅ nanotubes decorated with silver nanoparticles for hydrogen production

Letícia B. V. Sales (PG),^{1*} Jeice M. Santos (PG),¹ Paloma B. Barreto (PG),¹ Rhauane A. Galvão (PG),¹ Larissa A. Santa-cruz (PG),¹ Noelia V. F. Rondón (PQ)¹, Giovanna Machado (PQ)¹.

leticia_bazante@hotmail.com

¹Centro de Tecnologias Estratégicas do Nordeste, CETENE.

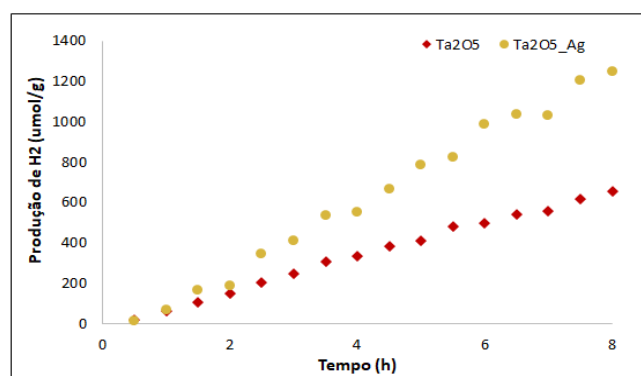
Keywords: Nanoparticles of silver, Nanotubes, Ta₂O₅, Photocatalysis, Production of hydrogen.

Highlights

Silver nanoparticles were deposited on the surface of tantalum pentoxide nanotubes. This nanocomposite presented greater efficiency in hydrogen production. H₂ was obtained by photocatalysis of the water using solar energy.

Resumo/Abstract

Faced with the current need for renewable energy sources, the process of producing hydrogen by breaking water molecule using solar energy has been highlighting. This process makes use of nanometric photocatalysts, because they have high specific surface area, which favors the catalytic reaction. The nanotubes of tantalum pentoxide (NT-Ta₂O₅) are photocatalysts that absorb radiation only in the ultraviolet region of the electromagnetic spectrum. In order to improve their efficiency, they can be sensitized with silver nanoparticles (NP_Ag) since NP_Ag absorbs radiation in the visible region of the spectrum. Thus, the nanotubular structures were synthesized by anodization process from Ta sheets. The synthesis of the NP_Ag as well as the sensitization of the NT-Ta₂O₅ was carried out by the chemical reduction process, in situ, with precursor solution of AgNO₃ and sodium citrate as stabilizer. The samples were characterized morphologically and structurally by the techniques of Transmission Electron Microscopy (TEM); Diffuse Reflectance Spectroscopy (DRS) and X-Ray Diffraction (XRD).



The synthesized nanocomposite had its photocatalytic activity evaluated during the photogeneration reaction of H₂ in a solar simulator for 8 hours of reaction. Every 30 minutes a 450 µl aliquot of the reactor headspace was collected and analyzed by gaseous (GC) chromatography. The results displayed that NP_Ag deposited on NT-Ta₂O₅ increased the hydrogen photogeneration process efficiency 90% more than the NT-Ta₂O₅ without NP_Ag. This corresponds to 1246 µmol / g of produced gas. These results show that the synergy of noble metals with semiconductor photocatalysts brings significant changes to photocatalysis.

ZIELINSKA-JUREK, A. Progress, Challenge, and Perspective of Bimetallic TiO₂-Based Photocatalysts. *Journal of Nanomaterials*, 2014.

Agradecimentos/Acknowledgments

To CNPQ, CAPES and CETENE.

Área: ELE

Nº de Inscrição: 01320

Amperometric detection of antioxidants in biokerosene by HPLC, using electrode modified with reduced graphene oxide and gold nanoparticles

José R. Delfino (PG),^{1,4} Aldaléa L. B. Marques (PQ),² Nelson R. Stradiotto (PQ),^{1,3,4*}

jrdelfino.cv@gmail.com; nrstradi@gmail.com

¹Chemistry Institute, UNESP; ²Department of chemical technology, Federal University of Maranhão, UFMA; ³School of Industrial and Metallurgical Engineering, UFF; ⁴Bioenergy Research Institute, UNESP.

Palavras Chave: HPLC, Electrochemical detection, Biokerosene, Antioxidants, Graphene oxide, Gold nanoparticles

Highlights

HPLC with reverse phase separation was used. GCE modified with graphene oxide and gold nanoparticles was used as detector in HPLC. HPLC-PAD was used in the antioxidants determination in biokerosene.

Abstract

Biofuels are considered a promising alternative to overcome the current challenges of the global energy sector, so the aviation industry has sought to develop more efficient aircraft, and biofuels similar in properties to mineral kerosene [1,2]. The quality of biokerosene is directly associated to the concentration of antioxidants, for this control, reliable, sensitive analytical methods are required. In the present work, a new chromatographic method with electrochemical detection (HPLC-PAD) was developed. The electrochemical behavior of the antioxidants N, N'-di-sec-butyl parafenylenediamine (BPA), 2,4-dimethyl-6-tert-butylphenol (TBP) and 2,6-Di-tert-butyl-4-methylphenol (BHT) in different electrodes was performed by cyclic voltammetry (CV). The results showed that these antioxidants presented well defined oxidation peaks on GCE/rGO-AuNPs, at 0.27 V, 0.26 V and 0.24 V vs. Ag/AgCl, respectively. Significant increase is observed in the anodic peak current, and a decrease in the cathodic peak current, which clearly indicates the electrocatalytic effect. The chromatographic separation was optimized, the best conditions were obtained with a C18 column, the isocratic elution occurred with acetonitrile: H₂O (90:10%), a post-column pump containing 0.3 mol L⁻¹ NaOH to maintain the constant ionic strength in the detector was used. The optimum potential for amperometric determination of antioxidants was determined under hydrodynamic conditions, based on these results, 0.40 V showed better sensitivity. The chromatographic separation of the antioxidants was complete in 10 min. Analytical curves were constructed, a linear relationship was obtained between peak areas versus added concentration of antioxidant, BPA (Equation: $y = 13.2 + 1.5 \times 10^6 x$, $r: 0.999$), TBP (Equation: $y = 13.1 + 1.3 \times 10^6 x$, $r: 0.998$) and BHT (Equation: $y = 15.1 + 3.4 \times 10^6 x$, $r: 0.999$), the limits of detection was 1.2×10^{-7} , 1.7×10^{-7} and 7.8×10^{-8} mol L⁻¹, and amperometric sensibility was 1.5×10^6 , 1.3×10^6 , 3.4×10^6 nA mol⁻¹ L⁻¹, respectively. This method was applied for antioxidants simultaneous determination in biokerosene samples. Peak identification was based on the antioxidant retention time, being confirmed by the addition of analyte standards in the samples. The determined concentrations of TBP and BHT were 3.1×10^{-5} mol L⁻¹ and 3.3×10^{-5} mol L⁻¹, respectively, BPA was not present in the sample. The average recoveries obtained for four chromatographic injections of each enriched sample varied from 97.3 % to 101.5%, confirming the accuracy of the proposed method. Precision was estimated from the relative standard deviation (RSD), through the chromatographic experiments performed in triplicate, values between 1.5 and 2.1% were obtained for all the compounds.

References:

- [1] Cremonez, P. A, *et. al.* Renewable and Sustainable Energy Reviews, **2015**, V. 43, 1063–1072, 2015;
[2] Kaltschmitt, M.; Neuling, U. Biokerosene: Status and Prospects. Springer, **2018**, ISBN 978-3-662-53065-8.

Acknowledgments

The authors express sincere gratitude to: IQ/UNESP; FAPESP for the financial support, process nº 2017/25329-6, and the LMA-IQ (UNESP) for conducting the SEM-FEG analyzes.

Carga híbrida à base de nanotubos de carbono (CNTs) e hidroxiapatita (HAp): Caracterização térmica e cristalográfica

Kaio A. B. Pereira¹ (PG)*, Luis C. Mendes (PQ)¹, Bruno P. Amantes (PQ)¹, Sibeles P. Cestari (PQ)¹.

*kaio.brayner@ima.ufrj.br

¹Instituto de Macromoléculas Professora Eloisa Mano (IMA), Universidade Federal do Rio de Janeiro (UFRJ)

Palavras Chave: Nanotubos de carbono, Hidroxiapatita, Carga Híbrida.

Highlights

Hybrid filler based on carbon nanotubes (CNTs) and hydroxyapatite (HAp): Thermal and crystallographic characterization

CNTs were oxidized and reacted with HA in order to produce a hybrid filler. Thermal and crystallographic characterizations were performed by TGA and XRD. The results revealed the CNTs modification was successful.

Resumo/Abstract

Nos últimos anos, o elevado índice de lesões ósseas aumentou a demanda pela reparação de tecidos rígidos através de materiais biocompatíveis.¹ Diversos polímeros podem ser utilizados com esta finalidade, entretanto suas propriedades mecânicas não são comparáveis as do tecido ósseo.²

Neste contexto, o alcance de melhorias nas propriedades surge através de compósitos poliméricos. A combinação de cargas como a HAp e CNTs é uma estratégia promissora, pois agrega singularidades de cada material, como a propriedade osteoindutora da HA e a resistência mecânica dos CNT.³

A proposta deste estudo foi produzir e analisar a nanocarga híbrida oCNT/HAp visando futura aplicação em compósito polimérico na área de reconstrução do tecido ósseo. Inicialmente, os nanotubos foram oxidados com uma mistura sulfonítrica ($H_2SO_4:HNO_3$ 3:1) à 110°C por 3 horas resultando no CNT oxidado (oCNT). A carga híbrida (oCNT-HAp) foi preparada através de dispersões de oCNT e HAp em acetona, misturadas sob agitação magnética, seca em estufa até peso constante. Os precursores, oCNT e oCNT-HA foram analisados por análise térmica (TGA) e difração de raios X (DRX). Na Figura 1 estão dispostas as curvas de TGA e DRX dos materiais.

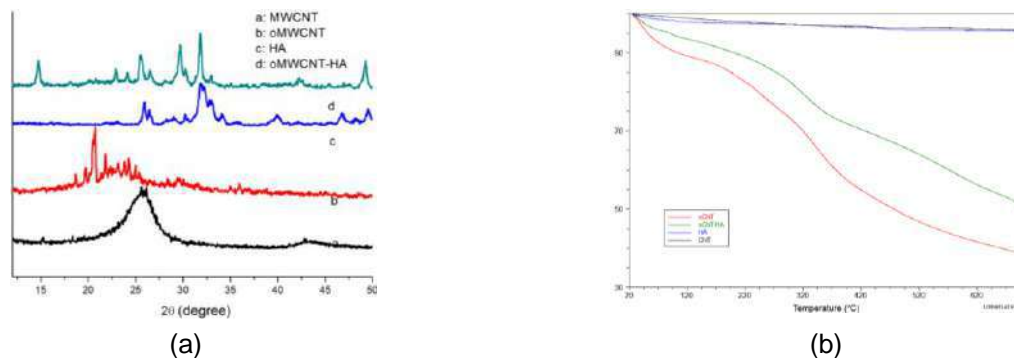


Figura 1. Curvas DRX (a) e TGA (b) dos materiais

O difratograma de raios-X do CNT precursor mostrou um pico alargado indicativo de um material paracristalino. Após o procedimento oxidativo, substancial modificação no difratograma foi observada. O material oxidado (oCNT) apresentou uma diversidade de planos cristalinos com ângulos de difração deslocados para valores inferiores ao da amostra precursora. O difratograma da carga híbrida se revelou diferente dos precursores. Embora alguns ângulos de difração relacionados à HAp possam ser detectados surgiram novos planos cristalinos a diferentes ângulos. Isto pode ser considerado indicativo da ocorrência de reação química entre os grupamentos carboxila na superfície do oCNT e a HAp. As curvas de TGA dos precursores mostram resistência térmica semelhantes. A tratamento oxidativo produziu uma queda na resistência térmica do CNT provavelmente decorrente do desordenamento estrutural e da presença de grupamentos hidroxila e carboxila em sua superfície. No caso da carga híbrida oCNT/HAp, há um certo aumento da resistência térmica como consequência da reação química entre os grupamentos carboxila na superfície do oCNT e a HAp.

Agradecimentos/Acknowledgments

Ao CNPq, CAPES, IMA e UFRJ.

¹Zhang, H.; Liu, M.; Fan, H.; Zhang, X. *Materials Letters*. 2012, 75, 26-28.

²Afzal, M. A. F.; Kalmodia, S.; Kesarwani, P.; Basu, B.; Balani, K. *Journal of Biomaterials Applications*. 2012, 0, 1-12.

³Afroze, J. D.; Abden, M. J.; Alan, M. S.; Bahadur, N. M.; Gafur, M. A. 2016, 169, 24-27.

Calystegines in *Solanum Paniculatum* L.

Luís Fernando L. Souto (FM),^{1*} **Antônio Jorge R. da Silva (PQ)**.²

luis.lira@ifro.edu.br

¹Departamento de Apoio ao Ensino, IFRO Câmpus PVH Calama, ²Instituto de Pesquisas de Produtos Naturais, UFRJ

Keywords: Solanum, nortropane alkaloids, inhibition of glucosidases, GC/MS.

Highlights

Polyhydroxylated alkaloids that possess significant glucosidases inhibitory activities. Alkaloids with therapeutic potential and with possible toxic effects. A species used for culinary and folk medicine purposes in Brazil. Calystegines A₃ and B₂ in fruits of *Solanum paniculatum* L.

Resumo/Abstract

Calystegines are a group of nortropane alkaloids found in several species of the genus *Solanum*. These alkaloids mimic monosaccharide structures and show significant inhibition of glucosidases, which are enzymes involved in breaking down complex carbohydrates into their monomers.¹ To now, the available data do not allow drawing conclusions on the possible toxic effects of calystegines in humans.² *Solanum paniculatum* L. is widely distributed in tropical America, It is used for culinary and folk medicine purposes in Brazil.³ The present work aims to investigate calystegines in fruits of this species. The botanical material was collected in November 2018 in Porto Velho-RO, Brazil. Plant material was extracted with methanol/water (1:1, v/v, 20 mL) in an ultrasonic bath for 30 min. After derivatization with N-methyl-N-trimethylsilyltrifluoroacetamide (MSTFA), the samples were analyzed by gas chromatography coupled to mass spectrometry (GC/MS) for qualitative analyses and gas chromatography with flame ionization detection (CG/FID) was used in quantitative analyzes. Calystegines A₃ (41.46 mg kg⁻¹) and B₂ (50.26 mg kg⁻¹) were determined in wet weight (Figure 1).

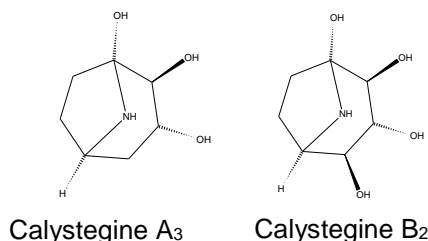


Figure 1. Calystegines detected in *Solanum Tuberosum* L.

These are common in species such as *Solanum Tuberosum* L., *Solanum lycopersicum*, *Capsicum Anuum* and *Solanum melongena*. Vegetables rich in calisteginas should be investigated as possible components of a diet that prevents a sharp rise in blood glucose after a meal rich in carbohydrates. However, there are records of livestock intoxication by this plant.⁴ In the present study calystegines A₃ and B₂ are reported for the first time in fruits of *Solanum paniculatum* L.

References

1. BIASTOFF, S.; DRÄGER, B. Calystegines. **The alkaloids: chemistry and biology**, v. 64, p. 49-102, 2007.
2. EUROPEAN FOOD SAFETY AUTHORITY (EFSA) *et al.* Overview of available toxicity data for calystegines. **EFSA Journal**, v. 17, n. 1, p. 05574, 2019.
3. JÚNIOR, G. M. V. *et al.* New steroidal saponins and antiulcer activity from *Solanum paniculatum* L. **Food chemistry**, v. 186, p. 160-167, 2015.
4. GUARANÁ, E. *et al.* Poisoning by *Solanum paniculatum* (*Solanaceae*) in cattle. **Pesquisa Veterinária Brasileira**, v. 31, n. 1, p. 59-64, 2011.

Agradecimentos/Acknowledgments

The authors thank IFRO, UFRJ/IPPN, CNPq, CAPES e FAPERJ for institutional and financial support.

dipBeet: a nature-inspired water-soluble red-orange dye

Renan Moraes Pioli (PQ),¹ Rayani Almeida de Lima (PG),² and Erick Leite Bastos (PQ)*,¹

rayani.almeida@ufabc.edu.br; elbastos@iq.usp.br

¹Instituto de Química, Universidade de São Paulo, São Paulo, SP, Brasil; ² Centro de Ciências Naturais e Humanas, Universidade Federal do ABC, Santo André, SP, Brasil.

Keywords: semisynthesis, plant pigments, betalains, dyes.

Highlights

Betalains are pigments found in some species of plants and fungi. Here we describe the semisynthesis of a diphenylbetalain (dipBeet) and show that this red-orange dye is more stable in aqueous solution than most betalains.

Abstract

Betalains are natural pigments that emerged as antioxidants, drugs and redox mediators.^{1,2} The semisynthesis of betalains is based on the coupling between nitrogen nucleophiles and betalamic acid (**HBt**), which is usually obtained via alkaline hydrolysis of the betalains in red beetroot juice.³ Diphenylamine was prepared using the Buchwald-Hartwig method⁴ *i.e.* Pd-mediated cross coupling between aniline and iodobenzene. The reaction between diphenylamine and **HBt** in acidified ethyl acetate produced diphenylbetalain in ca. 15% yield (**dipBeet**, **Figure 1a**). The change of color from yellow to red-orange was followed by precipitation of the product, which was purified by gel permeation chromatography.

Structural elucidation was performed by high performance liquid chromatography coupled with mass spectrometry (HPLC-MSⁿ/ESI⁺) and ¹H NMR spectroscopy. The hydrolysis of dipBeet was studied in water pH 5 at 60 °C; the half-life of this compound is 5 h compared to 16,5 min of *N*-phenylbetalains (**pBeets**). **DipBeet** shows a broad absorption spectrum with maximum at 504 nm ($\epsilon^{504 \text{ nm}} = 60,000 \text{ L mol}^{-1} \text{ cm}^{-1}$) (**Figure 1b**). The fluorescence spectrum has an emission maximum at 570 nm and the excitation spectrum matches the absorption spectrum (Stoke shift: 66 nm, 2173 cm⁻¹). However, the fluorescence quantum yield of **dipBeet** is $(1.4 \pm 0.1) \times 10^{-3}$, which is one order of magnitude lower than that of fluorescent betalains found in flowers. Compared to natural betalains, **dipBeet** also showed higher hydrolytic stability.

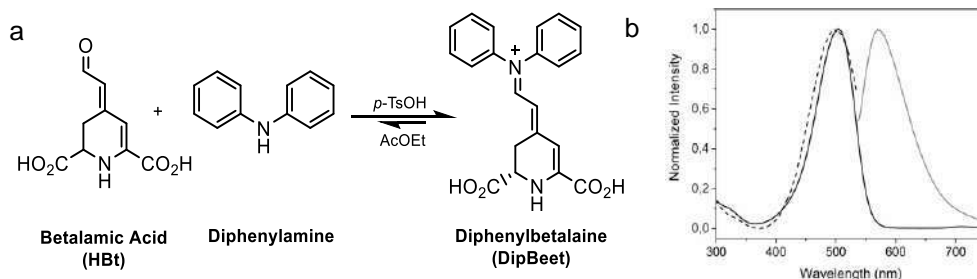


Figure 1. a) Semisynthesis of dipBeet and **b)** dipBeet absorption, emission and excitation spectra.

NMR and DFT data suggests that only one phenyl group is in the same plane of the diazapolymethyne system. Therefore, derivatives of **dipBeet** bearing electron-donating and attracting groups in the aromatic portion are expected to have minor effects compared to the corresponding phenylbetalain.

Acknowledgments

We thank FAPESP (2016/21445-9), CNPq, and CAPES for financial support.

¹ Gonçalves, L. C. P. Doctorate, Universidade Federal do ABC, 2012.

² Clifford, T., Howatson, G., West, D. J. & Stevenson, E. J. *Nutrients* **7**, 2801–2822 (2015).

³ Gonçalves, L. C. P. *et al. Rev. Virtual Quim.* **7**, 292–309 (2015).

⁴ (a) Guram, A. S. & Buchwald, S. L. J. *Am. Chem. Soc.* (1994); (b) Louie, J. & Hartwig, J. F. *Tetrahedron Lett.* (1995).

Application of an electrochemical sensor of MWCNTs obtained by electrospinning for the determination of 2,4,6-Trichlorophenol.

Ana Paula Gusmão (PG),^{1*} Andressa Giombelli Rosenberger (PG),¹ Alessandra Ruyz Medeiros (IC),¹ Douglas Cardoso Dragunski (PQ),¹ Josiane Caetano (PQ).¹

ale.ruuyz@gmail.com; anapg.8@hotmail.com

¹Universidade Estadual do Oeste do Paraná, Rua da Faculdade, 645 – Toledo – PR – Brasil

Palavras Chave: fibras poliméricas, nanotubos de carbono, eletroquímica, pesticida, curva analítica.

Highlights

Electrospinning for the modification of an electrochemical sensor.

Electrochemical determination of 2,4,6-trichlorophenol pesticide in water, which obtained a detection limit of 0.22 mgL⁻¹.

Resumo/Abstract

As técnicas eletroquímicas são especialmente atraentes principalmente quando utilizadas na resolução de problemas ambientais. Desta forma, este trabalho visa o desenvolvimento de uma metodologia para determinação de 2,4,6-Triclorofenol (2,4,6-TCF) que é considerado um poluente ambiental de caráter carcinogênico e reduzida biodegradabilidade. Para isso, foi usado um sensor eletroquímico a partir de fibras poliméricas com nanotubos de carbono de paredes múltiplas (MWCNT's), essas fibras foram obtidas por eletrospinning, usando para isso o polímero PBAT/PLA nos solventes clorofórmio e dimetilformamida juntamente com a adição de MWCNT's. Os Parâmetros da técnica foram: vazão de 1,80 mL h⁻¹, distância entre a ponta da agulha e o alvo coletor: 16 cm, e tensão: 18 kV. O filme polimérico com MWCNT's foi tratado termicamente por 5 horas a 550 °C e o material obtido foi utilizado no preparo de uma suspensão de quitosana que foi colocada sobre a superfície de um eletrodo de carbono vítreo. Para as medidas eletroquímicas foram usados como referência o Ag/AgCl/KCl 3,0 mol L⁻¹ e o auxiliar a placa de platina. Inicialmente realizou-se medidas de voltametria cíclica, onde foi possível que o 2,4,6-TCF apresenta um pico de oxidação irreversível em aproximadamente 0,71 V. Para o desenvolvimento da metodologia, inicialmente realizou-se a otimização dos parâmetros, obtendo-se como melhor resposta a frequência de 150 Hz; amplitude 50 mV e incremento 7 mV. Após a otimização dos parâmetros, construiu-se a curva analítica em duplicata no

intervalo de concentração de 1,00 x 10⁻⁶ a 3,00 x 10⁻⁵ mol L⁻¹. (Figura 1)

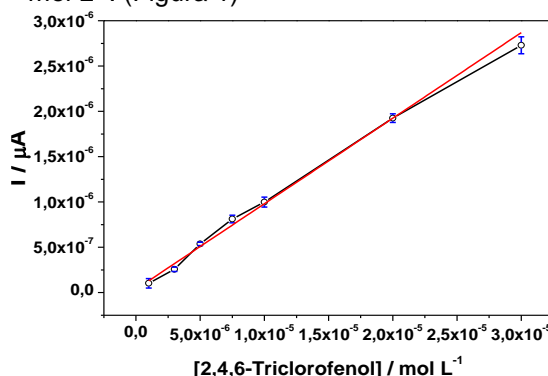


Figura 1. Curva analítica para o 2,4,6-Triclorofenol nas concentrações de 1,00 x 10⁻⁶ a 3,00 x 10⁻⁵ mol L⁻¹, em tampão BR pH 7,0 ($f = 150$ Hz, $\alpha = 50$ mV, $\Delta E_s = 7$ mV).

A curva apresentou a equação da reta $I_p = 3,70 \times 10^{-8} + 0,094 [2,4,6\text{-Triclorofenol}]$ com um coeficiente de correlação de Pearson de 0,995. O limite de detecção foi calculado usando a equação: $LD = (3,3 \times Sb)/b$ em que: Sb = desvio dos pontos da curva (resíduo) e b = coeficiente angular. O valor encontrado para o limite de detecção foi de $1,12 \times 10^{-6}$ molL⁻¹ (0,22mgL⁻¹), este valor encontra-se próximo ao permitido pelo Ministério da Saúde água potável (0,20mgL⁻¹), desta forma, a metodologia é promissora para a determinação de 2,4,6-TCF em água para o consumo humano. Este resultado é de extrema importância, pois a metodologia desenvolvida é rápida e de baixo custo, possibilitando análises corriqueiras

Agradecimentos/Acknowledgments

Agradecimentos a UNIOESTE, ao laboratório GIPEFA, a CAPES e a Fundação Araucária.

Área: INO

Nº de Inscrição: 01326

From 2,4,6-tris(2-pyridyl)-1,3,5-triazine (tpyt) molecule to a new copper(II) complex containing the [Cu(bpca)]⁺ unit: Preparation, general characterization and magnetic property.

Rafaela M. R. da Silva (IC),^{1*} Eloisa O. Ribeiro (IC),¹ Nathália R. de Campos (PG),¹ Antônio C. Doriquetto (PQ),¹ Marcos A. Ribeiro (PQ),² Wdeson P. Barros (PQ),³ Humberto O. Stumpf (PQ),⁴ Maria Vanda Marinho (PQ).¹

rafaela_ribeiro11@hotmail.com; mvmarinho09@gmail.com.

¹Instituto de Química, Universidade Federal de Alfenas, Unidade Educacional Santa Clara, Alfenas, Minas Gerais, CEP 37133-840. ²Departamento de Química, Universidade Federal do Espírito Santo, Vitória, CEP 29075-910. ³Instituto de Química, Universidade Estadual de Campinas, Campinas, SP CEP 13083-970. ⁴Departamento de Química, Universidade Federal de Minas Gerais, Belo Horizonte, Minas Gerais, CEP 31270-901.

Keywords: Copper(II) complex, Nitrogen ligand, Structural characterization, Magnetic properties.

Highlights

- Preparation of the [Cu(bpca)]⁺ unit by hydrolysis of 2,4,6-tris(2-pyridyl)-1,3,5-triazine (tpyt);
- Synthesis of the copper(II) complex containing bis(2-pyridylcarbonyl)imide (Hbpca) and 1,3-bis(4-pyridyl)propane (bpp) ligands;
- Single-crystal X-ray diffraction and magnetic property.

Abstract

The organic 2,4,6-tris(2-pyridyl)-1,3,5-triazine (tpyt) molecule is very stable in relation to hydrolysis, drastic conditions being required for the occurrence of their hydrolytic reaction.¹ It is well known that copper(II) salts promote the hydrolysis of triazines in aqueous solution and under mild conditions afford the [bis(2-pyridylcarbonyl)amido]copper(II) complex. Thus, here, we present the preparation and general characterization of [Cu(bpca)(H₂O)(ClO₄)(μ-bpp)Cu(bpca)(H₂O)₂]ClO₄·H₂O (**1**) together with the study of its magnetic property.² The IR spectrum shows stretching at 1709 [ν(C=O)_{imide}] and at 1620, 1598, 1572, 1475, 1450 [ν(C=C=N)_{bpp}] indicating the presence of the ligands. TG curve exhibits loss of the crystallization and coordinated water molecules in two steps at 40 and 209 °C, and the resulting anhydrous phase is stable in the temperature range 194-255 °C. The structure of **1** was confirmed by single-crystal X-ray diffraction being constituted by cationic bpp-bridged dicopper(II) units with end-cap bpca ligands, non-coordinate perchlorate and water molecules of crystallization (Figure 1). An extensive network of hydrogen bonds leads to a supramolecular 2D network as shown in Figure 2. The stacking of these supramolecular layers along the crystallographic *a* axis give rise to channels parallel to the [021] direction which are filled by the disordered water molecules and one of the perchlorate groups (C11) (Figure 3). Very weak antiferromagnetic couplings is observed in **1** through the bis-monodentate bpp bridges, this spacer appearing as very poor mediators of magnetic interactions between the copper(II) ions linked by it.

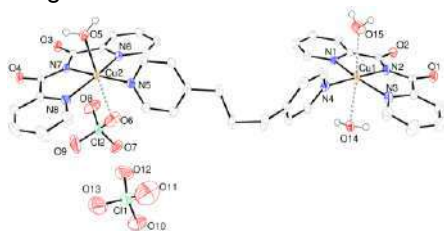


Figure 1. Perspective view of the asymmetric units of **1** with partial atom numbering.

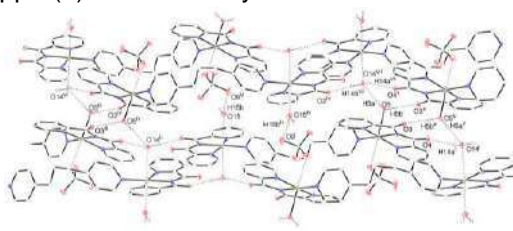


Figure 2. A view of the interconnection between the supramolecular double chains in **1** along the crystallographic *c* axis.

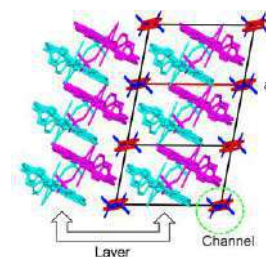


Figure 3. View of **1** showing the stacking of layers along the crystallographic *a* axis.

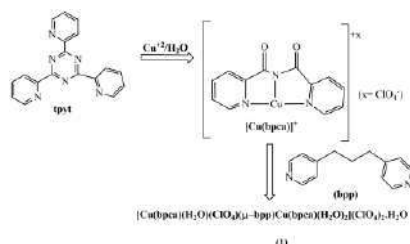


Chart 1- Schematic representation of the synthesis of **1**.

Acknowledgments

PIBIC-CNPq, Unifal-MG, Capes, Fapemig.

1. E. I. Lerner, S. J. Lippard, *Inorg. Chem.*, 1977, 16, 1537.
2. E. O. Ribeiro, *et al.*, *CrystEngComm.*, **19**(36), 5460-

Área: MAT

Nº de Inscrição: 01327

Primary Thermometers based on Upconverting Er³⁺/Yb³⁺ co-doped Yttrium Tantalates

Fernanda H. Borges (PG),¹ Fábio J. Caixeta (PG)¹, Joana Martins (PG)², Carlos D. S. Brites (PQ)², Luís D. Carlos (PQ)², Rute A. S. Ferreira (PQ)², and Rogéria R. Gonçalves (PQ)^{1*}.

fernanda.hediger.borges@usp.br; rrgoncalves@ffclrp.usp.br

¹Laboratório de Materiais Luminescentes Micro e Nanoestruturados – Mater Lumen, Department of Chemistry, FFCLRP, University of São Paulo, SP, Brazil; ²Department of Physics and CICECO-Aveiro Institute of Materials, University of Aveiro, Aveiro, Portugal.

Palavras Chave: Er³⁺/Yb³⁺ co-doped Yttrium Tantalate, Upconversion, Nanothermometry

Highlights

Y₃TaO₇:Er³⁺/Yb³⁺ materials were synthesized via sol-gel method. Upconversion process was studied as function of the doping concentration. The samples are primary thermometers with maximum relative maximum sensitivity of 1.14 % K⁻¹ and temperature uncertainty of 0.07 K.

Resumo/Abstract

Recently, several luminescent materials have been developed to be used as luminescent temperature nanoprobe aiming to bypass the limitations of contact thermometry. Ln³⁺-doped compounds have been extensively studied for this purpose in the past years, and some upconverting nanoparticles are showing promising applications for Biophotonics [1]. In the present work, we report the synthesis, structural and spectroscopic characterization of Er³⁺/Yb³⁺ co-doped yttrium tantalate using a novel synthetic method. The materials were prepared by the sol gel method using a controlled hydrolysis and condensation reactions of tantalum ethoxide and Y(NO₃)₃ as precursors in a basic ethanolic solution. The concentrations of the rare earth ions were xEr³⁺/3xYb³⁺ (x=0.5, 2.0, and 5.0 mol %). Solid products were annealed at 900 or 1100 °C for 2 h. X-ray diffraction analysis showed the stabilization of Y₃TaO₇ orthorhombic crystalline phase for the samples annealed at 900 or 1100 °C. Only for the lower concentrated sample, annealed at 1100 °C, a minimum formation of the secondary crystalline phase, M'-YTao₄, was observed. Vibrational spectroscopy studies showed that both crystalline phases present bands corresponding to Ta-O and Y-O vibrational modes and an absence of OH and CH groups. All the samples display visible emission at the naked eyes under 980 nm excitation. Upconversion mechanisms were determined by the well-known power law [2]. The green emission lines (²H_{11/2} → ⁴I_{15/2} and ⁴S_{3/2} → ⁴I_{15/2} transitions of Er³⁺) were attributed to energy transfer process whereas cross-relaxation mechanism led to red ones (⁴F_{9/2} → ⁴I_{15/2} transition). The cross-relaxation process depends on Ln³⁺ doping. The upconversion quantum yields were up to 0.016 ± 0.002 %. The studies of the samples doped with Er³⁺/Yb³⁺ 0.5/1.5 mol % annealed at 900 or 1100 °C as primary thermometers were successfully developed. The temperature can be predicted without any calibration through the Boltzmann law, using the ratio of the intensity of the ²H_{11/2} → ⁴I_{15/2} and ⁴S_{3/2} → ⁴I_{15/2} transitions of Er³⁺ [3]. The maximum relative thermal sensitivity is 1.14 ± 0.04 % K⁻¹ for both samples. The repeatability of the nanothermometers were determined as 97.8% and 98.8%, with a minimum temperature uncertainty of 0.515 and 0.067 K, respectively. Our results are a clear indication that primary thermometers can be implemented using Er³⁺/Yb³⁺ co-doped yttrium tantalate upconverting nanoparticles with benefit for Biophotonics applications.

[1] Brites, C. D. S., A. Millán, and L. D. Carlos. *Handbook on the Physics and Chemistry of Rare Earths*. 49 (2016). Elsevier, 339-427.

[2] Pollnau, M., Gamelin, D. R., Lüthi, S. R., Güdel, H. U., & Hehlen, M. P. *Phys. Rev. B*, 61.5 (2000), 3337.

[3] Balabhadra, S., Debasu, M. L., Brites, C. D., Ferreira, R. A., & Carlos, L. D. *J. Phys. Chem. C*, 121.25 (2017), 13962-13968.

Agradecimentos/Acknowledgments

This work was supported by CNPq, CAPES and FAPESP (grants number 2017/10424-3 and 2018/04587-0).

Área: ANANº de Inscrição: 01328

Determinação espectrofotométrica de água em açúcares utilizando reação de descoloração do cloreto de cobalto

Wesley A. Carlos (IC)*,¹ Wanessa R. Melchert (PQ).¹

*wesley.alcantara@usp.br

¹ Departamento de Ciências Exatas/ESALQ-USP;

Palavras Chave: Açúcar, Água, Espectrofotometria, Cloreto de cobalto.

Highlights

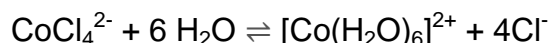
Spectrophotometric determination of water in sugars using cobalt chloride

Fast and sensitive method

Green chemistry

Resumo/Abstract

A determinação do teor de água é uma análise importante no quesito de qualidade de açúcares. Altos teores de umidade podem acarretar inúmeros problemas, como perda da capacidade de escoamento, empedramento e amarelamento, levando a depreciação na qualidade do produto final. Para tal fim, a busca por metodologias analíticas rápidas e sensíveis vem se intensificando. Deste modo, empregou-se neste trabalho a reação de descoloração do cloreto de cobalto anidro ($\lambda = 681 \text{ nm}$) que é azul e em presença de água, adquire coloração rosa, devido à formação do hexaaquocobaltato (II), conforme reação abaixo:



O sinal analítico obtido da solução do cloreto de cobalto anidro foi considerado como 100%. A medida que o complexo de cobre hidratado foi formado, houve decréscimo nesse sinal e, por consequência, na porcentagem resultante. Desta maneira, quanto mais água foi liberada pela amostra, menor a porcentagem obtida.

Amostras de açúcares (0,5000 g) em 5 mL de solução de cloreto de cobalto anidro ($5,25 \text{ mol L}^{-1}$) foram submetidas a diferentes procedimentos de aquecimento ou agitação (banho maria, mesa agitadora orbital, vórtex e banho de ultrassom) para favorecer a liberação das moléculas de água. O procedimento com o emprego do banho maria foi que apresentou maior porcentagem resultante (93,1%), o que já era esperado, pois não houve nenhum procedimento de agitação. Quando foi empregado procedimento de agitação, tanto com a mesa orbital e o vórtex, porcentagens menores foram obtidas cerca de 87,0%. No entanto, resultados promissores foram obtidos no emprego do banho de ultrassom (83,3%), ou seja, houve maior liberação de moléculas de água. Após otimização do tempo de sonicação em 35 min e concentração da solução de cloreto de cobalto em $5,00 \times 10^{-3} \text{ M}$, resposta linear foi obtida entre 0,23 e $3,70 \text{ mol L}^{-1}$ de água, descrita pela equação $A = 69,05 - 0,14 C_{\text{H}_2\text{O}}$ ($R=0,992$), limite de detecção (95% de confiança) e coeficiente de variação ($n=18$) foram estimados em $0,050 \text{ mol L}^{-1}$ e 0,8%, respectivamente.

Amostras de açúcar cristal branco (A1-A4), foram adquiridas em comércio local, e analisadas pelo procedimento proposto, obtendo concentrações de água entre $0,69 \pm 0,01$ e $0,81 \pm 0,03 \text{ mol L}^{-1}$. Estudos complementares estão sendo realizados a fim de comparar os resultados obtidos com o procedimento de referência.

Agradecimentos/Acknowledgments

À FAPESP pela bolsa concedida (Processo n. 2018/11764-5).

Niobium on dealuminated BEA zeolite as efficient catalyst for dehydration of ethanol to diethyl ether

Deborah S. Valadares (PG), Maria C. H. Clemente (PG), André B. Lacava (IC), Lais S. Barbosa (PG), Gesley A. V. Martins (PQ), José A. Dias (PQ), Sílvia C. L. Dias (PQ)^{1*}

silviadiasunb@gmail.com

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

Palavras Chave: BEA zeolite, Solid-state dealumination, Ethanol dehydration, Niobium, Lewis acid sites, Diethyl ether.

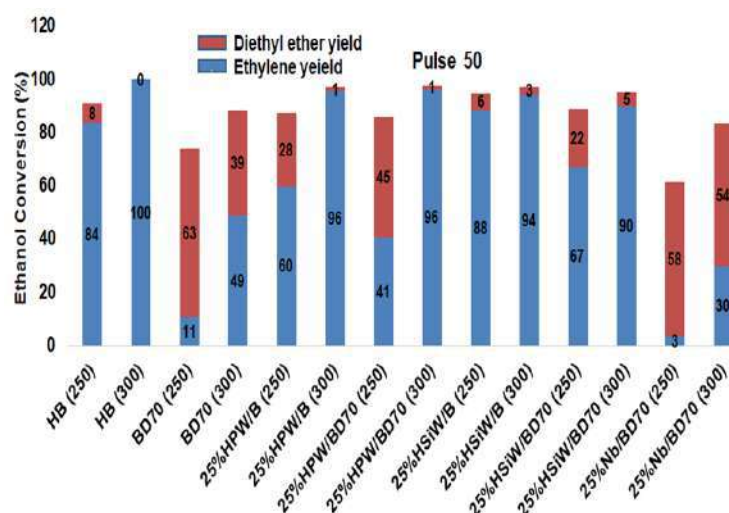
Highlights

Dealuminated BEA zeolite presented better diffusion, higher hydrophobicity and generated larger pores. Nb impregnation favored Lewis sites generation and 58% diethyl ether yield compared to HBEA (8%).

Resumo/Abstract

Renewable sources, such as ethanol, are important to obtain derivative products by clean catalytic processes. BEA zeolite was dealuminated by ammonium hexafluorosilicate (70 mol% Al removal) under specific conditions, maintaining crystallinity, showing larger pores and higher hydrophobicity. Impregnation with $H_3PW_{12}O_{40}$, $H_4SiW_{12}O_{40}$ and Nb_2O_5 explained the selectivity, showing that Lewis acid sites favored the production of diethyl ether. The production of the intended product was fine-tuned, showing the versatility of the catalyst under specific reaction conditions.

Table 1. Brønsted/Lewis ratio of catalysts and coke formation after ethanol dehydration reaction.



^a

| Sample | B/L ^a (a. u.) | Coke (%) ^b |
|--------------|--------------------------|-----------------------|
| HB | 1.45 | 1.4 |
| BD70 | 0.85 | 0.5 |
| 25%HPW/B | 2.78 | 3.2 |
| 25%HPW/BD70 | 0.99 | 1.6 |
| 25%HSiW/B | 1.49 | 3.2 |
| 25%HSiW/BD70 | 1.35 | 1.9 |
| 25%Nb/BD70 | 0.18 | 0.6 |

Brønsted/Lewis ratio obtained by the integration of DTG peaks after pyridine adsorption.

^b Coke formed on the catalyst after reaction, measured by CHN elemental analysis.

Figure 1. Ethanol conversion and selectivity using a pulsed-flow fixed-bed microreactor coupled to a GC at 250 and 300°C (50 pulses, WHSV = 57 h⁻¹).

Agradecimentos/Acknowledgments

CNPq, UnB/DPI/IQ, FAPDF, CAPES, MCTI/CNPq, FINATEC, FINEP/CTPetro, and FINEP/CTInfra for doctoral, undergraduate scholarships and financial support. Dr. Richieli Vieira (commercial development coordinator, PQ Silicas Brazil) for providing BEA (CP814E⁺).

Síntese assistida por microondas de uma nova biaril-base de Schiff fluorada com potenciais propriedades ópticas não-lineares

Daniela Corrêa Santos¹(IC); **Marcos Antonio de Abreu Lopes Junior**¹(PG); **Diego Fernando da Silva Paschoal**¹(PQ); **Andréa Luzia Ferreira de Souza**^{1*}(PQ)

daniela.csantos97@gmail.com; andrealuzia@gmail.com*

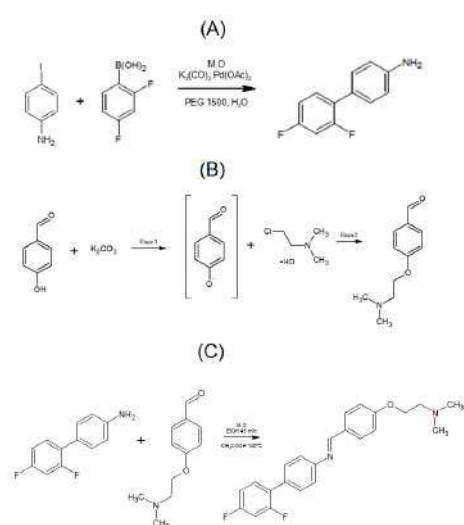
¹Universidade Federal do Rio de Janeiro Campus Macaé – Professor Aloísio Texeira – RJ – Brasil

Palavras Chave: Biarila, Suzuki, Base de Schiff, óptica não-linear.

Highlights

Microwave-assisted synthesis of a new Fluorinated Biaryl-Schiff Base with potential nonlinear optical properties. NLO properties are observed in the excitations that the electrons undergo as they move from the HOMO orbital to LUMO, such as molecules with the push-pull system. Fluorinated compounds have low viscosity and high polarity, in addition to high chemical and thermal stability, so it attracts attention in the development of functional materials such as liquid crystals.

Resumo/Abstract



Esquema 1. (A) - Formação do intermediário 2; (B) - Formação do intermediário 3; (C) - Formação da biaril-base de Schiff fluorada 1.

Introdução. O estudo de propriedades ópticas não-lineares (ONL) vem obtendo grande atenção devido a sua aplicação tecnológica. Essas propriedades ONL originam-se nas excitações que seus elétrons podem sofrer ao se moverem do orbital HOMO para LUMO, um exemplo são as moléculas com o sistema *push-pull* que incluem um grupo doador e um receptor conectados por uma conjugação π . Uma nova classe de biarilas com propriedades ONL vem sendo desenvolvida.^[1,2] Por sua vez, os compostos fluorados apresentam alta polaridade, além da estabilidade química e térmica, devido à alta energia de ligação e do momento de dipolo da ligação C-F, atraindo o desenvolvimento de materiais funcionais como os cristais líquidos.^[3] O presente trabalho tem como objetivo a síntese, caracterização e estudo computacional das propriedades ópticas não-lineares de uma nova biaril-base de Schiff fluorada. **Metodologia.** A síntese da Biaril-Base de Schiff Fluorada (**1**) foi realizada por meio de três etapas sob irradiação de microondas (MO) (Esquema 1). **Resultados e Discussões.** A reação de Suzuki forneceu o intermediário **2** com 98% de conversão (CG-EM). Um estudo da reação de SN2 foi realizado para a obtenção do intermediário **3** (tabela 1). A melhor

metodologia foi a 3.2, que apresentou a formação do produto com 65% de conversão observada por CG-EM. Com isso, a mesma foi testada sob MO no qual resultou numa diminuição do tempo reacional para 1h 30min. A síntese da biaril-base de Schiff **1** sob MO forneceu 25% de rendimento, a caracterização foi realizada por espectrometria de massas de alta resolução, IV e RMN de ¹H e ¹³C. Os cálculos computacionais das propriedades ONL estão em andamento. **Conclusão.** O derivado proposto neste trabalho foi sintetizado e caracterizado com sucesso. **Referências.** ^[1] BURES, F. *RSC Adv.* v.4, p.58826-58851, 2014. ^[2] PASCHOAL, D. et al. *Org. Elec. v.28* p.111-117, 2016. ^[3] TSEHIERSKE, C. *Top. Curr. Chem.* v.318 p.1-108, 2011.

Tabela 1. Metodologias para síntese do intermediário 3

| Reação | Solvente | Tempo etapa 1 | Tempo etapa 2 | Aldeído | Cloridrato | K ₂ CO ₃ | Δ (C°) |
|--------|----------|---------------|---------------|---------|------------|--------------------------------|---------------|
| 3.1 | PEG 400 | 30 min | 5 h | 2 eqv. | 1 eqv. | 3 eqv. | T.A |
| 3.2* | Acetona | 2 h | 2 h | 1 eqv. | 1,4 eqv. | 3 eqv. | 60 |
| 3.3* | PEG 400 | 2 h | 2 h | 1 eqv. | 1,4 eqv. | 3 eqv. | T.A |
| 3.4* | PEG 400 | 2 h | 2 h | 1 eqv. | 1,4 eqv. | 3 eqv. | 60 |
| 3.5 | PEG 400 | 30 min | 24 h | 2 eqv. | 1 eqv. | 3 eqv. | T.A |

*O cloridrato foi neutralizado com K₂CO₃

Agradecimentos/Acknowledgments

PIBIC, CNPQ, FAPERJ.

Insecticidal activity evaluation of polymeric nano/microparticles of Neem oil in *Aphis persica*

Michelli Massaroli (PQ),¹ Luis G. C. Durango (PG),¹ Danielle da Silva (IC),^{1*} David Buss(PQ),² Moacir Forim (PQ),¹ Toby Bruce (PQ),² Maria Fátima G. F. da Silva (PQ)¹

mimassaroli@gmail.com; danielle_fs@hotmail.com

¹ Department of Chemistry, Federal University of Sao Carlos, Brazil; ² Keele University - School of Life Sciences, UK.

Palavras Chave: Azadirachtin, Nanoparticle, *Aphis persica*, collard greens, insecticidal activity

Highlights

Agriculture is one of the main economies of Brazil, which is the largest world producer of several important crops such as soy, cotton, orange and others. On the other hand, Brazil is considered one of the largest consumers of agricultural pesticides in the world. By restricting the use of these products, it is necessary to search for new substances that have low toxicity and environmental impact. Within this context, plant-based pesticides might be an interesting option. Neem oil (*Azadiractha indica*) is a natural product that has been already used in agriculture; however, due to instabilities of its active principles (Azadiractins) under environmental conditions, development of new formulations that prevent this problem or new routes of delivering the oil that avoids its direct contact with the environment are extremely important. In this sense, polymeric nano/microencapsulation of Neem oil showed to be effective in the environmental stability of the Azadirachtin present in the oil. Thus, Neem nano/microencapsulated oil was tested with *Aphis persicae* to evaluate its potential insecticidal activity. The results showed an important repellency effect on collard greens leaves infected with the insect when treated with the nano/microencapsulated oil.

Resumo/Abstract

Azadirachtins found in Neem oil are tetranortriterpenoids present in the seeds of *Azadiracta indica* A. Juss at high concentration. Among these substances, Azadirachtine A is considered one of the main commercial biopesticides, due to its effectiveness in pest control.¹ However, due to the instability of Azadirachtine A under environmental conditions, its efficiency is reduced over time.² An alternative method to control this problem is the development of polymer formulations (nano/microparticles) that present several advantages such as: biocompatibility, biodegradability, incorporation of the active principle without chemical reactions and the controlled release of the active principle prolonging its time of action.³ In the specific case of azadirachtins, there is a significant increase in the stability of the substances.⁴

In this context, the present work aims to evaluate the insecticidal activity of nano/microencapsulated Neem oil in *Aphis persicae* (Collard greens aphid). The experiment with five replicates was performed *in vitro* on Petri dishes with collard greens leaves treated with the nano/microencapsulated oil and infested with *A. persicae*, which was collected from adult collard greens plants. The obtained results showed an important repellency effect of the nano/microencapsulated oil towards *Aphis persicae*, *i.e.*, the aphids stayed away from leaves treated with the nano/microencapsulated oil (stayed in the lid of the Petri dishes). On the other hand, all leaves remained full of *A. persicae* in the control experiment.

Because the *A. persicae* is a sucking insect, future experiments about the mode of systemic action will be carried out to find better ways of managing the nano/microencapsulated oil for pest control.

The nano/microparticles were formulated using colloidal suspension by the prepolymer polymer precipitation technique and by Spray-Dryer to obtain the powder of encapsulated oil. This product was characterized according to its morphology, zeta potential, pH, particle diameter, absolute recovery percentage, and encapsulation efficiency, as well as the kinetics of oil release and photochemical and thermal stability.

References

¹ OULHACI, C. M. et al. *Pest management science*, 74(1), 174-180, 2017.

² FORIM, M. R. *Journal of agricultural and food chemistry*, 61(38), 9131-9139, 2013.

³ PASQUOTO-STIGLIANI, T. et al. *Scientific reports*, 7 (1), 5929, 2017.

⁴ OROZCO-SÁNCHEZ, F.; RODRÍGUEZ-MONROY, M. *Revista mexicana de ingeniería química*, 6(3), 251-258, 2007.

Agradecimentos/Acknowledgments

The authors thank to FAPESP (2017/50452-6), CAPES and CNPQ (INCT: 465357/2014-8) for scholarships and financial support.

Área: MATN° de identificação: 01337

Study of the adsorption of the larvicide Temephos in dry bed column using copper ferrite (CuFe_2O_4) as adsorbent

Lara L. F. Oliveira (IC),¹ Lara C. Costa (IC),¹ Amanda A. Batista (IC),¹ Elidiane C. Coelho (TC),¹ Luis F. Soares (PQ).^{1*}

luizalara422@gmail.com; lfoares@ufsj.edu.br

¹Departamento de Bioquímica, UFSJ / CCO

Key words: *Temephos, Ferrite Copper, Adsorption, Environment.*

Highlights

The study of the adsorption of the larvicide Temephos in copper ferrite shows a possible alternative to reduce the environmental damages caused by the contact of this larvicide with the groundwater.

Abstract

The Temephos is an organophosphate larvicide used to treat water infected with insects that transmit disease. The unconscious use of this larvicide can cause environmental impacts, since it can be leached or carried to the water resources by rain, causing contamination and leading to the death of fish, and other aquatic organisms. Of the new materials that are being studied as possible adsorbents of contaminants are the ferrites (MFe_2O_4). These compounds have a crystalline structure of the spinel type, where the metal (M) is arranged in a tetrahedral structure and the Iron in an octahedral structure. Among these ferrites, copper ferrite (CuFe_2O_4) is among the most studied adsorbents because of its magnetic properties. In this work, the copper ferrite used in the adsorption of the Temephos solution was synthesized by the co-precipitation method (750°C) and characterized by infrared (KBr). The stock solution ($50 \mu\text{g/mL}$) of the larvicide was diluted in water to a concentration of $4,00 \times 10^{-3} \mu\text{g/mL}$ (transparency), yielding an absorbance of 1.221. Two experiments (triplicate) were carried out on chromatographic columns, the first with approximately 3,0000 g (COLUMN 1) and the second with 6,0000 g (COLUMN 2) of copper ferrite and the fractions of 3 and 6 mL were collected, respectively. Each fraction harvested was read in a UV-visible spectrophotometer at 250 nm. The experimental results show the high adsorption of larvicide in copper ferrite, with the most significant values being the reduction of the absorbance from 1.221 to 0.170 (COLUMN 1) and 0.079 (COLUMN 2), with an adsorption variation of 86% and 94%, respectively. The experimental results are shown in Figure 1. Since there is a high adsorption of the larvicide in Copper Ferrite, there is an alternative to reduce the damages caused by the contact of Temephos with the groundwater, thus leading to a possible decrease of the damages caused by this larvicide.

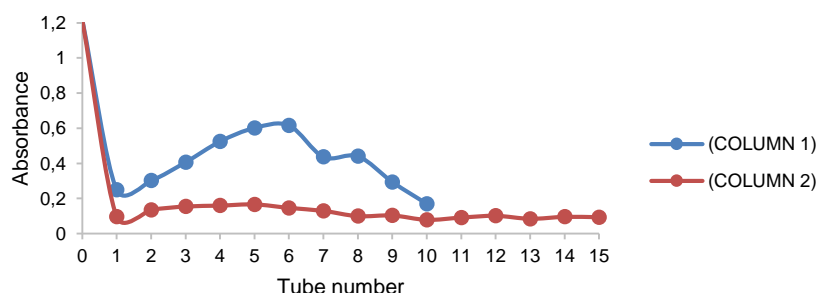


Figure 1: Results of adsorption of Temephos on columns with copper ferrite.

¹ABE, F.R. Avaliação ecotoxicológica e risco ambiental dos inseticidas utilizados no controle de larvas de *Aedes aegypti* para *Daphnia magna*, *Lemna minor* e peixes. Universidade Estadual Paulista. São Paulo, 2012.

²SANTOS, M.J. Estudo da Síntese da Ferrita de Cobre e sua atividade adsorptiva e moduladora dos fármacos: captopril, enalapril, lisinopril, verapamil. Universidade Federal de São João del Rei, Campus Centro Oeste. Divinópolis, 2016.

Acknowledgments

FAPEMIG and UFSJ.

Caracterização de filmes de gelatina modificados com formaldeído

Ana M. G. Campuzano (PG), Angelita R. Krama (IC), Marcia M. Meier (PQ).*

anita_gonza8@hotmail.com; marcia.meier@udesc.br

¹Programa de Pós-Graduação em Química, UDESC.

Palavras Chave: Polímero, Gelatina, Crosslink, Formaldeído, Absorção

Highlights

Characterization of gelatin films modified with formaldehyde

An alternative to prolong the bio-resorption time of natural films of gelatin or collagen is to modify the polymer network by crosslinking with aldehydes such as formaldehyde.

Resumo/Abstract

Devido a elevada biocompatibilidade e potencial de biorreabsorção, membranas a base de gelatina ou colágeno têm diversas aplicações como regeneração tecidual guiada. Devido a rápida bioreabsorção da gelatina, o objetivo deste trabalho foi produzir filmes com diferentes teores de formaldeído como agente reticulante, de forma a encontrar a menor absorção de água. As membranas foram produzidas modificando o método proposto por Carvalho e Grosso (2004)¹, misturando-se gelatina (G), formaldeído (F) (0,0; 2,0; 3,0; 6,0 e 12 mmol em 2,1g de gelatina) e Glicerol (G) como plastificante. Os testes de absorção (Abs) de água foram realizados em tampão PBS (n=3).

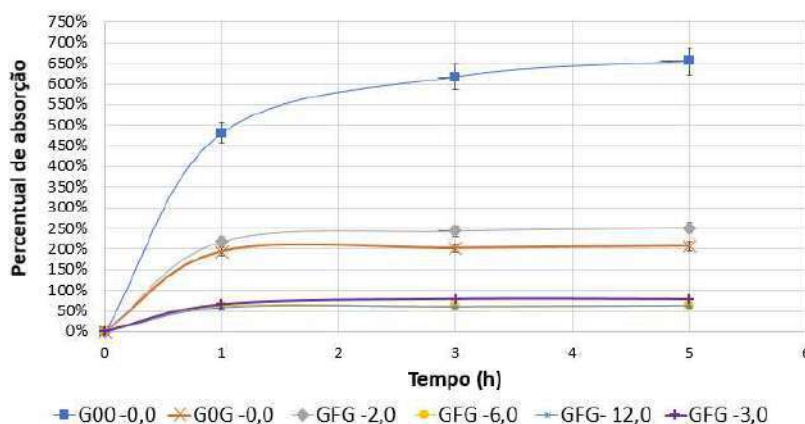


Figura 1: Percentual de absorção de água em filmes de gelatina contendo glicerol e formaldeído (0,0; 2,0; 3,0; 6,0 e 12 mmol).

A Figura 1 mostra que a reticulação da gelatina com 2,0 mmol de F (GFG-2,0) causa significativa redução da absorção de água em relação a gelatina pura (G00), semelhante ao efeito causado pela presença do plastificante (G0G), mas ainda na ordem de 200%. Por outro lado, a presença de 6 e 12 mmol de F geram filmes com os menores valores de absorção de água em função do elevado nível de reticulação. A adição de 3,0 mmol de F causou reticulação suficiente para reduzir a absorção de água, dando integridade mecânica adequadas à manipulação dos filmes, sem torná-los quebradiços.

Agradecimentos/Acknowledgments

Agradecemos à UDESC, FAPESC, CNPQ. O presente trabalho foi realizado com apoio da Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior - Brasil (CAPES) - Código de Financiamento 001.

¹ DE CARVALHO, R. A.; GROSSO, C. R. F. Characterization of gelatin based films modified with transglutaminase, glyoxal and formaldehyde. Food hydrocolloids, v. 18, n. 5, p. 717-726, 2004.

Área: BEA

Nº de Inscrição: 01340

Evaluation of phytate, mineral and polyphenol contents in a sample of *Lablab purpureus* L. Sweet

Bruna Luana F. da Rocha (IC),¹ Sandra R. C. Santos (PG),² Mariângela V. Lopes (PQ),² Deusdelia T. de Almeida (PQ),³ Ralf Greiner (PQ),⁴ Wagner P. C. dos Santos (PQ).^{1*}

brulua16@gmail.com; wagner.ifba@gmail.com

¹Departamento de Química, IFBA, Brazil; ²Departamento de Ciências da Vida UNEB, Brazil; ³Departamento de Nutrição, UFBA, Brazil; ⁴Max Rubner-Institute, Germany

Keywords: Leguminous, Phytates, Polyphenols, Minerals, Heat treatment

Highlights

The thermal processes reduced the concentrations of InsP₆, Fe, Zn and total phenols in the beans. The microwave oven procedure increased the bioavailability of Ca. Conventional cooking increased the bioavailability of Fe.

Resumo/Abstract

The species *Lablab purpureus* L. Sweet is cultivated within the family agriculture in the state of Bahia, being used in animal feed and human is a source of income for the small farmer. As for the nutritional aspects, the essential elements are Ca, K, Mg, Fe, Zn and compounds with antioxidant action, such as polyphenols¹. Polyphenols are bioactive compounds present in legumes presenting physiological functionality in the prevention of chronic diseases. On the other hand, tannins are part of this group of compounds, which have the ability to precipitate proteins and therefore have antinutritional action. In addition to tannins, phytates may decrease the bioavailability of metal ions by the formation of chelates². In order to evaluate the levels of minerals, total phenols (TF) and phytates (InsP_x), the green beans of the legume were submitted to the conventional thermal processing in a ceramic pan (FO) and domestic microwave oven in glass pan (MO). After cooking, the beans were separated from the coating liquid and lyophilized for 48 h. The dried beans were milled in an analytical mill at 28,000 rpm for 40 s. Fresh green grains (IN) were also dried and ground for further analysis. The determination of the total mineral content by inductively coupled plasma optical emission spectrometry (ICP OES) was performed after acid-assisted microwave acid decomposition. Phytates were determined by high performance liquid chromatography (HPLC) using a mixture of myoinositol phosphate esters (InsP₃-InsP₆) as standard ($\mu\text{mol g}^{-1}$). For the determination of TF, a Folin-Ciocalteu method was used with a range of $5.0 \cdot 10^{-2}$ to $2.5 \cdot 10^{-1} \text{ g L}^{-1}$ by UV-Vis spectrophotometry. The results were respectively: $A = 1.6408 c - 0.0046$, $R^2 = 0.9958$, $\text{LOQ} = 9.7 \cdot 10^{-3} \text{ g L}^{-1}$. The concentrations of InsP₆ ($\mu\text{mol g}^{-1}$) and InsP₅ ($\mu\text{mol g}^{-1}$) were respectively: 26.75 ± 3.60 and 1.04 ± 0.11 (IN); 25.68 ± 1.19 and 1.09 ± 0.31 (FO); 21.50 ± 3.55 and 1.09 ± 0.36 (MO). For the Ca, Zn and Fe minerals the concentrations in $\mu\text{g g}^{-1}$ were, respectively: 705.52 ± 22.51 (IN); 667.64 ± 22.22 (FO); 728.84 ± 29.88 (MO); 30.23 ± 0.57 (IN); 27.08 ± 1.41 (FO); 26.60 ± 0.54 (MO); 71.73 ± 1.18 (IN); 68.13 ± 2.67 (FO); 70.64 ± 2.97 (MO). The phytate/mineral ratio was determined by obtaining: InsP₆/Ca: 1.52 (IN); 1.54 (FO); 1.18 (MO); InsP₆/Zn: 0.46 (IN); 0.41 (FO); 0.41 (MO); InsP₆/Fe: 20.65 (IN); 21.05 (FO); 17.00 (MO). The values of TF are expressed in $\text{mg EAG } 100\text{g}^{-1}$ sample, being: 14.78 ± 7.97 (IN); 10.15 ± 7.96 (FO) and 5.35 ± 0.02 (MO). The thermal treatments reduced the concentration of InsP₆, iron and zinc and total phenols. There was a reduction in the concentration which can be attributed to the decomposition of thermolabile compounds, diffusion losses and leaching. The reduction in TF content reached higher levels when compared to InsP₆. The thermal treatment MO resulted in lower InsP₆ contents and higher bioavailability of Ca, similar behavior was obtained for Fe in samples submitted to the thermal processing in the stove. As for the TF contents, the thermal processing in MO resulted in lower levels when compared to the FO.

1. Chandrasiria, S.D., Liyanageb, R., Vidanarachchia, J.K., Weththasinghea, P., & Jayawardana. B.C. (2016) *Procedia Food Science*, 6, 352–355.

2. Carrasco-Castilla, J., Hernández-Álvarez, A.J., Jiménez-Martínez, C., Jacinto-Hernández, C., Alaiz, M., Girón-Calle, J., Vioque J., Dávila-Ortiz, G. (2012). *Food Chemistry*, 135, 1789–1795.

Agradecimentos/Acknowledgments

To the Chemistry Department of the IFBA Campus of Salvador, CNPq and FAPESB.

Área: ANA

Nº de Inscrição:

Análise de amostras de solos oriundas do lixão da cidade de Ceres-GO

Phâmella do Carmo (IC)¹, Jozemir M. dos Santos (PQ)¹

phamellacrm@gmail.com

¹Instituto Federal de Educação, Ciências e Tecnologia Goiano, Campus Ceres.

Palavras Chave: (lixo, solo, caracterização).

Highlights

ANALYSIS OF SOIL SAMPLES FROM THE DUMP OF THE CITY OF CERES-GO: In Brazil 91% of the waste produced is deposited in dumps. The soil characterization of these loci is important. The present work aims to characterize the soil of the city of Ceres-GO. Moisture, pH and organic matter were evaluated.

Resumo/Abstract

O aumento na geração de lixo doméstico e industrial, assim como sua destinação final tornou-se um problema recorrente para a sociedade (CAMPUS, 2014). O Brasil gera atualmente 78,3 milhões de toneladas de lixo (ABRELPE, 2017). A Política Nacional de Resíduos Sólidos (PNRS) estabelece que deverão ser eliminados e recuperados os lixões em uso no país (BRASIL, 2010). Entretanto, 91% do lixo produzido no país é depositado em lixões sem quaisquer tratamentos (LIMA, 2018). Este trabalho tem por objetivo caracterizar amostras de solo do lixão da cidade de Ceres-GO, Brasil. Os parâmetros avaliados foram: umidade, pH, matéria orgânica e acidez trocável. As amostras foram coletadas em cinco regiões diferentes do lixão. Em cada ponto foram coletados três subpontos. A coleta foi feita em profundidade de 0-20cm. Após a coleta as amostras foram secas a temperatura ambiente, destorradadas e limpas da presença de raízes. Para obtenção de uma amostra composta foram misturados os três subpontos coletados em cada ponto (ARRUDA; MOREIRA; PEREIRA, 2014). A granulometria uniforme foi obtida após a passagem das amostras por uma peneira de 500 microns. Na determinação do teor de umidade, as amostras foram pesadas em cadinhos e transferidas para estufa por 24 horas a 105°C. Após esfriar, foi feita uma nova pesagem (EMBRAPA, 1979). A determinação do pH foi realizada a partir de uma suspensão, preparada a partir de 10g de amostra e 25 mL de solução de KCl a 1,0 mol.L⁻¹. Decorrido uma hora em repouso, o eletrodo foi imerso na suspensão de solo e a medida realizada (EMBRAPA, 1979). A determinação da matéria orgânica (MOS) foi realizada via oxidação por via úmida, onde adicionou-se 10 mL de solução digestora (dicromato de sódio em meio sulfúrico) em 1,0 cm³ de solo e após agitação. Em seguida adicionou-se 50 mL de água e deixando em repouso por 20 horas. Passado esse período, utilizou-se o espectrofotômetro UV/Vis para a leitura do sobrenadante (SATO, 2013). A Tabela 1 apresenta os resultados obtidos para a caracterização realizada. O solo do lixão é constantemente compactado. Esse processo depende da umidade do solo. As amostras analisadas revelam grande capacidade de compactação (KONDO e DIAS JUNIOR, 1999).

TABELA 1. Resultados obtidos na caracterização.

| Amostra | Umidade (Kg.Kg ⁻¹) | pH | MOS (g/dm ³) |
|---------|--------------------------------|------|--------------------------|
| P1 | 2,28 | 6,22 | 18,8 |
| P2 | 3,04 | 6,72 | 10 |
| P3 | 2,13 | 5,45 | 14,60 |
| P4 | 2,03 | 6,72 | 18,60 |
| P5 | 3,25 | 6,83 | 12,10 |

O solo apresentou caráter de pouco ácido em todos os pontos avaliados. A exceção foi o ponto referente a amostra P3 (ácido) (MEURER, 2007). O solo apresentou valores elevados de matéria orgânica. Este resultado já era previsto. O teor MOS presente está relacionado ao acúmulo de material orgânico (MEDEIROS et al, 2008.) em decomposição

ABRELPE. Associação Brasileira das Empresas de Limpeza Pública e Resíduos. Disponível em: <http://http://abrelpe.org.br/>. Acesso em: 10 fev. 2019.

ARRUDA, M. R. de; MOREIRA, A.; PEREIRA, J. C. R. **Amostragem e cuidados na coleta de solo para fins de fertilidade**. Manaus/AM: Embrapa Amazônia Ocidental, 2014.

BRASIL. Câmara dos Deputados. **Política Nacional dos Resíduos Sólidos**, Brasília, DF, 2012.

CAMPUS, H. K. T. Recycling in Brazil: Challenges and prospects. Resources, Conservation and Recycling, v. 85, p. 130-138, 2014.

EMBRAPA. Serviço Nacional de Levantamento e Conservação de Solos (Rio de Janeiro, RJ). **Manual de métodos de análise de solo**. Rio de Janeiro, 1979. 1v.

LIMA, P. M.; COLVERO, D. A.; GOMES, A. P.; WENZEL, H.; SCHALCH.; CIMPAN, C. **Environmental assessment of existing and alternative options for management of municipal solid waste in Brazil**. Waste Management, v. 78, p. 857-870, 2018.

KONDO, M. K.; DIAS JÚNIOR, M.S. Compressibilidade de três latossolos em função da umidade e uso. Revista Brasileira da Ciência do Solo, v. 23, p. 211-218, 1999.

MEDEIROS, G. A.; REIS, A. G. V.; SIMONETTI, F. D.; BATISTA, G.; MONTEIRO, T.; CAMARGO, V.; DOS SANTOS, L. F. S.; RIBEIRO, L. F. M. **Diagnóstico da qualidade da água e do solo no lixão de Engenho Coelho, no Estado de São Paulo**. Engenharia Ambiental, v. 5, n. 2, p. 169-186, 2008.

MEURER, E. J. Fatores que influenciam o crescimento e o desenvolvimento das plantas. In: NOVAIS, R. F.; ALVEREZ V., V. H.; BARROS, N. F. de; FONTES, R. L. F.; CANTURUTTI, R. B.; NEVES, J. C. L. (Ed.) Fertilidade do solo. Viçosa, MG: Sociedade Brasileira de Ciência do Solo, 2007. Cap. 2.

SATO, J. H. **Métodos para determinação do carbono orgânico em solos do cerrado**. Dissertação (Mestrado em agronomia) - Faculdade de Agronomia e Medicina Veterinária, Universidade de Brasília, Brasília, Distrito Federal, 2013.

Agradecimentos/Acknowledgments

Ao Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia Goiano, Campus Ceres.

Área: MED

Nº de Inscrição: 01342

New antitumor prototypes developed as inhibitors of phosphatidylinositol-3-kinase (PI3K)

Bruna S. Moita (IC),¹ Thalita N. de Melo (IC),^{1*} João L.S Avelar (IC),¹ Caroline M. X Costa (IC),¹ Isabel Porto-Carreiro (PQ),¹ Eduardo Reina (PQ),¹ Eliezer J. Barreiro (PQ),¹ Lídia M. Lima (PQ)¹

bruna.simoemoita@gmail.com; thalita.melo@hotmail.com

¹ LASSBio. Laboratório de Avaliação e Síntese de Substâncias Bioativas. Instituto de Ciências Biomédicas (ICB-UFRJ).

Key-Words: Phosphatidylinositol-3-kinase, cancer, PI3K inhibitors, synthesis, drug design

Highlights

New gedatolisib analogues were designed and synthesized. Their comparative druglikeness profile and aqueous solubility were determined. Ongoing studies are being conducted to establish the comparison between the cytotoxic potency among gedatolisib and the new analogues.

Abstract

Cancer is a major problem of public health worldwide, with increasing incidence, serious socio-economic damage and high mortality rate. By the year 2035, the World Health Organization projects 24 million new cases of cancer and 14.5 million annual deaths related to the disease.¹ Among the chemotherapy to treat cancer, those based on directed target drugs constitute the main innovation in the area. Phosphatidylinositol-3-kinase (PI3K) has been highlighted among the molecular targets for anti-cancer drug design and discovery, due its crucial role in the development of solid tumors and blood cancers.² Since 2014, PI3K is considered a validated target for cancer chemotherapy based on the FDA approval of the drugs idelalisib and copanlisib to treat different types of lymphomas, acting by PI3K inhibition. More recently, gedatolisib, also known as PKI587, was discovered as a new dual inhibitor of PI3K/mTOR pathways. This dual mechanism of action confers to gedatolisib a broad spectrum of action, being effective against solid tumors and haematological cancers.³ Therefore, the goals of this study were the design and the synthesis of new gedatolisib structural analogues, aiming to compare their druglikeness properties, aqueous solubility and their cytotoxic effect on tumor cell lines that over-express the PI3K protein.

The new PI3K inhibitor candidates have been designed from molecular modifications proposed in the structure of gedatolisib. These modifications were based on molecular simplification and bioisosterism strategies. Then, the new gedatolisib analogues were synthesized, using a linear synthesis process in three steps, employing the cyanuric chloride (2,4,6-trichloro-1,3,5-triazine) as starting material. Six new analogues were synthesized, and they were obtained in 45-68% overall yield. Their chemical structure was confirmed by nuclear magnetic resonance (NMR), infrared (IR) and high-resolution mass spectrometry (HRMS) techniques. The purity of the new analogues were determined by differential scanning calorimetry (DSC) and high performance liquid chromatography (HPLC), revealing grade of purity in the range of 95.4-99.9%. The aqueous solubility (at pH = 7.4) was determined by ultraviolet - visible spectroscopy (UV/Vis).⁴ The results indicated that the compounds can be divided into two groups; those having low aqueous solubility (0.51-6.03 μM) and those having moderate solubility (i.e. > 10 μM). At the moment, the synthesized compounds are being studied to determine the comparative cytotoxic potency between them and gedatolisib against human breast cancer cell line (i.e. MCF-7), using the MTT methodology.

¹www.cancer.gov/ ²Venkatesan et. al. *J. Med. Chem.* **2010**, 53, 2636–2645. ³Zhao et. al. *Med. Chem. Res.* **2014**, 23, 5188–5196. ⁴Schneider P, et. al. *Phytochem lett.* **2009**, 2 85-87.

Acknowledgments

INCT-INOVAR, PIBIC-UFRJ, FAPERJ, CNPq, CAPES

Área: ANA

Nº de Inscrição: 01343

Otimização de método analítico para a determinação de clorpirifós em alfaces comercializados no município de Seropédica - RJ

Diego da P. Alves (IC),¹ Durval R. Mariano Junior (PG),² Vanessa G. K. Almeida (PQ)²
diegoalvesufrj@gmail.com

¹Instituto de Agronomia, UFRRJ; ²Instituto de Química, UFRRJ

Palavras Chave: Clorpirifós, Agroquímico, Alface, HPLC.

Highlights

Optimization of analytical method for the determination of chlorpyrifos in lettuces marketed in the municipality of Seropédica – RJ. Chlorpyrifos is a toxic and environmentally harmful class II pesticide.

Resumo/Abstract

Clorpirifós é nome comum do químico [0,0-dietil-0-(3,5,6-tricloro-piridil)-fósforo-tionato], um defensivo agrícola organofosforado de classe II, ou seja, é altamente tóxico e prejudicial ao meio ambiente. Tem como alvo insetos, sendo eficaz no combate a vários deles; porém, seu uso agrícola está autorizado principalmente para o controle de formigas em diferentes culturas. Para a saúde humana, o clorpirifós coloca em risco o funcionamento da enzima colinesterase, inibindo-a, causando síndrome colinérgica, sendo classificado como neurotóxico. Por esse motivo, é importante determinar a presença de traços desse agroquímico nos vegetais, como uma forma de alertar o uso excessivo do mesmo, tendo em vista que os resíduos podem ser prejudiciais à saúde humana. Nesse trabalho são apresentados estudos sobre a extração do agroquímico de folhas de alface coletadas em hortifrúteis e feiras livres do município de Seropédica, Rio de Janeiro, utilizando diclorometano. Foram avaliados também as melhores condições para análise do clorpirifós em HPLC, tendo utilizado como fase móvel metanol e ácido acético 0,02% 90:10, com temperatura de 35°C, injeção de 50µL, fluxo de 1mL/min e detecção em 290nm. A figura 1 apresenta o cromatograma do padrão de clorpirifós nessas condições analíticas. O Método apresenta linearidade entre 24,0mg/L e 240mg/L, apresentado na curva de calibração como mostra a figura 2.

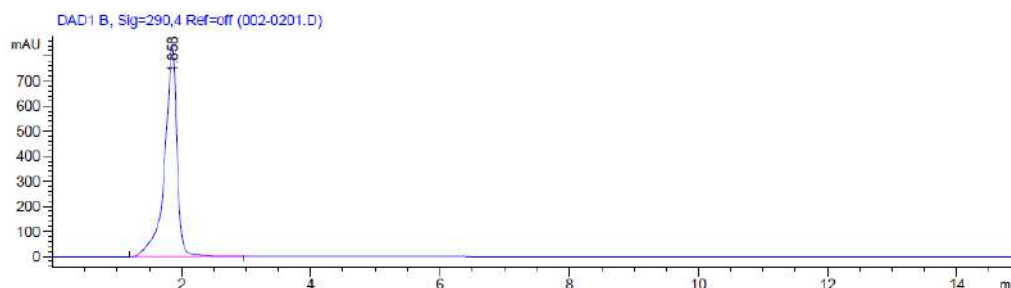


Figura 1: Clorpirifós 240 (mg/L)

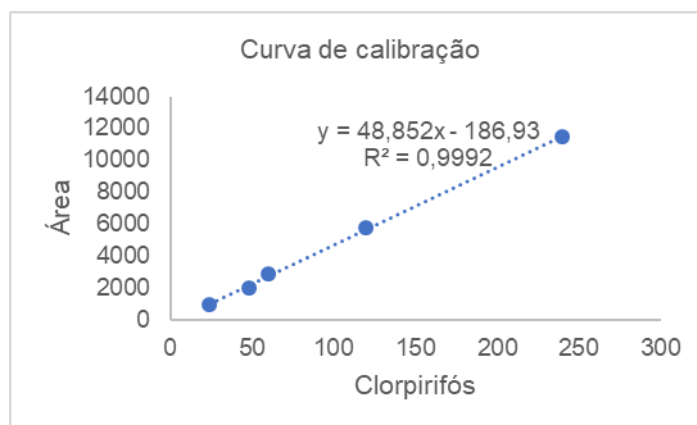


Figura 2: Curva de calibração

Área: ORG

Nº de Inscrição: 01344

Theoretical Studies of Conformational Equilibrium for Chalcones Nitro Substituted

Hualace V. Emiliano (PG),* Thiago C. Rozada (PQ), Barbara C. Fiorin (PQ).

e-mail: hualaceemiliano@gmail.com

Department of Chemistry, Ponta Grossa State University, Ponta Grossa, PR.

Keywords: Chalcones, Conformational Analysis, Theoretical Calculations, NBO.

Highlights

Chalcones are natural products and synthetic analogues has been extensively studied for exhibiting diverse biological activities, such as antimicrobial, antimalarial, anti-inflammatory, among others.¹ Conformational studies are performed computationally to investigate the stereoelectronic factors that influence their properties.² These can generate an understanding of how the addition of different substituent at the aromatic rings of chalcones can affect their chemical behavior and consequently biological activity.

Abstract

Two chalcones, 2' and 3'-nitro-4-hidroxy-3-metoxychalcones (*o*-Chal and *m*-Chal, respectively) were submitted to theoretical calculations using the GAUSSIAN 09 program package and the NBO 5.9 module for calculations involving the natural bonding orbital theory (Figure 1). The selection of more stable conformers was made through energy surface calculations as a function of the dihedral angles employing the HF/6-31G theory level. All the minimum energy structures were optimized at M06-2X/6-311++G(2d,dp) level. Frequency calculations were also performed to characterized structures as a minimum and to obtain the zero point energy correction. Through conformational analysis, three *s-cis* and two *s-trans* conformations were obtained for *o*-nitrochalcone. The equilibrium population can be understand through the stabilizing orbital interactions involving the conjugated system. Steric repulsion and the proximity of nitro and carbonyl group prevent a greater planarity of the π -orbitals system for the *s-cis* conformer, raising the population of *s-trans* (Table 1).

Table 1 - Relative energy parameters and sum of orbital interactions and their populations of conformers, calculated at M06-2X/6-311++G(2d,dp) level.

| | ΔE (kcal/mol) | Population (%) | Sum of orbital interactions |
|---------------------------------------|--------------------------|-------------------|--------------------------------|
| <i>o</i> -Chal-M1(<i>s-cis</i>) | 1.04 | 7.2 | 904.81 |
| <i>o</i> -Chal-M2(<i>s-cis</i>) | 2,09 | 1.2 | 905.24 |
| <i>o</i> -Chal-M4(<i>s-cis</i>) | 0.00 | 41.5 | 899.75 |
| <i>o</i> -Chal-M5(<i>s-trans</i>) | 0.38 | 21.9 | 890.38 |
| <i>o</i> -Chal-M6(<i>s-trans</i>) | 0.23 | 28.2 | 896.14 |
| <i>m</i> -Chal-M1.1(<i>s-cis</i>) | 1.05 | 9.7 | 913.84 |
| <i>m</i> -Chal-M1.2(<i>s-cis</i>) | 0.00 | 57.1 | 929.44 |
| <i>m</i> -Chal-M2.1(<i>s-trans</i>) | 1.72 | 3.1 | 906.94 |
| <i>m</i> -Chal-M2.2(<i>s-trans</i>) | 1.72 | 3.1 | 918.80 |
| <i>m</i> -Chal-M2.3(<i>s-trans</i>) | 1.20 | 7.5 | 922.05 |
| <i>m</i> -Chal-M4.2(<i>s-cis</i>) | 1.50 | 9.7 | 926.70 |
| <i>m</i> -Chal-M4.3(<i>s-cis</i>) | 1.50 | 9.7 | 926.66 |

For *m*-nitrochalcone were observed four *s-cis* and three *s-trans* conformations, with *s-cis* being the more stable *s-trans* conformers showed smaller sum of orbital interactions because a steric interaction between an aromatic hydrogen and α hydrogen increased the dihedral angle O=C-C-C_B in these conformations, giving a smaller orbital overlap π - π^* . Thus explaining the largest population of *s-cis* for *m*-nitrochalcone.

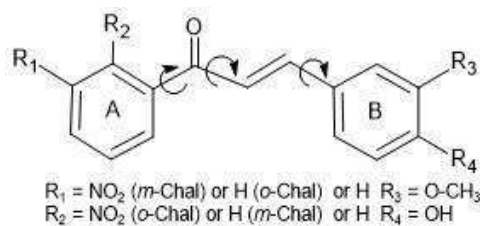
It was verified that the *s-cis* conformation was predominant for *m*-nitrochalcone, while to *o*-nitrochalcone the overlap of the π and π^* orbitals of the carbonyl and ring A was diminished for *s-cis*. That reflected in a smaller difference in energy between *s-cis* and *s-trans* conformations.

References

¹ LAHSASNI, S. A.; AL KORBI, F. H.; ALJABER, N. A. Synthesis, characterization and evaluation of antioxidant activities of some novel chalcones analogues. Chemistry Central Journal, n.1, v. 8, p. 1-10, 2014.

² WEINHOLD, F.; LANDIS, C. R.; GLENDENING, E. D. What is NBO analysis and how is it useful? International Reviews in Physical Chemistry, n. 35, v. 3, p. 399-440, 2016.

Figure 1 – Structure of Chalcones



Acknowledgments

Fundação Araucária, Capes, C-LABMU, LESCAM.

Porphyrins as Photoredox Catalysts in Photoarylation Reactions of Coumarins

Lucas F. Vilela (IC),^{1*} Aline A. N. de Souza (PG),¹ Timothy J. Brocksom (PQ),¹ Kleber T. de Oliveira (PQ).^{1*}

* kleber.oliveira@ufscar.br

¹ Departamento de Química, Universidade Federal de São Carlos, UFSCar, São Carlos – SP, 13565-905, Brazil

Keywords: Photocatalysis, Porphyrins, Coumarins, Arylations, Natural Products Synthesis

Highlights

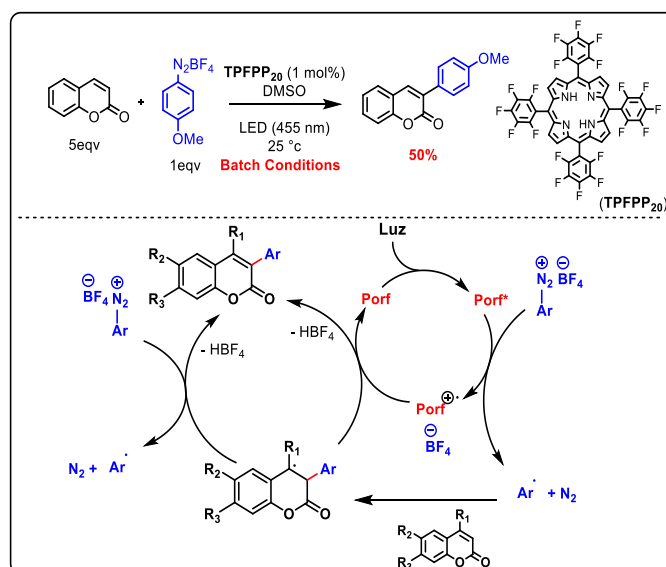
Photoarylation reactions of coumarins with aryldiazonium salts have been investigated using tetra-(pentafluorophenyl)-porphyrin (TPFPP₂₀) as SET photocatalyst and visible light in the process.

Introduction

In recent years, C–H (sp²) functionalizations by photoarylation reactions of heteroarenes have gained importance in methodology studies due to their application in active pharmaceutical ingredient (API) and natural products syntheses.^{1,2} Frequently, expensive metal complexes (Ru, Ir) are used to carry out photoarylation processes. An alternative to these complexes are organic dyes for generation of radicals via single electron transfer – SET. Selected organic dyes present photocatalytic properties which can cover those performed by metal-photocatalysts, being more efficient and cost-competitive. Porphyrin derivatives are examples of such dyes, which have already been evaluated in our research group as photocatalysts for aryl radical generation starting from arenediazonium salts.³

Results and Discussion

Herein, we present initial studies on the use of porphyrins as photoredox catalysts in photoarylation reactions of coumarins. In our preliminary studies *p*-methoxyarenediazonium salt (1 equiv) and coumarin (5-10 equiv) were reacted in the presence of TPFPP₂₀ (1 mol%) and DMSO using blue LEDs (28, 60 and 120 W), during different reaction times (8-17h). For instance, we have achieved the best reaction LED conditions using 5 equiv of coumarin, 28W (blue LEDs) for 17h, giving the arylated coumarin in 50% yield (Scheme 1). Other parameters are under evaluation for optimization the scope and future applications in the synthesis of natural products such as coumestans are also planned.



Scheme 1- Reaction scheme and proposed photocatalytic cycle.

[1] - Sheng, J.; Xu, T.; Zhang, E.; Zhang, X.; Wei, W. Zou, Y. *J. Nat. Prod.* **2016**, *79*, 2749–2753.

[2] - Cheng, C.; Chen, W. W.; Xua, B; Xu, M-H *Org. Chem. Front.* **2016**, *3*, 1111.

[3] - De Souza, A. A. N.; Silva, N. S.; Müller, A. V.; Polo, A. S.; Brocksom, T. J.; De Oliveira, K. T. *J. Org. Chem.* **2018**, *83*, 15077–15086.

Acknowledgments

FAPESP (2018/ 00106-7, 2018/14624-0), CNPq and CAPES.

Porphyrins as Photoredox Catalysts in Csp²-H Arylations: Batch and Continuous Flow Approaches

Aline A. N. de Souza (PG),¹ **Nathalia S. Silva (IC),¹** Andressa V. Müller (PG),² André S. Polo (PQ),² Timothy J. Brocksom (PQ),^{1,2} Kleber T. de Oliveira (PQ).^{1*}

* kleber.oliveira@ufscar.br

¹ Departamento de Química, Universidade Federal de São Carlos, UFSCar, São Carlos – SP, 13565-905, Brazil

² Centro de Ciências Naturais e Humanas, Universidade Federal do ABC, Santo André – SP, 09210-580, Brazil

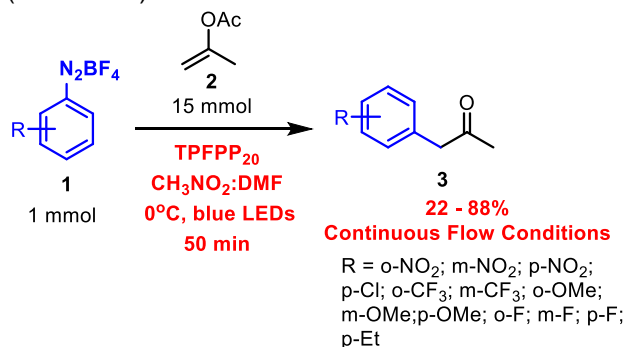
Keywords: Radical photoredox reactions, porphyrins, continuous flow conditions.

Highlights

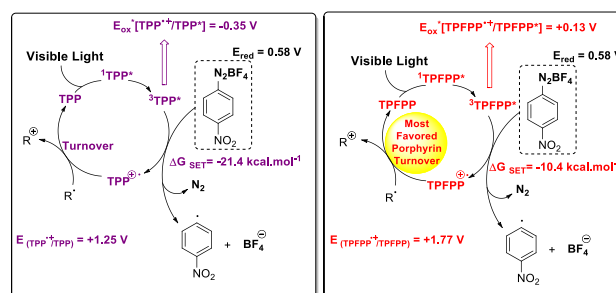
Photocatalyzed arylation reactions of enol-acetates with arenediazonium salts were investigated in both batch and in continuous flow conditions using porphyrins as SET photocatalysts. Mechanistic insights are presented.

Abstract

Photocatalyzed C–H (sp²) arylation reactions have gained importance in methodology studies as well as for natural products and active pharmaceutical ingredient (API) syntheses due to the improvements delivered by mild conditions.^{1,2} Ruthenium and iridium photocatalysts have been mostly used to perform these reactions, starting from iodonium and arenediazonium salts as the aryl radical source.³ However, the high cost and molar charge of these photocatalysts are not competitive, and make this chemistry unattractive for scale up applications. Additional limitations of these photocatalyzed reactions are safety and efficiency of the batch conditions, since the diazonium salts are potentially explosive, especially on a multigram scale. In this case application of continuous flow technology⁴ can cover these and other issues allowing significant improvements in the protocols. Herein, we have investigated both batch and continuous flow photoarylation reactions of enol-acetates to yield different α -arylated ketones using a variety of arenediazonium salts as the aryl-radical source (Scheme 1).⁵



Scheme 1



Scheme 2

Two different porphyrins were evaluated as SET photocatalysts, and photophysical/electrochemical studies were performed to rationalize the photoredox properties. Surprisingly, the more electron-deficient porphyrin (meso-tetra(pentafluorophenyl)porphyrin – TPFPP₂₀) shows the best photoactivity as electron donor in the triplet excited state, besides its less favorable potential compared to meso-tetraphenylporphyrin -TPP. These properties can be explained by the more favorable porphyrin turnover of TPFPP₂₀ in the photocatalytic cycle (Scheme 2).

[1] Ghosh, I.; Marzo, L.; Das, A.; Shaikh, R.; König, B. *Acc. Chem. Res.* **2016**, *49*, 1566-1577.

[2] Romero, N. A.; Nicewicz, D. A. *Chem. Rev.* **2016**, *116*, 10075–10166.

[3] Noël, T. *Chem. Rev.* **2016**, *116*, 10276-10341.

[4] Souza, J. M.; Galaverna, R.; De Souza, A. A. N.; Brocksom, T. J.; Pastre, J. C.; Souza, R. O. M. A.; Oliveira, K. T. *An. Acad. Bras. Cienc.* **2018**, *90*, 1131-1174.

[5] De Souza, A. A. N.; Silva, N. S.; Müller, A. V.; Polo, A. S.; Brocksom, T. J.; De Oliveira, K. T. *J. Org. Chem.* **2018**, *83*, 15077–15086.

Acknowledgments

FAPESP (2018/ 00106-7), CNPq and CAPES

Relação entre o pH e a Matéria Orgânica do Solo (MOS) em amostras de solos

Jozemir M. dos Santos (PQ),¹ Nikaele S. Moreira (PG).^{2*}

jozemir.santos@ifgoiano.edu.br; nikaele_sousa@hotmail.com

¹ Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia Goiano, Campus Ceres; ² Universidade Federal de Goiás – Campus Samambaia.

Palavras Chave: Solo, Matéria Orgânica, pH.

Highlights

RELATIONSHIP BETWEEN pH AND SOIL ORGANIC MATTER (MOS) IN SOIL SAMPLES: Soil samples that show chemical similarity according to Principal Component Analysis (PCA) that the higher the pH value, the higher the soil organic matter content (MOS).

Resumo/Abstract

A Matéria Orgânica do Solo (MOS) é um importante indicador da fertilidade do solo, pois dispõe da capacidade de influenciar no pH do solo, na aeração, permeabilidade, retenção de água no solo, e em outros atributos do solo, e como resultado pode afetar de forma direta ou indireta o desenvolvimento das plantas.¹ Nesse contexto o presente trabalho apresenta a relação encontrada entre a MOS e pH em amostras de solo. Foi realizada a determinação: do teor da MOS ($\text{g}\cdot\text{dm}^{-3}$) pelo método colorimétrico com da oxidação da matéria orgânica via úmida com o $\text{Na}_2\text{Cr}_2\text{O}_7\cdot 2\text{H}_2\text{O}$ em meio H_2SO_4 fundamentada no método de Walkley e Black modificado; e do pH empregando um eletrodo combinado de Ag/AgCl imerso em suspensão solo: líquido na proporção 1:2,5 (m/v).² Por meio dos agrupamentos 1 e 2 formados no gráfico de scores da PCA da região identidade (4000 a 3000 cm^{-1}) dos espectros das 22 amostras de solos analisadas (Figura 1), que foram obtidos empregando o Espectrômetro de Infravermelho com Transformada de Fourier (FTIR), que indicam a existência de similaridade química entre as amostras constituintes de cada agrupamento,³ e mediante análise do teor de MOS e do pH das amostras, foi possível observar uma correlação linear positiva entre a MOS e o pH, de modo que quanto maior o teor de MOS maior foi o valor de pH encontrado, conforme apresentado na Figura 17 (A) e (B). Analisando os coeficientes de correlação (r) gerado na regressão mostrada na Figura 17 (A) e (B) de 0,916 e de 0,909, respectivamente, pode-se confirmar a correlação linear positiva retrocitada, dado que os valores de r são próximo de +1, significando uma correlação linear positiva perfeita.⁴ Os coeficientes de determinação (R^2) encontrados de 0,758 e 0,805 nas amostras do agrupamento 1 e 2, respectivamente, indicam que MOS pode explicar o pH com boa proporção, já que quanto mais próximo de 1 melhor é o grau de explicação da equação da reta.

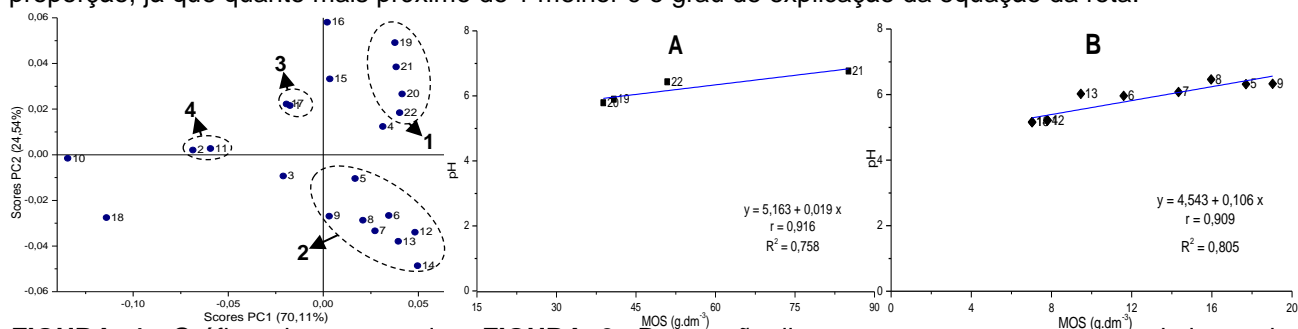


FIGURA 1. Gráfico de scores da PCA da região identidade.

FIGURA 2. Regressão linear com as amostras constituintes do agrupamento 1 (A) e do agrupamento 2 (B).

¹ Novais, R. F. et al. (Ed.) Fertilidade do solo. Viçosa, MG: Sociedade Brasileira de Ciência do Solo, 2007.

² Teixeira, P. C. et al. (Ed.) Manual de métodos de análise de solo. 3. ed. revista e ampliada, Brasília, DF: Embrapa, 2017.

³ Ferreira, M. M. C. Quimiometria: conceitos, métodos e aplicações. São Paulo: Editora da UNICAMP, 2015.

⁴ Costa Neto, P. L. de O. Estatística. 3 ed. São Paulo: Blucher, 2002.

Agradecimentos/Acknowledgments

Ao Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia Goiano, Campus Ceres.

Synthesis and Characterization of New Photoactive Columnar Liquid Crystals Containing Two Electronically Distinct Parts

Welisson de P. Silva (PG),¹ Edivandro Girotto (PQ),² Hugo Gallardo (PQ),² Rodrigo Cristiano (PQ).^{1*}

welissonpontes@hotmail.com; rodrigoqmc@gmail.com

¹Departamento de Química, UFPB; ²Departamento de Química, UFSC.

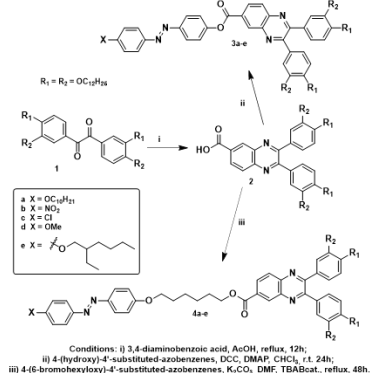
Palavras Chave: (Liquid crystal, Quinoxaline, Azobenzene, Photoisomerization).

Highlights

- New LCs based on quinoxaline and azobenzene.
- Photoisomerization studies performed in solution and mesophase.
- Incorporation of the azo unit gave an efficient optical switch of the LC phase.

Resumo/Abstract

Here in, we present the synthesis and characterization of new photoactive liquid crystals (LCs) based on the optical/thermal E/Z switch of the azo group inserted in a 4,4'-disubstituted azobenzene with polar or apolar groups at one end and an alkyl chain with 6 carbons as spacer group (**4a-e**) (or without spacer group (**3a-e**)) at the other end (scheme 1). The insertion of the quinoxaline group may influence as well in liquid crystalline behavior as fluorescent properties [1]. The incorporation of the azo group can be used for creating an optical switch of the mesophase [2]. Mesomorphic properties were studied by polarizing optical microscopy (POM) and differential scanning calorimetry (DSC). The compounds **3a-e** and **4a-e** exhibited columnar hexagonal phases arranged in two and three molecules for a unit of disk, respectively, that was confirmed by XRD. Optical studies were performed in CHCl₃ solution. All compounds exhibited an intense absorption band around 380 nm, attributed to the π - π^* transitions of the *E*-isomer. After UV irradiation for different times to register the spectra these absorbance bands were drastically decreased while the small shoulders at 460 nm, attributed to the n - π^* of the *Z*-isomer increase (figure 1). The photoisomerization was also observed at the temperature range of the mesophase by POM and XRD (figure 2).



Scheme 1

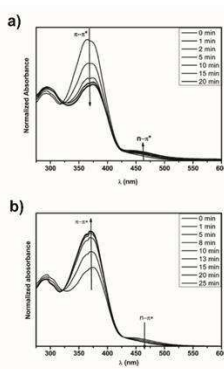


Figure 1

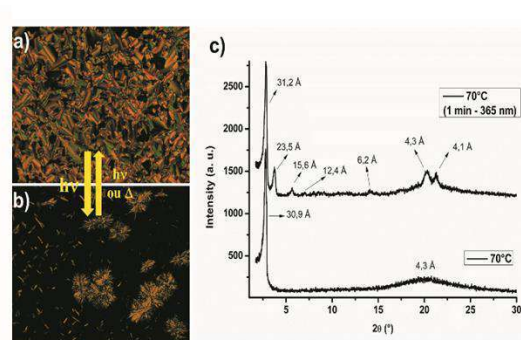


Figure 2

Scheme 1: Synthesis of final molecules **3a-e** and **4a-e**. **Figure 1:** Photoisomerization study of compound **4a** in chloroform solution 1×10^{-5} mol.L⁻¹. a) UV-Vis spectra at different times of exposition at UV light (365 nm) of the solution containing the sample; b) UV-Vis spectra at different times keeping the solution containing the sample in the dark. **Figure 2:** Photoisomerization studies in the mesophase for compound **3c**. a) optical texture by POM on cooling at 70 °C; b) optical texture by POM on cooling at 70 °C after irradiation at 365 nm with UV light for 15 minutes; c) XRD difratograms at 70 °C for compound **3c** with (top) and without (below) UV light (365 nm) irradiation for 1 minute (induction of crystallization of the sample after UV light (365 nm) irradiation is seen).

[1] SZYDLOWSKA, J; Et al. M. J. Mater. Chemi. 1, 6883-6889 (2013). [2] BISOYI, H. K.; LI, Q. Chem. Rev., 105, 4148-4204 (2016).

Agradecimentos/Acknowledgments

CNPQ, CAPES-PROCAD, UFPB, UFSC.

42ª Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química: Eixos Mobilizadores em Química

Área: ORG

Nº de Inscrição: 01350

Estudo visando às sínteses de antraquinonas de origem natural empregando química de benzeno sob condições brandas

Givago P. Percim (PG),¹ Cristiano Raminelli (PQ).^{1*}

givagopercim@gmail.com; raminelli@unifesp.br

¹Instituto de Ciências Ambientais, Químicas e Farmacêuticas, Universidade Federal de São Paulo, Diadema, SP, Brasil

Palavras Chave: Morindaparvina A, 1,2-Dimetoxiantraquinona, 1-Metoxiantraquinona, Química de benzeno.

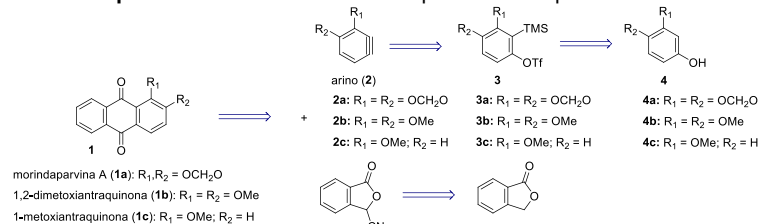
Highlights

Study toward the syntheses of anthraquinones of natural origin employing benzyne chemistry under mild conditions. Syntheses of anthraquinones with antitumor potential have been accomplished. Synthetic approach involving benzyne chemistry has provided anthraquinones.

Resumo/Abstract

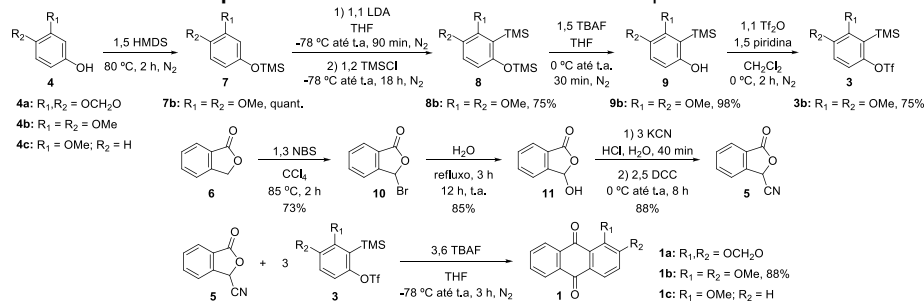
A química de benzeno tem encontrado aplicações em química orgânica, incluindo sínteses totais de produtos naturais e preparações de materiais funcionais.¹ Neste contexto, pretendemos realizar as sínteses das antraquinonas morindaparvina A (**1a**), que apresenta atividade antitumoral significativa,² bem como de antraquinonas derivadas, ou seja, 1,2-dimetoxiantraquinona (**1b**) e 1-metoxiantraquinona (**1c**), empregando nas etapas chaves das sínteses transformações entre 3-cianoftalida (**5**) e 2-(trimetilsilil)aril trifluorometanossulfonatos (**3**), na presença de uma fonte de íons fluoreto, conforme delineado na análise retrossintética apresentada no **Esquema 1**.

Esquema 1. Análise retrossintética para as antraquinonas **1a-c**.



Iniciamos as sínteses das antraquinonas **1a-c** convertendo ftalida (**6**) em 3-cianoftalida (**5**), por meio de transformações que apresentaram rendimentos entre 73% e 88%.³ Na sequência, realizamos uma extensa otimização da reação entre 3-cianoftalida (**5**) e 2-(trimetilsilil)fenil triflato (**3d**: R₁ = R₂ = H), disponível comercialmente, obtendo antraquinona (**1d**: R₁ = R₂ = H) em 96% de rendimento isolado. Em seguida, preparamos o sililaril triflato **3b** através de rota reportada na literatura,^{1b} o qual foi empregado com sucesso na síntese de 1,2-dimetoxiantraquinona (**1b**) (**Esquema 2**).

Esquema 2. Rota visando às sínteses das antraquinonas **1a-c**.



1. (a) Li, J.; Zhao, Y.; Lu, J.; Li, G.; Zhang, J.; Zhao, Y.; Sun, X.; Zhang, Q. *J. Org. Chem.* **2015**, *80*, 109. (b) Muraca, A. C. A.; Percim, G. P.; Rodrigues, A.; Raminelli, C. *Synthesis* **2017**, *49*, 3546.

2. (a) Chang, P.; Lee, K. H.; Shingu, T.; Hirayama, T.; Hall, I. H.; Huang, H. C. *J. Nat. Prod.* **1982**, *45*, 206. (b) Khanapure, S. P.; Biehl, E. R. *J. Nat. Prod.* **1989**, *52*, 1357.

3. (a) Mal, D.; Roy, J. *Org. Biomol. Chem.* **2015**, *13*, 6344. (b) Qiang, X.; Li, Y.; Yang, X.; Luo, L.; Xu, R.; Zheng, Y.; Cao, Z.; Tan, Z.; Deng, Y. *Bioorg. Med. Chem. Lett.* **2017**, *27*, 718. (c) Russell, R. A.; Pilley, B. A.; Warrenner, R. N. *Synth. Commun.* **1986**, *16*, 425.

Agradecimentos/Acknowledgments

À FAPESP e ao CNPq pelo suporte financeiro. G.P.P. agradece à CAPES pela bolsa de doutorado.

42ª Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química: Eixos Mobilizadores em Química

Área: MAT

Nº de Inscrição: 01351

Multicolor Emission through Bi-directional Energy Transfer in Nd³⁺-Sensitized Gd³⁺-based Core/Shell/Shell Upconverting Nanoparticles

York E. Serge Correales (PG),¹ Chanchal Hazra (PG),^{1*} Sajjad Ullah (PG),^{1,2} Laís R. Lima (PG),¹ Sidney J. L. Ribeiro (PQ).^{1*}

yorkstewins@hotmail.com; chanchalhazra007@gmail.com; sjlribeiro@gmail.com

¹Institute of Chemistry, São Paulo State University, UNESP, 14800-060, Araraquara, SP, Brazil; ²Institute of Chemical Sciences, University of Peshawar, 25120, Peshawar, Pakistan

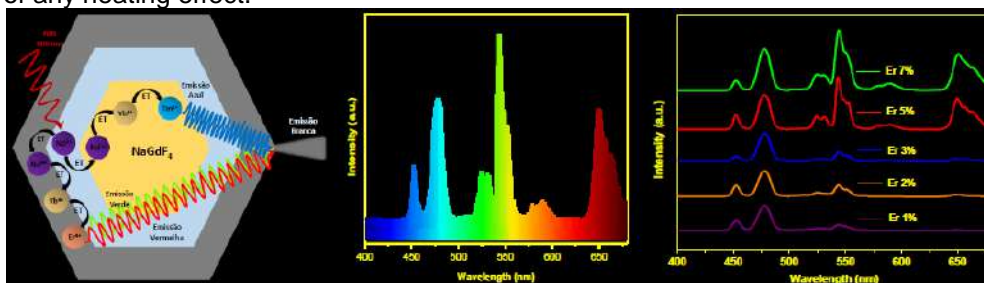
Keywords: Upconverting Nanoparticles; Lanthanides, Energy Transfer, Multicolor Emission.

Highlights

Upconverting nanoparticles with multicolor tunable emission under 808 nm laser excitation of Nd³⁺ ions and bidirectional energy transfer core(Tm³⁺←Yb³⁺)←middle-shell(Nd³⁺)→outermost-shell(Yb³⁺→Er³⁺).

Abstract

Lanthanide (Ln³⁺)-doped upconverting nanoparticles (UCNPs) are paid an innumerable attention as they possess prominent advantages such as high spatial emission resolution, deep tissue penetration of near-infrared (NIR) excitation light, reduced light scattering and low autofluorescence background signal, among others. In recent years, Ln³⁺-doped UCNPs have attracted a great deal of research interest due their wide range of applications in solar cells, security inks, biosensing, clinical applications, bioimaging (both *in vitro* and *in vivo*), for instance.¹ Multicolor upconversion luminescence (UCL) under conventional single near infrared wavelength excitation at ~ 980 nm, allowing them to enrich these motivations. However, the 980 nm laser, generally applied to trigger the Yb³⁺-sensitized upconversion processes is strongly absorbed by water molecules in biological structures and could cause severe overheating effects that damage cells and tissues.² Regarding this problem, it is essential to shift the excitation wavelength to a shorter wavelength where the absorption of water molecules is greatly reduced. Moreover, in UCNPs, the energy transfer in bidirectional manner is more important over unidirectional as the later induces detrimental cross-relaxation between the activator ions, leading to poor UCL from UCNPs.³ In this work, we have shown the tailoring in multicolor UCL from a Nd³⁺-sensitized Gd³⁺-based core/shell/shell UCNPs of NaGdF₄:Tm³⁺(0.75)/Yb³⁺(40)/Ca²⁺(7)/Nd³⁺(1)@NaGdF₄:Ca²⁺(7)/Nd³⁺(30)@NaGdF₄:Yb³⁺(40)/Ca²⁺(7)/Nd³⁺(1)/Er³⁺(X = 1,2,3,5,7) that can be excited at single wavelength of ~ 808 nm without generation of any local heating. Incorporation of substantial Nd³⁺-sensitizers with proper concentration in the middle shell domain allows efficient harvesting of excitation light which migrates bidirectional across the core/shell interfaces in sync to produce blue emission from Tm³⁺ (activator) ions in the core as well as green and red emission from Er³⁺ (activator) ions in the outermost shell layer. By simple and precise tuning, the content of Ln³⁺ ions in each domain, a multicolor UCL can be produced, ranging from blue to white. We envision that our Nd³⁺-sensitized multicolor UCNPs are potential for a variety of multiplexed biological applications, without impediment of any heating effect.



References: 1. Zhang, Y.; Yu, Z.; Li, J.; Ao, Y.; Xue, J.; Zeng, Z.; Yang, X.; Tan, T. T. Y. *ACS Nano* **2017**, *11*, 2846-2857.

2. Wang, Y. F.; Liu, G. Y.; Sun, L. D.; Xiao, J. W.; Zhou, J. C.; Yan, C. H. *ACS Nano* **2013**, *7*, 7200-7206.

3. Duo, Q.; Idris, N. M.; Zhang, Y. *Biomaterials* **2013**, *34*, 1722-1731.

Acknowledgments

FAPESP, CNPq, CAPES and IQ-UNESP

42ª Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química: Eixos Mobilizadores em Química

Área: QPN

Nº de Inscrição: 01353

Metabolomic fingerprint at different hydration states and structural identification of anabasine in *Selaginella convoluta*

Fernanda P. Santos Reginaldo (PG),^{1*} Rafael Freire (PQ)², Isabelly C. M. Costa (IC)¹, Ivanice B. Silva (PQ)¹, Alan A. Roque (PG)³, Fernando Hallwass (PQ)⁴, Ian Castro-Gamboa (PQ)⁵, Arthur G. Fett-Neto (PQ)⁶, Alberto J. Cavaleiro (PQ)⁵, Raquel B. Giordani (PQ)¹.

fernandaprisila.ufrn@gmail.com

¹ Department of Pharmacy, UFRN; ² Medway Metabonomics Research Group, UoG; ³ Department of Botany, UFRN; ⁴ Department of Fundamental Chemistry, UFPE; ⁵ Department of organic chemistry, UNESP; ⁶ Department of Botany, UFRGS.

Palavras Chave: *Selaginella convoluta*, Anabasine, Caatinga, Metabolic fingerprint.

Highlights

- Metabolites found in *S. convoluta* appear to play adaptive roles in desiccation tolerance.
- Anabasine occurrence in *S. convoluta*, an unprecedented case in pteridophytes.

Resumo/Abstract

Selaginella convoluta is a desiccation tolerant plant native from the Brazilian semiarid¹, endowed with an effective drought-resistance mechanism². This species can be characterized as poikilohydric and homoiochlorophyllous³, which are important features of resistance to desiccation. In order to understand the metabolic basis of desiccation, a metabolic fingerprint was performed at different hydration states by NMR spectroscopy and for metabolite detection, we query the ¹H NMR spectra using an *in-house* database. The analysis criteria were related to similarity values based on the algorithm of pattern recognition⁴; the threshold of similarity used was between 50 and 100%. This analysis strategy, allowed the detection of 89 metabolites, all of them described for the first time in *S. convoluta*. Among these metabolites, 49 showed 100% database similarity, including: alkaloids (7), phenolics (30), terpenoids (1), polyamines (4), amino acids (3), nucleosides (2) and carbohydrates (2). Of the metabolites with 100% database similarity, 6 appeared to be related only to the plant dry state. Overall, the metabolic fingerprint suggested that abscisic acid, carbohydrates, proline, polyamines, phenolics and alkaloids might play adaptive roles in the acquisition of drought, heat, and irradiance resistance in *S. convoluta*. Notably the pyridine alkaloid anabasine was isolated from *S. convoluta* shoots for the first time in pteridophytes. Apparently, the multistress edaphoclimatic features in Caatinga, an exclusively Brazilian xeric biome, can trigger specific biosynthetic pathways associated with the dry state that culminate in altered metabolite profile, including alkaloid production.

Agradecimentos/Acknowledgments

CAPES, CNPQ, MCTIC, INCT BioNat.

¹ Gaff, D. F. (1987). "Desiccation tolerant plants in South America." *Oecologia* **74**(1): 133-136.

² Blum, A. (2005). "Drought resistance, water-use efficiency, and yield potential are they compatible, dissonant, or mutually exclusive?" *Aust. J. Agric. Res.* **56**(11): 1159-1168.

³ Ambrósio, S. T. and N. F. Melo (2001). "New Records of Pteridophytes in the Semi-Arid Region of Brazil." *AM. FERN. J.* **91**(4): 227-229.

⁴ Freire, R. T. (2015). "Method of analysis' pattern recognition and computer program." Register present in institutional repository of unesp related to d.sc.

Development of Nickel Catalysts embedded in N-doped Carbon for selective hydrogenation of alkynes to alkenes

João V. F. da Costa (IC),¹ Bruno H. Arpini (PG),¹ Liane M. Rossi (PQ).^{1*}

joao.ferreira.costa@usp.br; *lrossi@iq.usp.br

¹Instituto de Química Universidade de São Paulo, São Paulo 05508-000 (Brazil)

Key Words: Nickel, Catalyst, N-doped carbon, Alkynes, Hydrogenation.

Highlights

A hybrid catalyst composed of nickel embedded in carbon doped with nitrogen is able to reduce alkynes to alkenes with high selectivity when compared to nickel Raney.

Abstract

The selective hydrogenation of alkynes to alkenes presents a fundamental importance in raw material purification for polymer industry and for the manufacture of fine chemicals [1]. The utilization of Earth abundant metals, such as nickel, for these selective transformations is preferred, because of their price cost and ecological appeal. Here, we developed a study about the design of nickel catalysts embedded in N-doped carbon adapted from Beller's group protocols [2,3]. All Nickel catalysts were active in hydrogenation of phenylacetylene, the chosen model substrate. The Ni catalyst embedded in N-doped carbon (Ni5@NC/SiO₂) showed better activity than the catalyst without the carbon coating (Ni5/SiO₂) and commercial Nickel Raney® catalyst (Fig. 1). Moreover, the Ni5@NC/SiO₂ was more selective compared to commercial Nickel Raney catalyst at similar conversion. The catalysts were characterized by XRD, TPR and TEM analysis.

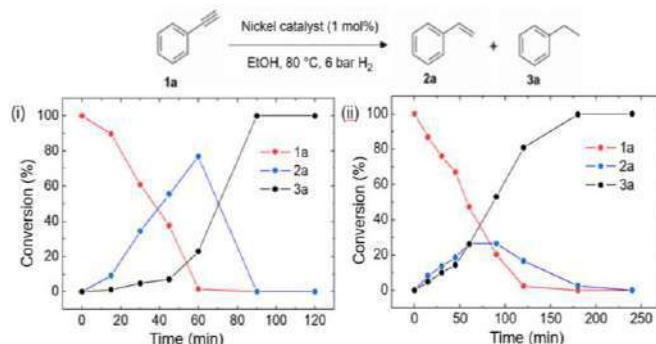


Figure 1. Conversion and selectivity for phenylacetylene hydrogenation as a function of time: Ni5@NC/SiO₂ (i) and Nickel Raney® (ii).

Overall, the results show that the presence of C and N in the catalyst surface increases the selectivity for styrene in phenylacetylene hydrogenation. Moreover, the N-doped carbon catalyst showed a longer activation time but than a better activity for the hydrogenation of alkynes, not only compared to Ni5/SiO₂ and Raney® catalysts but also with similar catalysts in the literature [2].

[1] Siau, W. Y.; Zhang, Y. and Zhao, Y. *Top. Curr. Chem.* **2012**, 327, 33-58.

[2] Ryabchuk et al., *Sci. Adv.* **2018**, 4, eaat0761.

[3] He, L.; Weniger, F.; Newmann, H. and Beller, M. *Chem. Int. Ed.* **2016**, 55, 2-15.

Acknowledgments

The authors would like to thank FAPESP, CNPq and CAPES for financial support. We gratefully acknowledge support of the RCGI – Research Centre for Gas Innovation, hosted by the University of São Paulo (USP) and sponsored by FAPESP–São Paulo Research Foundation (2014/50279-4) and Shell Brasil.

Síntese e Caracterização de Moléculas Discóticas Contendo Heterociclos Triazina, Quinoxalina e 1,2,4-Oxadiazol

Kelvy Leandro R. De Sales (IC),¹ Welisson P. Silva (PG),¹ Rodrigo Cristiano (PQ)^{1*}

kelvyleandro2@hotmail.com; rodrigoqmc@gmail.com

¹Departamento de Química, UFPB

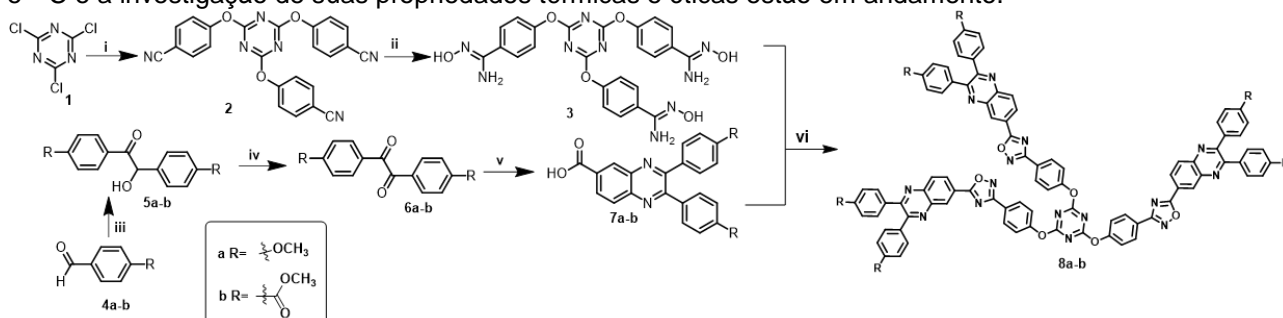
Palavras Chave: (Cristais Líquidos, Quinoxalina, 1,2,4-Oxadiazol, Triazina).

Highlights

- Synthesis and Characterization of Discotic Molecules Containing Heterocycles Triazine, Quinoxaline and 1,2,4-Oxadiazole.
- Synthesis of the core containing triazine and amidoxime groups.
- Synthesis of the peripheral portion containing the quinoxaline.
- Discotic molecules via reaction of 1,2,4-oxadiazole formation

Resumo/Abstract

Moléculas com simetria discótica vem atraindo grande atenção da academia devido as características de auto-organização e transporte de carga através das colunas. Os centros deficientes de elétrons, 1,3,5-triazina e 2,3-difenilquinoxalina, agregam propriedades de transporte de elétrons via conjugação eletrônica. Como também, emissão de fluorescência possibilitando aplicação destes materiais como camada emissora em dispositivos eletroluminescentes [1]. O heterociclo 1,2,4-oxadiazol, também deficiente de elétrons e luminescente, provoca um aumento no momento de dipolo molecular devido sua assimetria [2]. Neste contexto, este trabalho apresenta a síntese e caracterização de novas moléculas discóticas com tripla simetria derivadas da triazina conectada a porções periféricas da 2,3-difenilquinoxalina conectadas pelo heterociclo 1,2,4-oxadiazol. A síntese das moléculas finais **8a-b** foi realizado de acordo com esquema 1. A primeira etapa envolve a obtenção da nitrila **2** derivada da reação do cloreto cianúrico com 4-cianofenol seguido da formação da amidoxima **3**. Os aldeídos **4a-b** foram submetidos a uma reação de condensação benzoínica seguido de oxidação para obtenção dos compostos dicarbonilados **6a-b** que foram reagidos com o ácido 3,4-diaminobenzóico para formação dos ácidos **7a-b** em bons rendimentos. Por fim, os respectivos cloretos dos ácidos **7a-b** foram reagidos com a amidoxima **3**, para obtenção dos compostos finais **8a-b** contendo o heterociclo 1,2,4-oxadiazol em rendimentos moderados. Os compostos foram caracterizados por IV, RMN ¹H e ¹³C e a investigação de suas propriedades térmicas e óticas estão em andamento.



Esquema 1- Rota sintética para obtenção dos compostos finais **8a-b**.

Condições: i) 4-cianofenol, K₂CO₃, Acetona/H₂O, refluxo, 5h; ii) NH₂OH.HCl, NaOH, EtOH, refluxo, 24h; iii) KCN, EtOH/H₂O, 5h; iv) CuSO₄.5H₂O, Py/H₂O, refluxo, 8h; v) ácido 3,4-diaminobenzóico, refluxo, 12h. vi) a. **7a-b**, SOCl₂, DMF_{cat}. b. **3**, Py, refluxo.

[1] TAM, T. L. et al.. J. Mat. Chem., v. 21, n. 44, p. 17798, 2011.

[2] KUO, H. M. et al. Tetrahedron, v. 72, n. 43, p. 6843–6853, 2016.

Agradecimentos/Acknowledgments

CNPQ, CAPES-PROCAD, UFPB, UFSC.

Área: QVE

Nº de Inscrição: 01359

The Application of an immobilized microorganism in mesoporous material (MCM48) as a biocatalyst in transesterification reactions for the production of monoacylglycerols

Bruno Andrade Paranhos(IC)¹, Maria Sandra R. Queiroz (PG)¹, Marcelo Mignoni (PQ)², Eunice Valduga (PQ)², Ivaldo Itabaiana Junior (PQ)³, Camila R. Adão Malafaia (PQ)¹, Ivana Correa Ramos Leal (PQ)¹

bruno.a.paranhos@gmail.com; ivanafarma@yahoo.com.br;

¹Laboratory of Natural Products and Biological Assays, Natural Products and Food Department, Pharmacy Faculty, Federal University of Rio de Janeiro (UFRJ), Rio de Janeiro;

²Universidade Regional Integrada do Alto Uruguai e das Missões,- Erechim, RS;

³ Departamento de Engenharia Bioquímica – Escola de Química, -Universidade Federal do Rio de Janeiro, Brasil.

Keywords: Biocatalysis, Endophytic fungi, Monoacylglycerol, *Stemphyllium lycopersici*, Transesterification

Highlights

- Immobilization of microorganism in mesoporous supports.
- Transesterification reactions for monoacylglycerols production by immobilized endophytic fungi.

Resumo/Abstract

The monoacylglycerols (MAGs) are molecules of high interest for the food and pharmaceutical industries and are recognized by their properties as biocompatible and biodegradable surfactants. Currently, their synthesis proceed mainly through glycerolysis^[1], under high temperature and pressure generating unattractive by-products. Our group proposes an alternative approach by applying a new biocatalyst prospected from an endophytic fungus ^[2]. We propose the selective synthesis of MAGs using solketal, a protected glycerol analogue already previously used by our group for new strategy reactions with commercial lipases^[1]. In terms of immobilization technology, we also propose the utilization of a MCM48 zeolite type-support made with methyl-imidazolium (MI) ionic liquid as a structure-guiding agent ^{[3][4]}.

The objective of the present study is to evaluate the transesterification reaction of solketal with vinyl esters with different carbon chains by using a rich-enzyme extract produced from an endophytic fungus (*Stemphyllium lycopersici*) isolated from *Humiria balsamifera* vegetal species as biocatalyst. The main goal is to search for a new lipase producing microorganism with commercial application in selective synthesis involving MAG production highlighting that the immobilization of the correspondent extract could also confers the possibility of reusing and, improvement of its activity.

Our results show that extracts from *S. lycopersici* grown in an enriched oil fermentative media, followed by precipitation with ammonium sulfate, don't show activity towards esterification nor transesterification reactions. Interestingly, the correspondent extract immobilized in MCM-48 type zeolites (with 49% efficiency) successfully catalyzed the transesterification reactions, being able to convert vinyl esters and solketal into MAGs. Three different vinyl esters were used: stearate, laurate and decanoate being obtained the following conversion rates 52%, 70% and 75%, for the respective products. The reactions conditions adopted were: 100 mg of immobilized biocatalyst, 1 mmol of substrates (1:1 ratio), 0.9 mL n-heptane and 0.1 mL acetone, under batch reactions inside an orbital shaker at 40 °C and 200 rpm for 96 h. The products detected by gas chromatography coupled to mass spectrometry were 1-stearyl-glycerol, 1-lauroyl-glycerol and 1-caproyl-glycerol. Both, the morphological aspect observed by scanning electron microscopy as well as the activity of the immobilized biocatalyst change with the different structure drivers used in zeolite synthesis. By employing [C16MI]Cl, [C14MI]Cl and [C4MI]Cl as structure drivers, the 1-lauroyl-glycerol conversion obtained was 36%, 79% and 44%, respectively. This is the first work involving the immobilization of an endophytic fungi and its utilization as biocatalyst in the production of MAG.

[1] JUNIOR, I. I. Rotas Biotecnológicas Alternativas para a Síntese de Monoacilgliceróis. Tese, 2013

[2] QUEIROZ, M. S. R.; *et al.* Enantioselective biotransformation of sterically hindered amine substrates by the fungus *Stemphyllium lycopersici*. JAM, 2018.

[3] MIGNONI, M. L. Zeólitas obtidas com líquido iônico como direcionadores de estrutura: Síntese e reatividade. Porto Alegre, 2012.

[4] SCHERER, G. C. R. S. Imobilização *in situ* de lipase AK de *Pseudomonas fluorescens* em materiais mesoporosos do tipo MCM-48. Erechim, 2017.

Área: ANALÍTICA

Nº de Inscrição: 01360

GC×GC/qMS Analysis of Essential Oils of *Piper glabratum* Kunth and their antioxidants and antifungals activities

Anaí L. dos Santos (PG),¹ Allan dos S. Polidoro (PG),¹ Cláudia A. L. Cardoso (PQ),² Jonas da S. Mota (PG),² Rosângela A. Jacques (PQ),¹ Elina B. Caramão (PQ)^{1,3,4}(*) (*) elina@ufrgs.br

¹Instituto e Química, UFRGS, Porto Alegre, RS; ²Centro de Estudos em Recursos Naturais, UEMS, Dourados, MS

³Programa de Pós Graduação em Biotecnologia, UNIT, Aracaju, SE; ⁴INCT E&A, 40170-115 Salvador-BA, Brazil

Palavras Chave: óleo essencial; *Piper glabratum*; GC×GC/qMS; atividade antifúngica; atividade antioxidante.

Highlights

Identification of 199 compounds (mainly sesquiterpenes) in essential oils of *Piper glabratum* with seasonal differences; EOs showed antioxidant activity and inhibitory action against *C. albicans*.

Resumo/Abstract

Piper glabratum is a plant native from South America. This plant has been little studied, despite its use in folk medicine. In this study, chemical composition, antioxidant and antifungal activities of essential oils (EOs) from leaves of *P. glabratum* were investigated.

The influence of seasonality on their chemical composition was also evaluated. Chemical characterization was performed by two-dimensional gas chromatography coupled with quadrupole mass spectrometry (GC×GC/qMS). Altogether, 199 compounds were identified in the EOs and their composition varied during the seasonal cycle. The main compounds found in essential oils can be summarized as:

Summer (142 compounds) β -pinene (10%), artemisia triene (8%), (*E*)-nerolidol (6.8%). α -selinene (4%) and (*E*)-caryophyllene (4%). Notable differences were recorded in the essential oils during the season.

Spring: (136 compounds) (*E*)-nerolidol (8%), bicyclogermacrene (7%), caryophyllene oxide (6%), (*E*)-caryophyllene (4.9%), α -humulene (4%);

Autumn (101 compounds) (*E*)-nerolidol (8.9%), β -pinene (7%), artemisiatriene (6%), α -selinene (6%), germacrene D (5%), (*E*)-caryophyllene (5%);

Winter (only 26 compounds). germacrene D (77%), δ -Elemene (5%), bicyclogermacrene (4%).

The typical dry Winter in the Dourados region might explain the significant difference in the yield and chemical composition of the essential oil from Winter leaves. All of the analyzed oils consisted of sesquiterpenes hydrocarbons as a major fraction.

The oils from Summer and Autumn leaves were characterized by higher relative contents of monoterpene hydrocarbons in comparison with the other two samples. Furthermore, the lowest relative amount of oxygenated sesquiterpenes was observed in essential oil from Winter leaves.

EOs showed antioxidant activity, measured by DPPH (IC₅₀ values) (from 28.1 to 33.4 $\mu\text{g mL}^{-1}$) and β -carotene assays (from 57.4 to 66.4%), and inhibitory action against *C. albicans*. The oils provided expressive properties; however, the yield of EO from Winter was not enough for activities assays, remarking the influence of the seasonality on the biological activities of this plant.

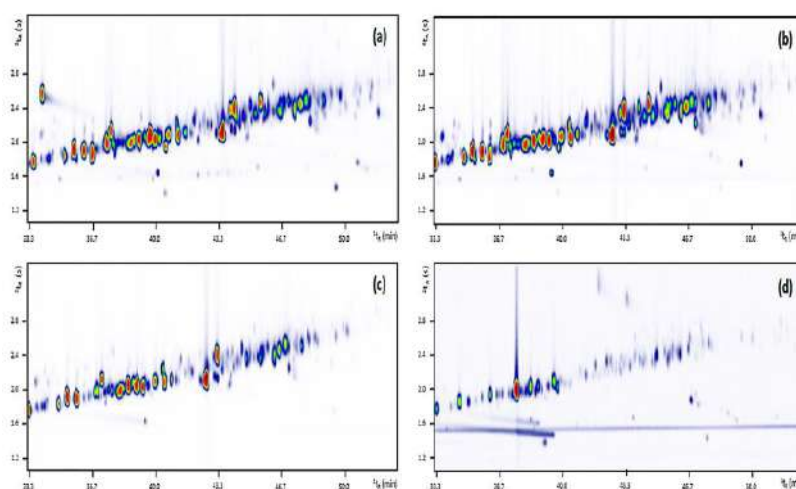


Figure 1: Total ion chromatogram presented as contour plot from essential oils of Summer (a), Spring (b), Autumn (c), and Winter (d)

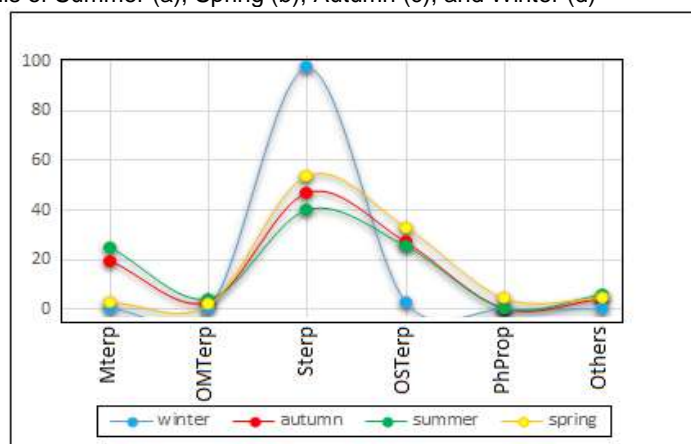


Figure 2: Semi-quantitative distribution of the main classes of compounds in the essential oils of *Piper glabratum* Legend: Mterp = Monoterpenes; OMterp = Oxygenated Monoterpenes; Sterp = Sesquiterpenes; OSTerp = Oxygenated Sesquiterpenes; PhProp = Phenyl Propanoids; Others = Others

Agradecimentos/Acknowledgments

CAPES, CNPq, FUNDECT

The peculiar mechanistic shift in reactions of methyl-parathion with methylated imidazoles

Patricia M. Soares (PG),*¹ Alex R. Teixeira (PG),¹ Renan B. Campos (PQ),² Elisa S. Orth (PQ).¹

patriciasoares@ufpr.br

¹Departamento de Química, UFPR; ²Departamento de Química e Biologia, UTFPR-Curitiba.

Palavras Chave: pesticide, 4(5)-methylimidazole, degradation, organophosphate.

Highlights

- 4(5)-methyl-imidazole reacts differently than imidazole, strongly affected by the concentration.
- Dual nucleophilic attack at the aliphatic carbon and phosphorus.

Resumo/Abstract

The pesticide methyl-parathion (MPT) contains a characteristic P=S bond and high toxicity. Thus, different forms of degradation of this pesticide have been reported. For example, imidazole (IMZ) attacks the aliphatic carbon exclusively (Figure 1 - blue) of MPT¹. For the analogue Paraoxon (P=O), the attack is solely at the phosphorus atom.² Herein, we evaluated the reaction of 4(5)-methylimidazole (4(5)-MEI) with MPT under similar conditions. The results indicate that the reaction may be following both pathways, attack on aliphatic carbon and phosphorus atom. The latter seems predominant. The reactivity of 4(5)-MEI may be related to the position of the methyl group or the tautomeric equilibria, in which there is the presence of two different species: 4-MEI and 5-MEI (5-MEI is the most reactive³).

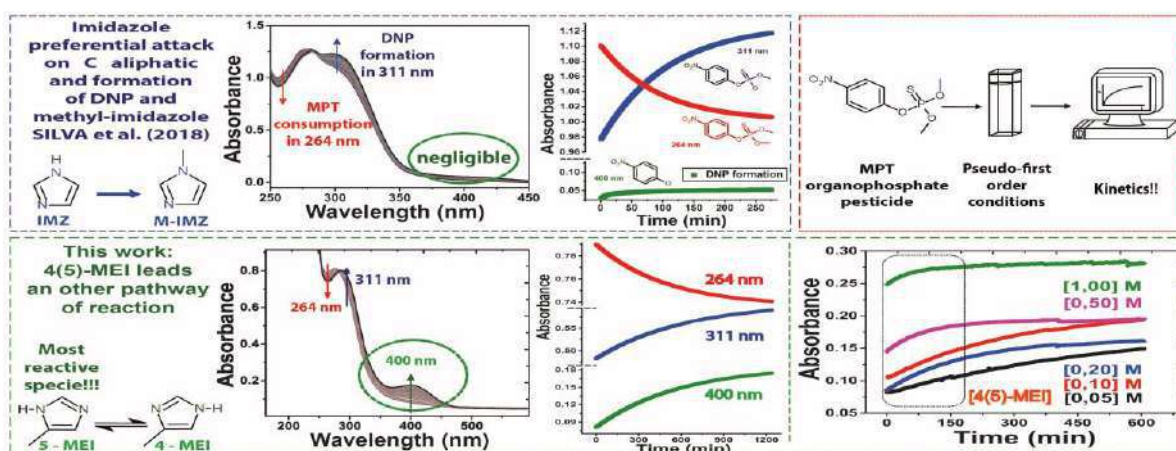


Figure 1 – Typical UV-Vis profile of the MPT reactions. All reactions under pseudo-first order conditions (red). Reaction of the MPT and IMZ (blue), product formation in 400 nm is negligible.¹ Reaction of the MPT and 4(5)-MEI (green), product formation in 400 nm is observed. (pH 10 ; [IMZ] = 0,05 mol.L⁻¹; T = 60 °C).

With increase the [4(5)-MEI] an unusual reaction profile is observed. Probably, the 4(5)-MEI attack must be happening in aliphatic carbon preferentially and is shifted. To understand this, studies such as NMR are in progress. The elucidation of mechanism involved in this reaction is fundamental to project efficient destruction tools and monitoring methods for highly toxic organophosphates pesticides as MPT.

Acknowledgments: UFPR, CAPES, CNPq, PhosAgro/Unesco/IUPAC, Fundação Araucária and L'Oréal-UNESCO-ABC.

References:

1. Silva, V.B. et al. **Chem. Eur. J.** (2018) 817-822.
2. Orth E.S. et al. **J. Mol. Catal. A: Chem.** (2015) 403, 93.
3. Campos, R. B. et al. **Chem. Eur. J.** (2016) 22, 15521- 15528.

TDDFT study of electronic transition of phenothiazine radical cation in the visible region and its relation to resonance Raman effect

Lucia Kiyomi Noda* (PQ) and Norberto Sanches Gonçalves (PQ)

lucia.noda@unifesp.br

LQCEMC, Departamento de Química, ICAQF, UNIFESP Campus Diadema.

Keywords: TDDFT, phenothiazine, radical cation, electronic transition, resonance Raman, excited state geometry.

Highlights

PTZ^{o+} has an electronic band at 516 nm. TDDFT B3LYP/6-31G(d,p) gives an electronic transition at 496 nm, with a oscillator strength of $f = 0.1633$. Excited state D_1 is planar and D_2 / D_3 are folded. The molecular orbitals involved in electronic transition has great contribution of sulphur atomic orbital.

Abstract

Phenothiazine (PTZ) derivatives represent an important class of molecules, which forms stable radicals that have been extensively studied. In this work, the radical cation of phenothiazine (PTZ^{o+}) was generated by the reaction with the mordenite solid acid. The most intense electronic transition of PTZ^{o+} is located at 516 nm, as indicated by the diffuse reflectance spectrum, see Figure 1.

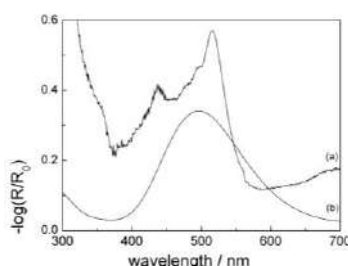


Figure 1. (a) diffuse reflectance spectrum of PTZ adsorbed on mordenite; (b) TDDFT calculated electronic spectra of PTZ^{o+}

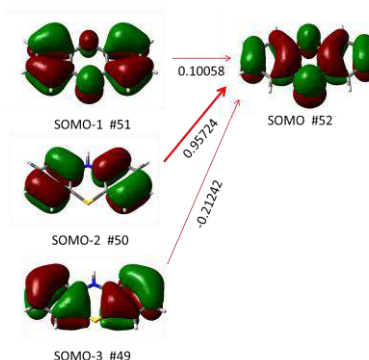


Figure 2. Canonical molecular orbitals involved in the electronic transition at 516 nm for PTZ^{o+} D_0 . CI coefficients are attached in the arrows. SOMO stands for Singly Occupied Molecular Orbital.

In order to characterize the electronic and molecular structure of this radical species, resonance Raman spectra were obtained and theoretical calculations of the structure, PTZ^{o+} vibrational frequencies and electronic spectrum were calculated employing DFT B3LYP/6-31G (d,p) and TDDFT methods as implemented in Gaussian 09 (rev.C01). In the ground state, PTZ^{o+} is planar, in contrast to the folded structure of neutral PTZ. The strong Raman band at 476 cm^{-1} was assigned to a CSC bending mode. The reason for its preferential enhancement was investigated using TDDFT, in order to obtain the molecular orbitals involved in the electronic transition at 516 nm. The TDDFT calculations show that this transition is from SOMO-1 and SOMO-2, both double occupied molecular orbitals, localized at the aromatic rings and goes toward SOMO (single occupied molecular orbital). This SOMO has contributions of sulphur and nitrogen atomic orbitals, but with predominance of sulphur atomic orbitals, which are absent in SOMO-1 and SOMO-2. The predominance of sulphur atomic orbitals in the SOMO explains the preferential resonance Raman enhancement of a CSC vibrational mode. The two lowest excited states of PTZ^{o+} (D_1 and D_2) are significantly different; the PTZ^{o+} D_1 resembles the PTZ^{o+} D_0 , while the PTZ^{o+} D_2 and D_3 are folded along the N-S axis, as can be seen from the increased SCCN and CCNC dihedral angles in this species. Other differences between the D_1 and D_2/D_3 excited states are the decreased CNC and CSC angles.

Acknowledgments

Authors are grateful to FAPESP (process 2017/06194-2) for the financial support and to LEM-IQUSP for the use of Jobin-Yvon U-1000 Raman spectrometer.

Área: MAT

Nº de Inscrição: 01363

Low-cost paper-based inkjet-printed substrate for SERS sensing platform

Naiara V. Godoy (PG),^{1,2*} Daniel García-Lojo (PG),² Jorge Perez-Juste (PQ),² Isabel Pastoriza-Santos (PQ),² Italo O. Mazali (PQ)¹.

naiara.godoy@iqm.unicamp.br

¹Institute of Chemistry, University of Campinas – UNICAMP, Campinas, Brazil; ²Departamento de Química Física and CINBIO, Universidade de Vigo, Vigo, Spain.

Keywords: SERS, Gold Nanoparticle Ink, Paper-based SERS Substrate, Cellulose Paper, Surface Modification, Inkjet Printing.

Highlights

Fabrication of paper-based SERS platform. Development of an effective gold nanosphere ink. Surface modification of cellulose paper. Inkjet printing of AuNP ink on paper by a common office printer.

Abstract

Owing to its advantages such as rapidity, portable and high sensitivity, Surface Enhanced Raman Scattering Spectroscopy (SERS) is an analytical technique widely employed in the detection of environmental pollutants, biological molecules, and food contaminants, among others. There is great interest for applying cellulose paper as substrate in the fabrication of SERS platforms, once it is high commercially available, compatible with biomolecules, low-cost material and it is derived from renewable sources. In the production of paper-based SERS substrates, inkjet printing technique is a highlighted method and consists of the deposition of nanoparticle ink on a substrate by an inkjet printer. The method allows the production of SERS substrates with great homogeneity and reproducibility since the size of the drops generated by the printer is in the order of picoliters. Therefore, the fabrication of SERS substrates becomes cost-effective, facile and high throughput by employing a common office printer.

The aim of this work is to fabricate a plasmonic paper-based SERS platform by the inkjet printing method. In order to achieve that, it was developed an effective gold nanoparticle ink, which gold nanospheres (AuSph) were dispersed in a mixture of glycerol and ethanol. A surface modification was promoted on chromatography paper by treating it with (2-dodecen-1-yl)-succinic anhydride (DDSA), in the way to produce a hydrophobic barrier and preventing the spread of colloidal suspension and analyte solution on the paper. The deposition of AuSph ink was performed by a piezoelectric printer with Epson's Micro Piezo technology due to its advantage of low manufacturing temperature, which can prevent possible destabilization of the colloidal suspension.

The surface modification led the production of a hydrophobic surface which increased the SERS activity of the substrate. AuSph ink was produced with gold concentration of 113 mM and exhibited great stability up to 35 days of storage. The SERS substrate was designed as circles with 1 mm of diameter (spots) and the optimization of the nanoparticles content was carried out with increasing the number of consecutive printing, which was evaluated based on the SERS activity and scanning electronic microscopy (SEM). Spots printed 5 times with AuSph ink exhibited highest SERS activity. Inkjet printing method demonstrated being efficient for the homogeneous deposition of gold nanoparticles on the modified cellulose paper, as observed on the SEM image and SERS mapping of crystal violet (CV) of 5-printed spot in Figure 1. The results indicate a high homogeneity and reproducibility SERS substrate that allows obtaining high detection limits. Up to now, it was achieved great SERS signal for detection of CV at 10^{-7} mol L⁻¹ (Figure 1).

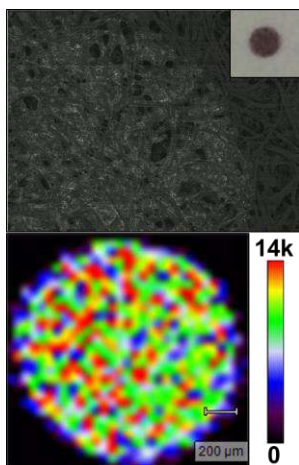


Figure 1. SEM image (upper) and SERS mapping (down) of the spot printed 5 times.

Acknowledgments

This work was supported by CAPES, FAPESP, CNPq, Santander Bank, Institute of Chemistry/UNICAMP, Brazilian Nanotechnology National Laboratory (LNNano, Campinas, Brazil), INOMAT, Prof. Dr. Hudson Giovani Zanin from Department of Semiconductors, Instruments and Photonics (UNICAMP, Brazil), Colloid Chemistry Group (University of Vigo, Spain), CINBIO (University of Vigo, Spain), Xunta de Galicia and European Commission.

Highly-branched silver magnetic microcomposite as SERS aptasensor for cardiac troponin I detection

Raisa Siqueira Alves (PG),^{1,*} Fernando Aparecido Sigoli (PQ),¹ Italo Odone Mazali (PQ)¹

raisa.alves@iqm.unicamp.br; mazali@iqm.unicamp.br

¹Institute of Chemistry, University of Campinas – UNICAMP, Campinas, Brazil

Keywords: SERS, silver nanoparticles, magnetic nanoparticles, aptasensor, troponin I.

Highlights

A SERS aptasensor based on a silver microstructure was developed for the detection of cardiac troponin I. The promising results open the field for routine applications of SERS in diagnostic medicine.

Abstract

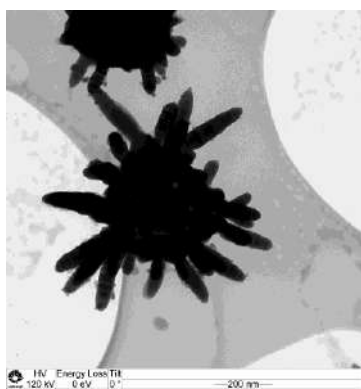


Figure 1: TEM image of the microflowers.

Surface-enhanced Raman spectroscopy (SERS) is a powerful spectroscopic technique in which the Raman scattering of molecules adsorbed on metal nanoparticles is increased by several orders of magnitude. SERS delivers the molecular fingerprint of substances with high sensitivity, which is particularly interesting for the detection of biological samples. The technique has been investigated for the development of future plasmonic biosensors and other powerful analytical devices. In this context, the search for highly efficient, reproducible and cost-effective SERS substrates is currently one of the central focuses of Raman research. Given so, this work aims to synthesize a highly branched flower-like $\text{Fe}_3\text{O}_4@\text{SiO}_2@\text{Ag}$ microcomposite (Figure 1) as an efficient and versatile SERS substrate for application as a SERS-based biosensor. The Fe_3O_4 core, synthesized by a modified solvothermal approach, endows magnetic properties to the material, which enables an effortless separation from fluids. The silica coating was synthesized by the Stöber method with slight modifications. The silica layer

not only preserves the integrity of the core from external agents but also prevents irreversible magnetic aggregation. The $\text{Fe}_3\text{O}_4@\text{SiO}_2@\text{Ag}$ microflowers were synthesized by a seed-mediated sonochemical approach, producing numerous Ag tips, which generated the plasmonic properties for the SERS effect. The efficiency of the microcomposite substrate was tested against 4-amino benzenethiol (4-ABT) as a reference probe, and a detection limit of $1 \times 10^{-7} \text{ mol L}^{-1}$ was achieved. Subsequently, an aptasensor was assembled from the microflower substrate and tested for the analysis of troponin I (cTnI). Troponin I is a key biomarker for acute myocardial infarction (AMI), one of the lead death causes worldwide. The biomolecule has been explored for an early and precise diagnosis of AMI. To produce the aptasensor, the microflowers were functionalized with an aptamer with high affinity and specificity for cTnI. The SERS measurements with the aptasensor achieved the detection of cTnI in a concentration of $1 \times 10^{-8} \text{ mol L}^{-1}$ (Figure 2). Hence, aptasensor showed to be very promising, opening the field for further research on SERS-based aptasensors.

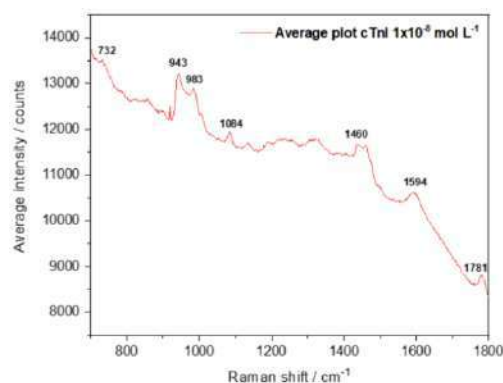


Figure 2: Average SERS spectrum of cTnI $1 \times 10^{-8} \text{ mol L}^{-1}$ on the microflower aptasensor substrate. The spectrum is the average of 40 independently collected spectra.

Acknowledgments

São Paulo Research Foundation (FAPESP), Brazilian National Council for Scientific and Technological Development (CNPq), Coordination for the Improvement of Higher Education Personnel (CAPES), and National Institute of Science and Technology in Functional Complex Materials (INOMAT).

First-principles Investigation of Structural and Electronic Properties of Solar Cell Materials

Guilherme K. Inui (IC),^{1*} Rafael Besse (PG),² Juarez L. F. Da Silva (PQ).¹

quinui@usp.br

¹Instituto de Química de São Carlos, IQSC-USP; ²Instituto de Física de São Carlos, IFSC-USP

Palavras Chave: Chalcogenides, Fotovoltaics, Density functional theory, Density of states.

Highlights

Calculation of parameters using Density Functional Theory of classical structures such as C, Si and β -Sn for semiconductor chalcogenides with promising application in photovoltaic devices.

Resumo/Abstract

Two-dimensional semiconductors with properties such as specific band gap, charge carriers density, etc, offer promising applications for photovoltaic devices to produce sustainable energy. In this aspect, some materials attract interest, such as chalcogenides, materials which contain S, Se and Te, because of the variety of physical and chemical properties they exhibit, due to their large number of chemical compositions and crystal structures [1]. To contribute for the development and understanding of the properties of chalcogenides, we are performing a density functional theory (DFT) investigation of the structural, energetic, and electronic properties of these materials. As a first step, to initiate the investigation of crystal solids with the computational implementation and test the calculations parameters, we studied traditional structures such as carbon diamond structure (C), silicon diamond structure (Si) and tin tetragonal structure (β -Sn), obtaining their equilibrium lattice parameters, cohesive energy and electronic properties. These are materials with simple structures and their electronic properties range from wide band gap (C), small gap semiconductor (Si) and metal (Sn), thus allowing to perform a comprehensive analysis of the results of solid state properties among these materials. Our DFT calculations were performed with the *Vienna Ab initio Simulation Package* (VASP) [2,3] and employed the generalized gradient approximation (GGA) for the exchange correlation functional, as proposed by Perdew-Burke-Ernzerhof [4]. A converged cut-off energy of 414 eV was used for the plane-wave basis set, and a $14 \times 14 \times 10$ k-points mesh for integrations in the Brillouin Zone was proven to be sufficient for the systems and was doubled to calculate density of states and electronic band structure, to obtain a better description of the Brillouin Zone. Equilibrium structure parameters were obtained by minimization of stress tensor, with a cut-off energy of 621 eV, due to the slower convergence of the basis set. Due to the periodic boundary conditions employed in VASP, free atoms were calculated with a vacuum box of 15 Å, to prevent spurious interactions between the atom and its periodic images for cohesive energy calculations. Calculated lattice parameters are in good agreement with experimental measurements [5], with an average relative error of 0.99%, and cohesive energies were determined within a 2.29% relative difference from reference literature data [5]. To analyze the electronic properties of the materials we calculated the electronic density of states (DOS) and electronic band structure, which allowed to obtain the band gap and the character of the electronic states. Based on the analyses performed for these materials, we investigated the structural, energetic and electronic properties of semiconductor chalcogenides, e.g. Cu₂S [6], aiming at the application in photovoltaic devices.

Referências/References

- [1] R. Besse, F. P. Sabino, J. L. F. Da Silva, *Phys. Rev. B* 93, 165205 (2016).
- [2] G. Kresse and J. Hafner, *Phys. Rev. B* 48, 13115 (1993).
- [3] G. Kresse and J. Furthmuller, *Phys. Rev. B* 54, 11169 (1996).
- [4] J. P. Perdew, K. Burke, and M. Ernzerhof, *Phys. Rev. Lett.* 77, 3865 (1996).
- [5] C. Kittel, *Introduction to Solid State Physics*, 8th Ed., Wiley, (2005).
- [6] Q. Xu *et al.*, *Appl. Phys. Lett.* 100, 061906 (2012)

Agradecimentos/Acknowledgments

G. K. Inui thanks São Paulo Research Foundation (FAPESP) for the financial support (grant 2018/17460-8). R. Besse is recipient of PhD fellowship, grant 2017/09077-7, FAPESP.

Synthesis of Au-CeO₂ nanoparticles supported on mesoporous silica and its potential applicability for the preferential oxidation of CO (PrOx-CO)

Gesiane Pinha de Sousa (PG),^{1*} Cristine Santos de Oliveira (PG),¹ Érico Teixeira Neto (PG),¹ Fernando Aparecido Sigoli (PQ),¹ Italo Odone Mazali (PQ)¹.

gesy_gps@hotmail.com

¹Institute of Chemistry, University of Campinas – UNICAMP, Campinas, Brazil.

Keywords: Preferential oxidation of CO; gold; ceria; SBA-15; catalysis

Highlights

Supported gold nanoparticles were synthesized by the deposition-precipitation method. Ceria was synthesized by the metalorganic decomposition method. The technique of successive impregnation-decomposition cycles (IDCs) was used in order to synthesized samples with different ceria contents. The SBA-15, prepared by sol gel method, was used as a support for the nanoparticles. The catalytic activity of the samples for the PrOx-CO reaction was evaluated at the temperatures between 300 – 573 K, using a gas stream containing 1 % of CO, 1 % of O₂, 70 % of H₂ and He as a carrier gas.

Abstract

The water gas shift reaction $\text{CO} + \text{H}_2 \rightleftharpoons \text{H}_2\text{O} + \text{CO}_2$ followed by the preferential oxidation of carbon monoxide (PrOx-CO) $\text{CO} + \text{O}_2 \rightarrow \text{CO}_2$ are used to decrease the CO content from steam reforming streams, yielding higher purity H₂. Since PrOx-CO is carried out in rich H₂ atmosphere, the catalysts used must present high selectivity towards CO oxidation, in order to avoid competitive side reactions such as H₂ oxidation. Also, it is desirable to promote the reaction at lower temperatures (≈ 373 K) due to the purified H₂ possible applications. Usually the catalysts for PrOx-CO are based on metal/oxide interactions, since it provides higher catalytic activity at lower temperatures. In this work, SBA-15 decorated with Au and CeO₂ nanoparticles were synthesized and the samples were investigated as potential catalysts for PrOx-CO. SBA-15 was chosen as a mesoporous support to promote the spacing between the nanoparticles in order to avoid their sintering and to control their size distribution. SBA-15 was synthesized by sol-gel, the ceria was deposited within the pores of SBA-15 through different numbers of impregnation-decomposition cycles (2, 5 and 8 IDCs) and the Au nanoparticles were synthesized by the deposition-precipitation method. The silica pores provided effective size control of the nanoparticles (4 - 9 nm for Au and 2 - 4 nm for CeO₂, according to the IDC number). The samples were characterized by N₂ physisorption, XRD, TEM, ICP-OES, XRF, Raman Spectroscopy and by its catalytic activity for PrOx-CO. The pure gold-catalyst exhibited maximum CO conversion at 573 K. The incorporation of ceria reduced the reaction temperature to lower values (373 – 410 K). The successive IDCs improved the catalytic activity when comparing samples with 2 e 5 IDCs, the latter showing 1.2 mol of CO₂ formation per mol of Au, at 408 K. In contrast, the sample containing 8 IDCs exhibited substantial loss of surface area, which may have hindered the access of the reaction gases to the active sites of the catalyst.

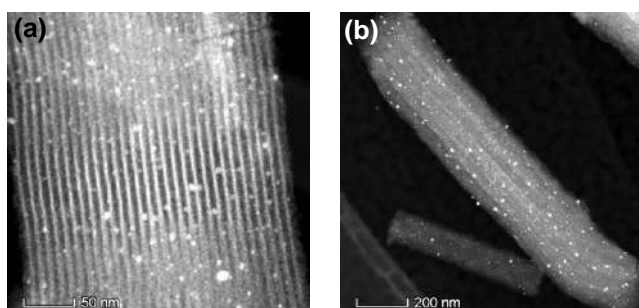


Figure 1: Transmission Electron Microscopy images of SBA-15 decorated with ceria (5 IDCs) and gold.

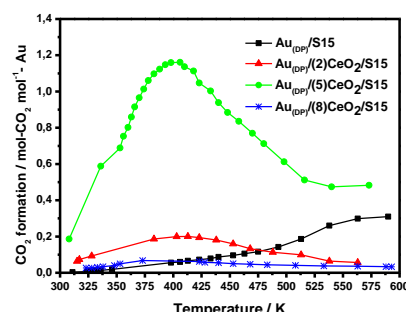


Figure 2: Catalytic behavior of the samples synthesized with different IDCs of ceria (2, 5 and 8).

Acknowledgments



Área: QPN

Nº de Inscrição: 01367

Analysis and quantification of flavonoids in flowers of *Allamanda cathartica* L.

Deivisson W. Rodrigues (IC),^{1*} Clarissa de M. A. Krueger (TC),¹ Ana Flávia F. Müller (PG),² Tiago J. Bonomini (PG),² Luiz Carlos Klein Jr (PQ),^{1,2} Marina da S. Machado (PQ),¹ Ruth Meri L. da Silva (PQ),^{1,2} Angela Malheiros (PQ),^{1,2}

angela@univali.br; deivisson@univali.br

¹Núcleo de Investigações Químico Farmacêuticas; ²Programa de Pós-Graduação em Ciências Farmacêuticas, Universidade do Vale do Itajaí, SC, Brasil.

Palavras Chave: Flavonoids, HPLC, PCA, rutin

Highlights

PCA and HCA establish relationships between distribution flavonoids in *Allamanda cathartica* flowers

Environmental factors interfere in the concentration of flavonoids in *A. cathartica* flowers

Resumo/Abstract

Allamanda cathartica L. has pharmacological properties such as, anti-inflammatory, antimicrobial, antifungal and cicatrizing. Its flowers have mainly flavonoids and iridoids in their chemical composition. The biosynthesis of these substances can be changed by different environmental factors, such as soil, UV radiation, herbivory, and collection conditions. Therefore, the objective was to perform the qualitative analysis of extractive solutions aiming at the quantification of rutin and total flavonoids present in the flowers of *A. cathartica* collected in different localities of Vale do Itajaí and north region of the state of Santa Catarina during the summer of 2017. Extractive solutions were produced with grounded flowers by dynamic maceration for six hours at 100 rpm. Ethanol 90 °GL was chosen as the extracting solvent by the polar characteristic of the evaluated metabolites. The Determination of dry Residue was performed as established by the Brazilian Pharmacopoeia. Chromatographic analysis was performed by liquid chromatograph on a Shimadzu LC-20AT (Shimadzu, Tokyo, Japan), consisting of a binary pump with scanning detector and photodiode spectrum, column reverse phase and automatic injector. The mobile phase was composed of acetonitrile (A) and water acidified with acetic acid pH 3.5 (B) in the proportions of 15: 85 (A: B, v/v) at time zero, 30:70 from 0 to 10 minutes and 15:85 from 10 to 25 minutes, with constant flow of 1.0 mL/min, column temperature of 30 °C. The analyzes were performed at 355nm for flavonoids and 265nm for multivariate analysis. All analyzes were performed in triplicate. For the determination of the concentration of rutin and other flavonoids of each solution was used the equation $y=38015x-29734$, previously validated. For investigate the similarities of the collections based on the distribution of the flavonoids in the flowers and to establish relationships between them, was utilised Principal Component Analysis (PCA) and Hierarchical Clustering Analysis (HCA). The analyzes were performed using a matrix based on the chromatograms, using the Matlab® software, version 2013. The analytical method used was efficient in the qualitative and quantitative analysis of extractive solutions. The qualitative analysis showed that the chemical extractive solutions are similar regardless of locality. The total flavonoids were expressed equivalent to rutin, showing values for the collections, ranging from 7.14 to 17.8 mg/g. The concentration of the rutin ranged from 2.7 to 9.5 mg/g. The highest concentrations of rutin occurred in one of the collections of Araquari (north region of State) and Camboriú (Vale do Itajaí). Other detected flavonoids were not identified. It is concluded that environmental factors did not interfere in the production only concentrations of flavonoids in *A. cathartica* flowers. Thus, the species has the potential to become a product of extracts of flowers with relevant pharmacological properties.

Agradecimentos/Acknowledgments

CNPq; FAPESC; Laboratório de Pesquisa em Fitoquímica-UNIVALI

Área: MAT

Nº de Inscrição: 01368

Influence of the structural design of CeO₂ porous nanorods decorated with gold nanoparticles upon the optimization of water gas shift reaction (WGSR)

Raul B. M. Silva (PG),^{1,*} Cristine S. Oliveira (PQ),¹ Érico T. Neto (PQ),¹ Fernando A. Sigoli (PQ),¹ Italo O. Mazali (PQ)¹

raulmachadosilva@gmail.com; mazali@unicamp.br

¹Institute of Chemistry, University of Campinas – UNICAMP, Campinas, Brazil

Keywords: WGS Reaction; Gold nanoparticles, Catalysis, Deposition-Precipitation, Ceria nanorods

Highlights

A novel class of catalysts based on nanosized gold particles over porous oxide nanorods is presented. The materials were analyzed with cryo-HRTEM and showed relevant activity for WGS reaction.

Abstract

Since it has been found out that nanosized gold particles, dispersed over metal oxides surfaces, are highly active for catalysis applications, extensive and intensive studies have been ongoing in order to delve deeper into the application of this class of materials, especially for industrially relevant applications, as in the water-gas shift reaction (WGSR), due to its use in several processes to obtain hydrogen gas, a strong candidate to become one of the next generation's main fuel source. Our project accomplishes the combination of oxides such as CeO₂, ZnO and ZrO₂ commonly used in catalysis with gold nanosized particles, focusing on the study and optimization of the **oxide-oxide** and **oxide-metal** interfaces over the catalytic performance of the materials for the WGS reaction at low temperature.

In this work we designed a novel material for the catalysis of the WGSR to address some issues commonly observed, such as the formation of undesired side products and the sintering of the catalyst particles. A strategy was carried out in order to obtain a material that would compensate both these faults.

For the synthesis of ceria nanorods used as the support of the catalyst, the hydrothermal synthesis employed herein showed several advantages as a one-step, one-pot, low-cost and easy-to-purify process that enables the preparation of high purity ceria nanoparticles of controlled size and morphology. It is known that nanorods synthesized via this method are porous, and by means of an acid lixiviation developed by our research group, native pores of ceria nanorods are expanded and enable the deposition/precipitation of Au NPs, allowing a control of the size of the deposited nanoparticles and preventing sintering for the catalytic application of the material.

In order to coat CeO₂ oxide nanorods, it was used the method of impregnation-decomposition cycles (IDC), which worked out to obtain oxide films over the nanorods, a result confirmed by Energy-dispersive X-ray spectroscopy. Gold nanoparticles are placed down onto the oxide surface by the deposition-precipitation method. In the methodology carried out in this work, gold precursor, HAuCl₄, is brought out of the solution in the presence of a suspension onto the support by increasing the pH to 9 with the addition of base in order to precipitate Au(OH)₃, which gives out metallic gold after thermal treatment. The surface of the support plays a role as a nucleating agent controlling the size of the nanoparticles ($2,5 \pm 0,9$ nm) and their homogeneity.

Catalytic tests were performed, and the materials exhibited catalytic activity, ranging from 20-25% for lower temperatures (150°C) to 50-55% for higher temperatures (300°C). The insertion of a zinc oxide coating on the surface of the ceria nanorods, however, ensured reversibility and stability for catalytic tests, attributed to the capacity of zinc oxide to prevent the sintering and growth of Au nanoparticles during catalytic cycles.

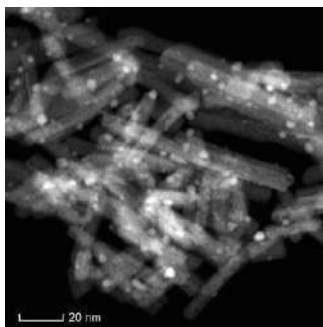


Figure 1. Gold nanoparticles deposited over ceria nanorods, obtained by Cryo-HRTEM, showing pores, Au NPs and the crystallinity of the material.

Acknowledgments

The authors thank FAPESP for the grant of the master scholarship and the financial support provided by CNPq, CAPES, INOMAT. We also would like to thank Brazilian Nanotechnology National Laboratory (LNNano) by allowing us to make use of the last-generation FEI Transmission Electron Microscope Titan™.

42ª Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química: Eixos Mobilizadores em Química

Área: MAT Nº de Inscrição: 01369

Study of the photovoltaic cells coated by silica matrix doped at different concentrations of the Er³⁺ and Yb³⁺ ions

Jéssica P. Batista (PG)¹, Henrique J. da Silva (PG)¹, Lucas A. Rocha (PQ)¹, Eduardo J. Nassar (PQ)^{1*}.

jessicapotomatti@gmail.com; eduardo.nassar@unifran.edu.br

¹Universidade de Franca, Av. Dr. Armando Salles Oliveira, 201 CEP 14404-600 – Franca / Brasil

Key words: upconversion, electrical measurements, dip-coating.

Highlights

This work has as main goal to coat the commercial photovoltaic cells with silica matrix doped different concentrations of the lanthanides Er³⁺ and Yb³⁺ ions, the upconversion of the lanthanides ions were used to increase of electrical efficiency. Initially, the cells were coated by sol-gel methodology, the sol content tetraethylortosilicate, ethyl alcohol and distilled water and doped with Er³⁺ and Yb³⁺ in the molar ratio of the silicon, 1:4, 1:8, and 1:16 of the Er³⁺:Yb³⁺. Then, the electrical measurement was performed to compare the electrical power of the coated area with the not-coated area of the cell. Finally, the coated cells were analyzed by photoluminescence to confirm the incorporation of the lanthanide ions into the cells.

Resumo/Abstract

The energy production is fundamental to ensure development and sustainability of the humanity, thus the production of the renewable energy must be used to make it economically viable and socially. The photovoltaic cell is the only that can convert solar radiation into electricity without noise, pollution and with low environment impact, it being at the same time robust, reliable and long-lasting [1]. However, the photovoltaic commercial cells present low efficiency due to the small absorption range of the solar spectrum, it necessary the study to increase the yield. In this work, the commercial polycrystalline silicon photovoltaic cells were coated with thin films by sol-gel methodology and doped in different concentrations (1:4, 1:8 and 1:16) with lanthanides Er³⁺ and Yb³⁺ ions. The coated was realized by the dip-coating technique with different number of layers (1, 2, 3 and 4) and dried at different temperatures (100, 200, 300 and 400°C) for 20 min. The photovoltaic cells were characterized by photoluminescence technique and electrical measurement of voltage, current and power electric. In the photoluminescence characterization, when excited at 980 nm, the typical Er³⁺ emission bands emerged in the green (522nm and 540nm) and red (650nm) regions, corresponding to the ²H_{12/2} – ⁴I_{15/2}, ⁴S_{3/2} – ⁴I_{15/2} e ⁴F_{9/2} – ⁴I_{15/2} energy level transitions. The electrical measurement demonstrated that at low temperature thermal treatment and the few layers, and high concentration of the Yb³⁺ (1:16), is more interesting results were obtained, but the cells with high thermal treatment, more layers, and low concentration (1:4 and 1:8) present more transparent films. Therefore, through the luminescence analysis, it was possible to observe the coat on photovoltaic cells contend Er³⁺ and Yb³⁺ ions by the sol-gel method, the thermal treatment and number of the layers are parameters that can influence in the efficiency of the cells. The electrical measurement showed an increase of the electric power around 10 %.

Agradecimentos/Acknowledgments

FAPESP processo nº2018/05854-1, CNPq, CAPES, UNIFRAN.

[1] WEHR, G. **Otimização e desenvolvimento de células solares industriais em substratos de silício multicristalino**. 2008. 103 f. Dissertação (Mestrado em Engenharia e Tecnologia dos Materiais) - Pontifca Universidade Católica do Rio Grande do Sul, Porto Alegre.

Área: BEA

Nº de Inscrição: 01370

Caracterização dos voláteis presentes na polpa de uvaia (*Eugenia pyriformis* Cambess) usando o método de microextração em fase sólida

Ana F.R. Da Silva (IC)¹, Núbia S. Silveira (IC)^{1*}, Júlio O. F. Melo (PQ)³, Mauro R. Silva (PG)⁴, Rodinei Augusti (PQ)⁵, Luisa C. B. Reina (PQ)².

luisabarrett@gmail.com; nubia_silveira99@hotmail.com

¹Instituto de Ciências da Saúde, UFMT-Campus Sinop; ²Instituto de Ciências Naturais, Humanas e Sociais, UFMT - Campus Sinop; ³Departamento de Ciências Exatas e Biológicas, UFSJ – Campus Sete Lagoas; ⁴Departamento de Alimentos, UFMG; ⁵Departamento de Química, UFMG.

Palavras Chave: Uvaia, SPME, Compostos voláteis.

Highlights

Characterization of the volatiles present in the uvaia pulp (*Eugenia pyriformis* Cambess) using the solid phase microextraction method. The volatiles compounds of uvaia were evaluated by solid phase microextraction method allowed the identification of several compounds such as esters, monoterpenes, sesquiterpenes and diterpene.

Resumo/Abstract

Um dos principais atributos para a aceitação do produto pelo consumidor é o sabor, que é dado pela combinação de várias substâncias voláteis. Os compostos responsáveis pelos sabores são extremamente importantes para a indústria, e são utilizados na elaboração de alimentos, bebidas e até cosméticos¹. Métodos de análise de tais compostos usando solventes consomem muito tempo e requerem grandes quantidades de amostra. A microextração em fase sólida por *headspace* combinada com a cromatografia gasosa-espectrometria de massa (SPME-HS/GC-MS) provou ser uma técnica adequada para o estudo de voláteis². A uvaia (*Eugenia pyriformis* Cambess) é considerada uma fruta exótica, de aroma intenso e agradável, e de sabor adocicado e ácido. Foi utilizada a princípio por indígenas guaranis como fonte alimentar e medicinal³, e apresenta grande potencial para industrialização, sendo consumida em sucos, sorvetes, licores, doces e iogurtes. O objetivo deste trabalho foi investigar os constituintes voláteis de uvaia pertencentes à região de Sinop/MT. Coletaram-se aleatoriamente 43 frutos inteiros, da safra 2018, de uma matriz de *Eugenia pyriformis* Cambess. As análises foram realizadas utilizando a polpa e o método de microextração em fase sólida no modo *headspace* (SPME-HS) e sistema GC-MS com analisador do tipo íon-trap. Para a microextração foi utilizada a fibra PDMS/DVB (Polidimetilsiloxano/Divinilbenzeno). Pesou-se 0,5 gramas da polpa para avaliação dos compostos voláteis, que foram colocadas em frascos de *headspace*, aquecidos a 93 °C com agitação de 21 rpm, e tempo de exposição da fibra de 26 minutos. Foram identificados 30 compostos, 2 álcoois, 2 aldeídos, 2 ésteres, 1 cetona, 1 ácido carboxílico, 2 monoterpenos, 1 diterpeno e 19 sesquiterpenos. Em estudos anteriores sobre a polpa de uvaia foram encontrados compostos das classes químicas identificadas, assim como o sesquiterpeno ser a classe química abundante. Sesquiterpenos apresentam atividade antimicrobiana e antioxidante, portanto podem estar contribuindo com as propriedades antimicrobiana e antioxidante apresentada pelo óleo essencial de uvaia.

Referências:

¹Bicas, J. L.; Molina, G.; Dionísio, A. P.; Cavalcante Barros, F. F.; Wagner, R.; Maróstica Jr., M. R.; Pastore, G. M. **Volatile constituent of exotic fruits from Brazil**. Food Research International. v.44, n. 7, 1843-1855, 2011.

²Mesquita, P. R. R.; Nunes, E. C.; Dos Santos, F. N.; Bastos, L. P.; Costa, M. A. P. C.; Rodrigues, F. M.; De Andrade, J. B. **Discrimination of *Eugenia Uniflora* L. biotypes based on volatile compounds in leaves using HS-SPME/GC-MS and chemometric analysis**. Microchemical Journal, v. 130, 79–87, 2017.

³Lamarca, E. V.; Lamarca, E. T.; Barbedo, C. J. **De 'Ybaaia a Uvaia, a trajetória histórica de uma de nossas mais importantes espécies arbóreas tropicais**. n. 30, 2012.

Agradecimentos/Acknowledgments

UFMT, UFSJ e UFMG.

Área: MAT

Nº de Inscrição: 49329

Síntese e caracterização de um substituto para o composto bis-gma: componente de resina e selante dentário

Gustavo Sandro Corrêa (PG)¹, Rogério Aparecido Gariani (PQ)¹, Marcia Margarete Meier (PG)¹

gustavo.sadroc@gmail.com; rogerio.gariani@udesc.br

¹ Laboratório de Síntese e Catálise (SinCa) - Departamento de Química, Centro de Ciências Tecnológicas, Universidade do Estado de Santa Catarina – UDESC;

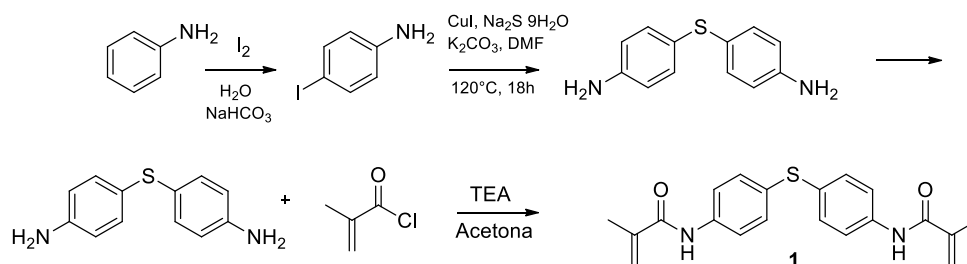
Palavras Chave: Novos Monômeros, Resinas Odontológicas, Novos Materiais.

Highlights

Synthesis and characterization of a substitute for the Bis-Gma compound: resin component and dental sealant. An attractive approach in organic for the complete synthesis of a new Bis-GMA free dental resin. The mechanical properties were studied by measuring the flexural modulus, water sorption and microhardness as well.

Resumo/Abstract

Com base no crescente aumento nos estudos acerca de novos materiais odontológicos com propriedades físico-químicas superiores ¹ e considerando o atual interesse em encontrar materiais livres do bisfenol A e derivados em função da sua potencial toxicidade, o presente trabalho buscou estudar a síntese e as propriedades de um novo monômero, partindo de precursores de fácil acesso e síntese simples, tendo como premissa básica, ser insento do composto bisfenol A. Um dos compostos sintetizados foi o TDA **1** que foi sintetizado pela rota de síntese representada pelo esquema 1.



Esquema 1: Síntese do monômero TDA

Para realizar os estudos acerca dos compostos de interesse, dois tipos de corpos de prova foram preparados para o grupo controle (Bis-GMA) e para o grupo experimental (TDA) à partir da fotopolimerização das formulações elaboradas contendo estes monômeros. Suas propriedades mecânicas como resistência à flexão e microdureza foram comparadas. Estudaram-se também as suas propriedades físico-químicas como solubilidade, absorção de água e grau de conversão. As caracterizações foram realizadas à partir de análises de RMN, CG-EM e IR.

Agradecimentos/Acknowledgments

A Universidade do Estado de Santa Catarina - UDESC

¹Ferracane, J. Resin composite—State of the art. Dental Materials, p.29-38, 2011

Área: INO

(Inserir a sigla da seção científica para qual o resumo será submetido. Ex: ORG, BEA, CAT)

Nº de Inscrição: 01373

(Inserir o número de inscrição do autor que fez a submissão)

Photocatalytic degradation of emerging inorganic pollutants (EOPs) in water using kaolinite-Fe-TiO₂

Michelle Saltarelli (PQ),^{1*} Leticia B. Melo (IC),¹ Larissa Bonfim (IC),¹ Emerson H. de Faria (PG),¹ Miguel A. Vicente (PQ),² Raquel Trujillano (PQ),² Vicente Rives (PQ),² Antonio Gil (PQ),³ Sophia Korili (PQ),³ Katia J. Ciuffi (PQ)¹

michelle.saltarelli@unifran.edu.br

¹Laboratório de Pesquisa Sol-Gel - Universidade de Franca, Av. Dr. Armando Salles Oliveira, 201 Pq. Universitário, CEP 14.404-600, Franca, SP; ²GIR-QUESCAT, Dep. Química Inorgánica, Univ. Salamanca, 37008 Salamanca, ³INAMAT-Dep. Ciencias, Univ. Pública de Navarra, 31006 Pamplona.

Keywords: kaolinite, acetylsalicylic acid, ibuprofeno, photocatalytic degradation

Highlights

- ✓ Photocatalyst precursor was prepared by sol-gel involving kaolinite, a Ti-alkoxide and a Fe-salt, and calcined at various temperatures. The characterization proved the presence of titanium and iron in the kaolinite matrix.
- ✓ Functionalization occurred via the aluminol and silanol side groups of the clay.
- ✓ The heating of the material leads to the formation of distinct structures with a greater or lesser degree of distortion of the iron ions, influencing the catalytic role in the degradation of EOPs.
- ✓ The prepared materials have wide potential to be used as photocatalysts in the degradation of ibuprofen and acetylsalicylic acid.
- ✓ The photocatalytic degradation of ibuprofen and acetylsalicylic acid under UV light was efficient.
- ✓ The presence of Fe(III) ions proved to be essential to increase the catalytic efficiency of the solids.

Resumo/Abstract

A composite kaolinite-Fe-TiO₂ was synthesized by the sol gel process, by the hydrolysis of a titanium alkoxide (in ethanolic medium) in the presence of kaolinite and iron (III) ions. The proportion iron/titanium was 20%. The obtained material was heated in air at 400, 700 and 1000 °C. The characterization by thermal analysis showed that the mass loss of the synthesized material was lower than for purified kaolinite, due to the lower amount of kaolinite in it after addition of the alkoxide. The infrared absorption spectrum of the sample calcined at 700°C showed the appearance of two bands typical of Fe-O and Fe-O-Ti at 463 and 660 cm⁻¹, suggesting that functionalization occurred at the lateral silanol and aluminol groups of the kaolinite. Scanning electron microscopy showed morphological changes in the materials due to the presence of iron and a retardation in anatase and rutile phase formation, the presence of TiO₂ being confirmed by the EDS spectra. Resonance electron paramagnetic spectroscopy evidenced signs of distortion of iron ions in the matrix, providing considerable evidence that Fe(III) ions are bound to the clay. Nitrogen adsorption-desorption isotherms showed that the presence of iron ions influenced the surface area of the materials. pH_{pzc} measurements showed that the materials present good characteristics for the removal of both cationic and anionic species. Finally, degradation tests of ibuprofen and acetylsalicylic acid EOPs were performed. The tests for ibuprofen were carried out in the absence and presence of light and catalyst, the results showed that the materials have a great potential to be used as photocatalysts for ibuprofen removal. The degradation of acetylsalicylic acid was studied in the presence of light using the solids calcined from 400 to 1000°C. Intermediate products formed before complete demineralization of acetylsalicylic acid were analyzed by HPLC, infrared and UV-Vis spectroscopies. The presence of Fe ions in the catalyst proved to be essential to increase the efficiency of the catalysts.

Agradecimentos/Acknowledgments

FAPESP and USAL (2016/50322-2). MINECO and ERDF (MAT2016-78863-C2-R).

Electronic nose based on ionogel doped with iron (III) oxide particles applied to detection of honey adulteration

Wellington B. Gonçalves (PG),¹ Wanderson S. R. Teixeira (PG),¹ Juliano G. Pereira (PQ),² Jonas Gruber (PQ),¹

wellingtonbg@usp.br

¹Departamento de Química Fundamental, IQUSP; ²Departamento de Higiene Veterinária e Saúde Pública, FMVZ-UNESP Botucatu

Key words: *Electronic nose, gas sensor, ionogel, honey*

Highlights

E-nose based on Fe₃O₄ doped ionogels, composed by an ionic liquid in a biopolymer. E-nose applied in the detection of adulteration of honey. Low-cost, reduced analysis time and high hit rate achieved.

Abstract

Electronic nose (e-nose) is a device composed of an array of gas sensors capable of identifying simple or complex odours. Among the materials used as sensitive layer, ionogels appear as a cheap alternative to semiconductor metal oxides and conducting polymers (CP). In a previous communication¹ we described a CP based e-nose capable of the classification of several honeys of different flowers. In this work we present an original e-nose composed of four gas sensors prepared from a single ionogel (EMIMDCA confined in bovine skin gelatin) doped with different concentrations of Fe₃O₄ particles, applied in the detection of honey adulteration, being able to differentiate 6 types of commercial honeys from 11 adulterations with a score rate > 94%. Figure 1 shows the PCA (Principal Components Analysis) obtained from the e-nose responses to 17 samples of real and fake honeys, showing the separation between real honey and adulterated honey.

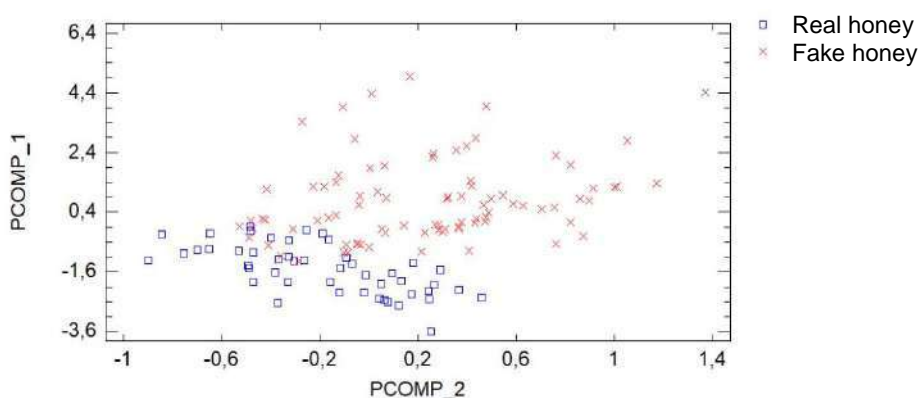


Figure 1: Results of PCA of six samples of honey and eleven honey adulteration.

Acknowledgments

The authors thank CNPq for their financial support (400740/2014-1; 306147/2016-5; 165186/2015-1).

¹ E.Y. Yamauchi et al., 35ª RA-SBQ, BEA011, 2012.

Área: ELE

Nº de Inscrição: 01376

Biomimetic electrochemical sensor based on hemin and carbon nanotubes for nitrofurazone electrochemical behavior study

Charles de L. Brito (PG)^{1*}, Elizabeth I. Ferreira (PQ)¹, Mauro A. La-Scalea (PQ)².

charles.brito@usp.br*

¹Departamento de Farmácia, FCF-USP; ²Departamento de Química, UNIFESP-Diadema

Keywords: Biomimetic sensor, Carbon nanotubes, Hemin, Nitro-radical, Nitrofurazone, Cyclic voltammetry.

Highlights

The hemin adsorption, an iron (III) porphyrin present in heme containing proteins, combined with carbon nanotube to prepare a new biomimetic sensor for nitrofurazone reduction mechanism study.

Resumo/Abstract

Nitrofurazone (NF), a drug belonging to the class of nitroheterocycles, has antichagasic activity by enzymatic bioreduction of the nitro group. Hydroxylamine and nitro anion radical are the intermediates that interact with biomacromolecules which compromises some vital functions for the maintenance of the parasite. In recent years, effective studies on reactivity of biomimetic compounds, involving transition metals, has progressed to in order to develop new, more sensitive and selective catalytic methods. The nitroheterocycles bioreduction is promoted by nitroreductase enzymes and a sensor containing a mimetic substance can affect the molecular recognition producing the nitro anion radical, simulating the conditions observed *in vivo*. The hemin (HEM) is being studied to enable this catalytic function performance. Moreover, HEM is used in association with multiple walled carbon nanotubes (MWCNT) functionalized with carboxyl groups, as an approach to improve the performance of these voltammetric sensors¹. Cyclic voltammograms were recorded by using an electrochemical cell with three electrodes: Ag/AgCl, Pt and modified glassy carbon electrode with functionalized CNT and HEM (GCE-CNT-HEM). Figure 1 shows the voltammograms recorded for NF 1.0×10^{-3} mol L⁻¹ in phosphate buffer (pH = 9.02) with the freshly prepared biomimetic sensor using 1,3 dioxolane as dispersant solvent. The 3:1:1 ratio was employed considering NTC:HEM:dioxolane mixture. The voltammetric signals concerning the reduction peaks Ep,c₁ and Ep,c₂ are related to the hydroxylamine intermediates and the RNO₂/RNO₂⁻ reversible redox pair, respectively. It can be observed that the same signals were detected in both kinds of electrodes, being the signal obtained by GCE-CNT-HEM current signals is increased, showing that the use of this sensor promoted a greater sensitivity of the signals. Thus, it is possible to employ this sensor for stability study and decomposition kinetics of the nitro anion radical.

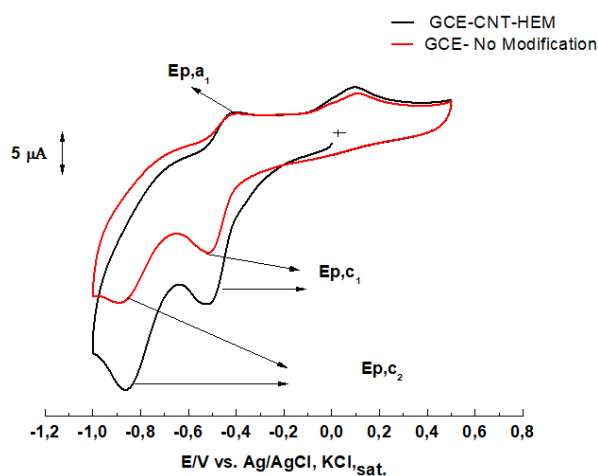


Figure 1. Cyclic Voltammograms at pH 9.02, [NF] = 1.0×10^{-3} mol L⁻¹.

¹Rezael, B.; Sensors Actuators B, 196, 539-545, 2014.

COMPOSIÇÃO NUTRICIONAL DE MAÇÃS DAS CULTIVARES PRIMÍCIA E PRINCESA

Bianca Schweitzer (PQ)¹, Ricardo Sachini (PG)², Vera L. Scapin (IC)³, José L. Petri (PQ)¹

biancaschweitzer@epagri.sc.gov.br

¹EPAGRI – Empresa de Pesquisa Agropecuária e Extensão Rural de Santa Catarina, Estação Experimental de Caçador, 89500-000, Caçador, SC; ²UDESC - Universidade do Estado de Santa Catarina. Avenida Luís de Camões, 2090, 88520-000, Lages/SC; ³ Universidade Alto Vale do Rio do Peixe – UNIARP, Rua Victor Baptista Adami, 800 - Centro, Caçador - SC, 89500-000;

Palavras-Chave: *Malus domestica*, teores minerais, qualidade de fruto, pós-colheita.

Highlights

NUTRITIONAL COMPOSITION OF CULTIVAR APPLES PRIMICIA AND PRINCESA

Determined the concentration of N, P, K, Ca, Mg. Apples of the analyzed presented a predisposition to the occurrence of physiological disturbances in the storage period.

Resumo/Abstract

A maçã é considerada uma das frutas mais consumidas mundialmente, porém no Brasil o consumo anual por pessoa ainda é considerado muito baixo. Com o aumento da produção por área plantada e a colheita concentrada nos primeiros meses do ano, os frutos ficam longos períodos armazenados em câmaras frias para que sejam ofertados durante todo o ano. A análise de frutos objetiva avaliar o equilíbrio nutricional próximo à colheita, permitindo prognosticar as possíveis ocorrências de distúrbios fisiológicos e auxiliar na tomada de decisão quanto ao destino dos frutos na colheita. Inúmeros distúrbios fisiológicos (*bitter pit*, degenerescência interna da polpa, etc) são atribuídos a desequilíbrios nutricionais, destaque ao nutriente cálcio. Teores baixos de cálcio prejudicam a estabilidade das paredes celulares e a permeabilidade seletiva das membranas, resultando em danos e necrose nos tecidos dos frutos. A composição nutricional dos frutos, especialmente o teor de Ca e as relações N/Ca, K/Ca e (K+Mg)/Ca, tem relação com a capacidade de conservação dos frutos e a ocorrência de distúrbios durante o armazenamento e a comercialização. Este trabalho teve como objetivo avaliar a composição mineral de maçãs das cultivares primícia e princesa no ciclo 2017/2018 em três porções do fruto. O experimento foi conduzido com frutos provenientes de um pomar experimental, localizado na Estação Experimental da Epagri, município de Caçador, SC. O delineamento experimental utilizado foi inteiramente casualizado, com esquema fatorial 3x2 com seis repetições, constituídas por 10 frutos cada. Determinaram-se os teores de Nitrogênio (N), Fósforo (P), Potássio (K), Cálcio (Ca) e Magnésio (Mg). Para a avaliação dividiu-se os frutos em três porções: Polpa+casca: fatia longitudinal de 1 cm de espessura, sem a parte central do carpelo; Polpa: fatia longitudinal de 1 cm de espessura, sem a parte central do carpelo e sem casca; e Casca: fina fatia da epiderme de todos os frutos que constituíam as repetições. As amostras foram solubilizadas em ácido sulfúrico concentrado e peróxido de hidrogênio 30%, submetidas a aquecimento em 150° C por 2 horas. Após, foram realizadas as diluições para a determinação dos elementos K, Ca e Mg com a leitura em espectrofotômetro de absorção atômica; e para os teores de P em espectrofotômetro UV-VIS. Os teores de N foram determinados pelo método Kjeldahl. Posteriormente as relações N/Ca, K/Ca, (K+Mg)/Ca também foram calculadas. Realizou-se à análise de variância (ANOVA), e as médias comparadas pelo teste de Scott-Knott a 5% de significância através do programa estatístico SISVAR, versão 5.6. As cultivares Primícia e Princesa apresentaram maiores teores dos nutrientes N, P, K e Mg na casca em comparação com a polpa. Na 'primícia' por exemplo, as concentrações de Ca e Mg na casca foi 82,6 e 178,0 mg Kg⁻¹, respectivamente, enquanto na polpa foi 26,3 e 40,3 mg Kg⁻¹. Na 'princesa', as concentrações de N e K na casca foi 767,2 e 1221,8 mg Kg⁻¹, respectivamente, enquanto na polpa foi 414,2 e 1181,7 mg Kg⁻¹. De acordo com a análise da porção polpa+casca (mais usadas para prever distúrbios fisiológicos pós-colheita), maçãs das cultivares primícia e princesa, apresentaram baixa concentração de Ca (36,9 e 25,9 mg Kg⁻¹, respectivamente) e elevada concentração de K (1102,9 e 1080,7 mg Kg⁻¹, respectivamente). Assim, as relações entre os nutrientes, N/Ca, K/Ca e (K+Mg)/Ca estavam acima do recomendado pela literatura para a armazenagem de frutos. Conclui-se que, 'Primícia' e 'Princesa' apresentam predisposição à ocorrência de distúrbios fisiológicos no período de armazenamento devido à baixa concentração de Ca e elevada concentração de Mg, K e das relações (K+Mg)/Ca e K/Ca. Todos os minerais avaliados tinham concentração maior na casca quando comparado à polpa.

Batch and continuous flow transformation of cyanohydrins: synthesis of 1,2-aminoalcohols

Juliana C. Thomas (PG),¹ Ricardo Labes (PQ)², Steven V. Ley,² Leandro Piovan (PQ)^{1*}

julianathomas@ufpr.br, *lpiovan@quimica.ufpr.br ¹ Laboratório de Síntese Química e Enzimática - LaSQuE
Department of Chemistry, Universidade Federal do Paraná - UFPR, Curitiba – Paraná – Brazil

² Department of Chemistry, University of Cambridge, Cambridge, United Kingdom

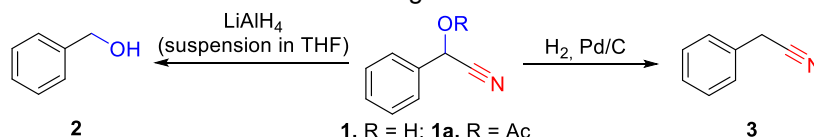
Keywords: Cyanohydrins, 1,2-Aminoalcohols, Continuous Flow

Highlights

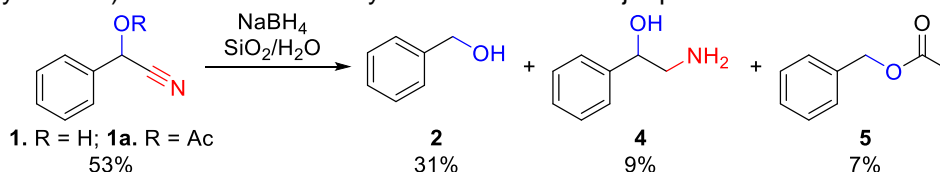
Synthesis of 1,2-aminoalcohols; Cyanohydrin reduction in batch and continuous flow modes.

Abstract

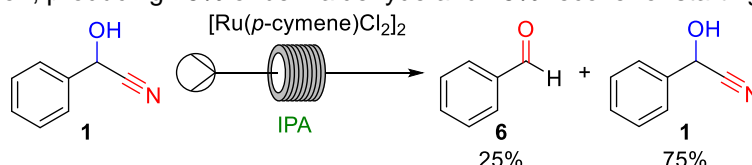
1,2-aminoalcohols are versatile building blocks to biologically active compounds and widely used as chiral auxiliaries in asymmetric synthesis.¹ One way to synthesize 1,2-aminoalcohols is via reduction of cyanohydrins. However, cyanohydrins can undergo cyanide elimination in the presence of a base, such as hydride. In this context, the reduction of model compounds **1** and **1a** was investigated in this work. Reduction with LiAlH₄ suspension in THF produced benzyl alcohol and hydrogenation gave benzyl nitrile. No formation of 1,2-aminoalcohol was observed for both methodologies.



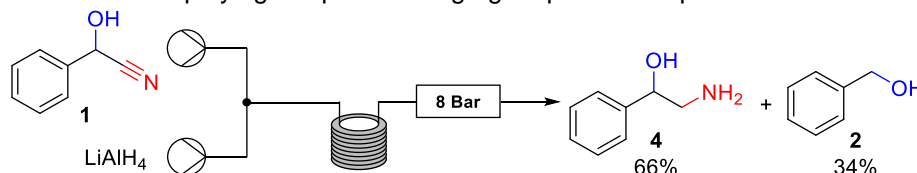
Reduction with NaBH₄ in wet SiO₂ produced the desired aminoalcohol (**4**), however, very poor conversion (determined by GC-MS) was observed. Benzyl alcohol was the major product of this reaction.



Since the transformation of cyanohydrins in continuous flow mode is still under exploited in literature and it is known that continuous flow can offer several advantages over batch reactions,² continuous flow hydrogenation was also evaluated, employing isopropanol as hydrogen source. However, only cyanide elimination was observed in this reaction, producing 25% of benzaldehyde and 75% recover of starting material (NMR yield).



Finally, reduction with a solution of LiAlH₄ in THF was also tested. Reaction employing 1 eq of reducing agent produced only benzyl alcohol, however, it was possible to produce the desired 1,2-aminoalcohol in continuous flow mode when 10 eq of LiAlH₄ were employed, resulting in 66% conversion and benzyl alcohol (**2**) as byproduct. Batch reactions employing 1 eq of reducing agent produced up to 80% conversion to compound **4**.



Acknowledgments

LaSQuE, UFPR, University of Cambridge, CNPQ, CAPES, Fundação Araucária.

¹ a) Géant, P. Y.; *et al. Tetrahedron: Asymmetry*, **2016**, 27, 22-30. b) Dong, Y.; Liu, G. *J. Org. Chem.* **2017**, 82, 3864-3872.

² a) Ley, S. V.; *et al. Angew. Chem. Int. Ed.* **2015**, 54, 3449-3464. b) Ley, S. V. *Chem. Rec.* **2012**, 12, 378-390.

Área: ORG

Nº de Inscrição: 01383

Switching Diastereoselectivity in Catalytic Enantioselective (3+2) Cycloadditions between Azomethine Ylides and Activated Alkenes

Guilherme S. Caleffi (PG),⁽¹⁾ Olatz Larrañaga (PQ),^(2,3) Marcos Ferrándiz-Saperas (PG),^(3,4,5) Paulo R. R. Costa (PQ),⁽¹⁾ Carmen Nájera (PQ),^(3,4) Abel de Cózar (PQ),^(2,3,6) Fernando P. Cossío (PQ),^(2,3) and José M. Sansano (PQ).^(3,4,5)

guilherme.caleffi@gmail.com; prrcosta2011@gmail.com

¹Instituto de Pesquisas de Produtos Naturais, UFRJ; ²Universidad del País Vasco; ³Centro de Innovación en Química Avanzada; ⁴Universidad de Alicante; ⁵Institute of Organic Synthesis, UA; ⁶IKERBASQUE.

Key Words: Diastereodivergence, asymmetric catalysis, 1,3-dipolar cycloadditions.

Highlights

Catalytic diastereodivergent 1,3-DC. Cu(I) or Ag(I)-Segphos derived complexes. Diastereo- and enantioselectivities justified by DFT calculations.

Abstract

The diastereodivergent asymmetric catalysis have become very important to synthetic organic chemistry, since it allows to access all isomers of a target compound by just modulating the chiral Lewis acid or the structure of the organocatalysts.¹ In this work, we report the catalytic diastereodivergent synthesis of polysubstituted pyrrolidines through 1,3-dipolar cycloaddition (1,3-DC) involving chiral Segphos derived ligands **1** and **2** with Cu(I) or Ag(I) salts (Figure 1).

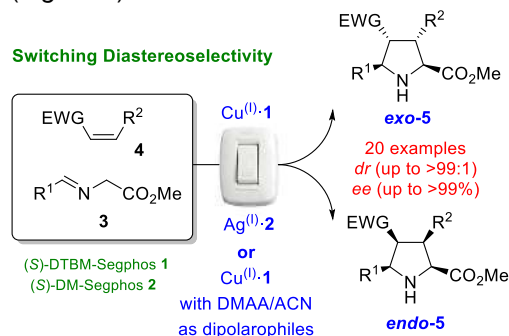


Figure 1. Diastereodivergent [3+2]-cycloaddition

After an extensive reaction optimization, the CuOTf·**1** complex was found as the most suitable to obtain the almost pure **exo-5** adducts (15 examples) in a very high enantiomeric excess (94 - >99% ee) employing a broad scope of iminoesters (**3**) and dipolarophiles (**4**). Surprisingly, a stereodivergence was produced with DMAA and ACN as dipolarophiles, obtaining the **endo-5** adducts in excellent ee (>99%). Moreover, the use of silver salts with ligands **1** and **2** switch the diastereoselectivity to **endo**-preference. A series of **endo-5** adducts (5 examples) were obtained as major or unique diastereoisomer using the

AgSbF₆·**2** complex in the reaction between **3** (R¹= Ph) and different dipolarophiles **4** with good to excellent ee (up to 99%).²

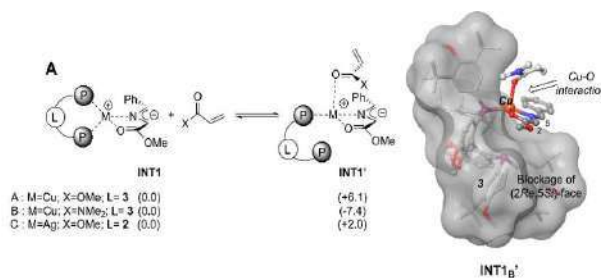


Figure 2. (A) Relative Gibbs free energies (kcal.mol⁻¹) (B) Main geometrical features of the reactive complex INT1_B'

DFT calculations of the TS, run in a B3LYP-D3/6-31G* & LANL2DZ level, justified perfectly this behavior Cu(I)-*exo*/Ag(I)-*endo* predicting the enantioselectivity experimentally obtained (Figure 2). In addition, the dipolarophile induced diastereodivergence was justified by the alteration of the coordination of the Cu(I) sphere underwent in the presence of a high field ligand as an amido or a nitrile group. The change of a bidentated mode to a monodentated fashion of the bisphosphane-Cu(I) complex only could be achieved by this type of ligands in low spin complexes (Figure 2, INT1_B').²

¹ I. P. Beletskaya, C. Nájera, M. Yus, *Chem. Rev.* **2018**, *118*, 10393.

² G.S. Caleffi, O. Larrañaga, M. Ferrándiz-Saperas, P.R.R. Costa, C. Nájera, A. Cózar, F.P. Cossío, J.M. Sansano, *Submitted*.

Acknowledgments

We gratefully acknowledge financial support from Brazilian and Spanish institutions CAPES, CNPq, FAPERJ and UFRJ (Brazil), MINECO, AEI, FEDER-EU, Generalitat Valenciana, Eusko Jaurlaritza and UA (Spain).

A Straightforward Enantioselective Synthesis of Isoflavanones

Francisco V. Gaspar (PG),^{1*} Guilherme S. Caleffi (PG),¹ Paulo C. Trajano (IC),¹ Jorge L. O. Domingos (PQ)², Paulo R. R. Costa (PQ)¹

¹Instituto de Pesquisas de Produtos Naturais, UFRJ; ²Departamento de Química, UERJ

*fgaspar@gmail.com; prrcosta2011@gmail.com

Key words: ATH-DKR, Ruthenium-catalyzed, Acylation, Triflic Acid, Phenols, Phenylacetic acids.

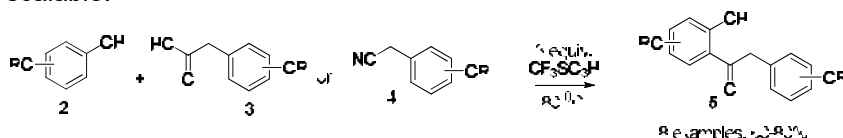
Highlights

Acylation of phenols with phenylacetic acids or phenylacetonitriles in triflic acid. Synthesis of deoxybenzoins. Enantioselective synthesis of isoflavanones from its racemate under ATH-DKR conditions.

Abstract

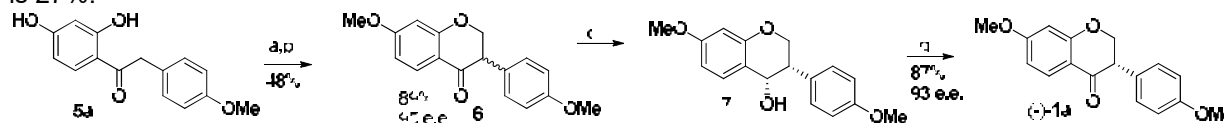
Isoflavanones (**1**) form a subgroup of isoflavonoids comprising products with interesting biological activities and are also useful intermediates for the synthesis of other sub-class of isoflavonoids.

In our understanding the most direct approach for the synthesis of isoflavonoids core is through the use of deoxybenzoins (**5**) as intermediates. It worth to mention that these compounds are also natural, being isolated from plants and marine sources and present estrogenic properties.² Thus we developed a new acylation condition to obtain **5** employing neat phenols (**2**) and phenylacetic acids (**3**) or phenylacetonitriles (**4**) in the presence of 3 equiv. of TfOH. This methodology has led to deoxybenzoins with several patterns of substitution in good to excellent yields and smaller reaction times compared to other literature procedures¹ (Scheme 1). It is worth noticing that TfOH is a superacid easy to handle and store, making the overall procedure safe and scalable.



Scheme 1. Acylation of phenols with phenylacetic acids or phenylacetonitriles.

In Scheme 2 is shown the transformation of **5a** into the natural product (-)-**1a**, in 4 steps. Selective O-methylation of **5a** followed by the carbon homologation with formaldehyde in aqueous NaOH led to the desired racemic isoflavanones **6** in 48% yields for the two steps. Under similar conditions used in asymmetric transfer hydrogenation in dynamic kinetic resolution conditions,² **7** was obtained in good chemical yield (89%) and 95 e.e. from racemic **6**. After oxidation of the Isoflavanol **7** in the presence of hypervalent Iodine species (PIDA), (-)-**1a** was obtained in 87% yield and 93 e.e.. The overall yield for this five steps synthesis of (-)-**1a** synthesis is 27%.



Scheme 2. Enantioselective synthesis of isoflavanones (-)-**1a**. a) MeI, K₂CO₃, acetone, reflux 18 h. b) (CHO)_n, NaOH, H₂O, 80 °C 48 h. c) Ru complex 5mol%, TEA/HCOOH 5:2, AcOEt 45°C 18h. d) PIDA 1.1 equiv, DCE r.t 2h.

Work is now in progress aiming the total enantioselective synthesis of other isoflavanones as well as their use as intermediates to prepare other sub-class of isoflavonoids such as isoflavans and pterocarpan.

References

¹ Vontzalidou, A. *et col* **Bioorganic & Medicinal Chemistry Letters**, v.22, p. 5523-5526; 2012.

² Fokialakis, N. *et col*. **Chemistry & Biology**, v.11, p.397-406, 2004

³ Qin, T. *et col*. **Organic Letters**, v.19, p. 2981-2984, 2017

Acknowledgment

Financial support from Brazilian agencies CAPES, CNPq, FAPERJ and UFRJ is acknowledged.

Synthesis and characterization of hydrogel from glycerol and citric acid: adsorption and reducing properties

Fernanda G. Mendonça (PG),^{1*} Izadora R.S. Menezes (PG),¹ Rochel M. Lago (PQ)¹

nandagm@ufmg.br

¹Departamento de Química, ICEx, UFMG, Belo Horizonte, MG - Brasil

Palavras Chave: *hydrogels, glycerol, citric acid, reducing agent.*

Highlights

- A slow polymerization between glycerol and citric acid resulted in hydrogels;
- The hydrogels swell when in contact with water in different pHs;
- The hydrogels can act as reducing agents, *i.e.* reduction of Mn(VII) and Cr(VI).

Abstract

Hydrogels were obtained via a limited/slow polymerization of glycerol (byproduct of biodiesel) and citric acid, in mild conditions (140 °C, 2h). CHN, FTIR, TG and water absorption indicated the formation of a crosslinked polyester composed by glycerol: citric acid in a 1:1 molar ratio. A schematic representation of the obtained polymer is shown in Figure 1.

Studies using indigo carmine showed the adsorption of the dye with concomitant reduction to its leuco form. This feature was also preliminary investigated in aqueous solutions of KMnO_4 and $\text{K}_2\text{Cr}_2\text{O}_7$. In the case of KMnO_4 , UV-Vis and XRD indicated the reduction of permanganate to MnO_2 . For $\text{K}_2\text{Cr}_2\text{O}_7$, FTIR indicated the reduction of Cr(VI) likely to Cr(III). These results show that the hydrogels can act as reducing agents probably due to the presence of free carboxylic groups on its structure, coming from citric acid (Figure 1).

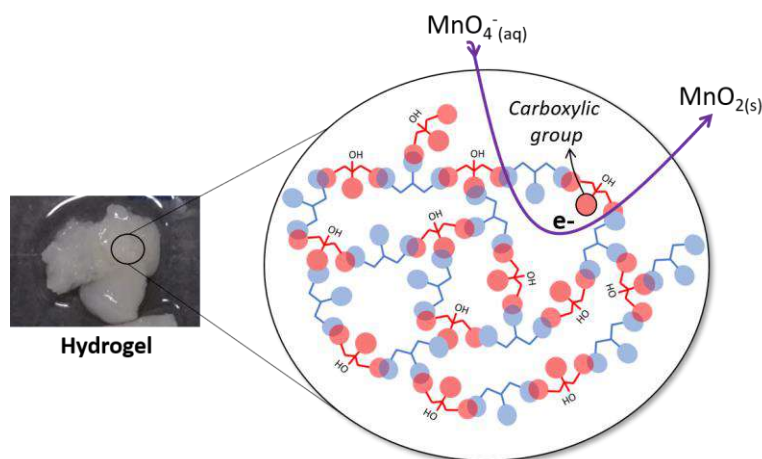


Figure 1. Image of a hydrogel obtained and a schematic representation of its structure, which showed the ability of adsorb species like MnO_4^- and reduce them due to the presence of free carboxylic groups.

More detailed tests are being conducted to quantify the amount of reduced ions and to determine the mechanism of the reactions.

Acknowledgments

The authors thank FAPEMIG, CNPq, CAPES and INCT-Midas.

WEB: An efficient Solvent for the Synthesis of Diorganyl Disulfides from Thiols

Lucas M.C. Böhs (IC),¹ Andrielli Leitemberger (PG),¹ Clarissa H. Rosa (PG),¹ Fábio Z. Galetto (PQ),¹ Marcelo Godoi (PQ).^{1*}

marcelogodoi@furg.br

¹ Universidade Federal do Rio Grande – FURG, campus Santo Antônio da Patrulha.

Keywords: Disulfides, WEB, Agro-Waste, Eco-friendly, Organosulfur.

Highlights

Water Extract of Banana Peel Ash (WEB) was successfully employed as an eco-friendly solvent for the oxidation of thiols, affording the corresponding products in reasonable yields.

Abstract

Diorganyl disulfides have emerged as an attractive class of compounds which have useful synthetic¹ and biological applications.² On the other hand, water extract agro-waste ashes have attracted particular interest in modern synthetic organic chemistry. Particularly, Water Extract of Banana Peel Ash (WEB) has been recently used as catalytic system.³ In line with our interest in organosulfur chemistry, herein we have described an efficient protocol for the preparation of diorganyl disulfides using WEB as an oxidative system (Scheme 1).

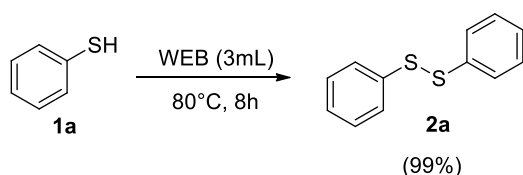


R = Aryl, Alkyl

Scheme 1. Synthesis of diorganyl disulfides promoted by WEB

Results and Discussion

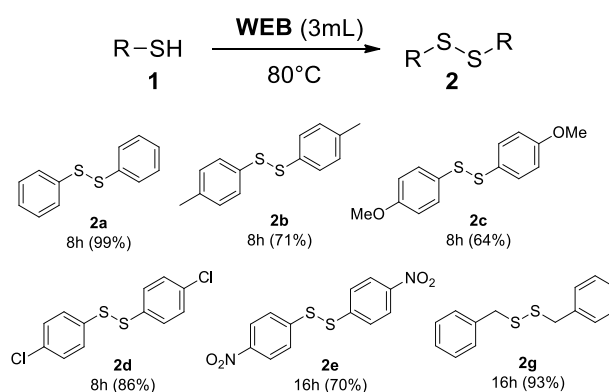
First of all, the influence of several parameters on the reaction was investigated by using benzenethiol **1a** and WEB as a solvent. In this regard, the best condition found was using 3 mL of WEB at 80 °C and stirring the reaction for 8h, affording the desired product **2a** in 99% yield (Scheme 2).



Scheme 2. Optimization of the reaction conditions.

Having optimized the reaction conditions, we then investigated the scope of the present protocol. Therefore, we have prepared different disulfides, as illustrated in the Figure 1.

Figure 1. Synthesis of different disulfides.



Conclusion

In summary, we have developed an eco-friendly and simple methodology for the oxidation of thiols into diorganyl disulfides. Generally, the desired products were obtained in very good yields, employing WEB as an oxidant media. It should be noted that the study for expanding the scope of the reaction as well as the recyclability of WEB are still in progress in our laboratory.

Acknowledgments

CNPq, CAPES, FAPERGS-Pronex, CIA-FURG and PET-FURGSAP

References

- Azeredo, J. B.; Godoi, M.; Schwab, R. S.; Botteselle, G. V.; Braga, A. L. *Eur. J. Org. Chem.* **2013**, 5188-5194.
- Shang, J.; Wang, W.-M.; Li, Y.-H.; Song, H.-B.; Li, Z.-M.; Wang, J.-G. *J. Agric. Food Chem.* **2012**, *60*, 8286-8293.
- Kumar, N. S.; Bheeram, V. R.; Mukkamala, S. B.; Rao, L. C.; Vasantha, R. *ChemistrySelect* **2018**, *3*, 1915-1918.

Área: INO

Nº de Inscrição: 01390

Buffer-dependent and ligand effect in the nitrosyl-nitrite interconversion of ruthenium complexes

Rafaella Rebecchi Rios (PG)^{1#}, Phamilla G. Sousa Rodrigues (PQ)¹, Juliana C. Biazotto (PQ)¹, Roberto Santana da Silva (PQ)^{1*}.

#rrrios@usp.br; *silva@usp.br

¹Departamento de Química e Física Biológica, Faculdade de Ciências Farmacêuticas de Ribeirão Preto – Universidade de São Paulo, Brasil;

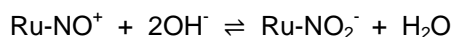
Key Words: Nitrosyl ruthenium complexes, NO, kinetics.

Highlights

The present study shows the indirect influence of *cis*-ligands in the conversion of NO⁺ to NO₂ dependent of the withdrawal effect of *p*-substituent of the pyridine ring as well the buffer solution.

Abstract

The electrophilic reactions of the nitrosyl ligand bonded to ruthenium(II) have been known for a long time and constitute one of its most important reactivity modes. On the other hand, the electrophilicity of nitrosyl ruthenium complexes has been proposed to be important in the process of NO uptake, release, and biochemical pathway. The electrophilic reactions of bound nitrosyl are those involving OH⁻ as the nucleophile (eq 1), with formation of Ru^{II}-NO₂ bond.



We have found that the reaction should be better described as containing the fragment Ru^{II}-ONO. We present here a systematic kinetic and mechanistic study of *cis*-[Ru(bpy)₂(L)(NO⁺)]³⁺ (bpy = 2,2'-bipyridine and L = 4-picoline (4-pic); Pyridine (py); Isonicotinamide (ISN); and 4-acetylpyridine (4-acpy)) with OH⁻ and the kinetic buffer effect.

The synthesis of all nitrosyl ruthenium complexes *cis*-[Ru(bpy)₂(L)(NO⁺)]³⁺ was conducted as previously described¹. For the kinetics, repeated UV-Vis measurements of each compound (5x10⁻⁵M) in several buffers (potassium biphthalate, phosphate, and imidazole buffer) all at 0.01M concentration, and ionic strength of 1M) were taken over time. The reaction rate (K_{obs}) of the Ru^{II}-NO⁺ to Ru^{II}-NO₂ conversion was obtained by Guggenheim method, and the values for each compound and buffer are presented in the table 1.

As a result, the reaction rates follows the series 4-acpy>ISN>PY>4-pic. This sequence is in accordance to the withdrawal ability of its substituent, and correlates to the ligands electrochemical parameters (Fig. 1). A further important implication surprisingly found in our study is the influence of the buffer solution. With this respect, the reaction rates follows: Imidazole> Phosphate> Potassium Biphthalate; Suggesting an intermediate formation may play a role in the reaction rate. Altogether, the study shows evidences the influences the substituent has on the ruthenium center and also the complex-buffer steric effects causes both, indirect effect on Ru^{II}-NO⁺ and on its conversion to Ru^{II}-NO₂.

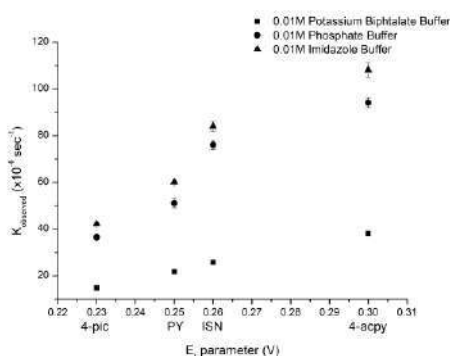


Figure 1. Reaction rates (K_{obs}) vs ligands electrochemical parameters (EL).

Reference: [1] M. G. Sawaia, R. S. da Silva. Transition Metal Chemistry. 2003, 28, 254–259.

Table 1. Reaction rates constant (K_{observed}) in various buffers at 25.0 °C and pH 6.5.

| K _{observed} (x10 ⁻⁴ sec ⁻¹) | 0.01M Potassium biphthalate | 0.01M Phosphate | 0.01M Imidazole |
|--|-----------------------------|-----------------|-----------------|
| L ^b =4-pic | (14.7±0.8) | (36.4±0.5) | (42.0±0.5) |
| L ^b =py | (21.7±0.7) | (51±2) | (60.0±0.4) |
| L ^b =ISN | (25.8±0.7) | (76±2) | (84±2) |
| L ^b =4-acpy | (38.0±0.6) | (94±2) | (108±3) |

Acknowledgments

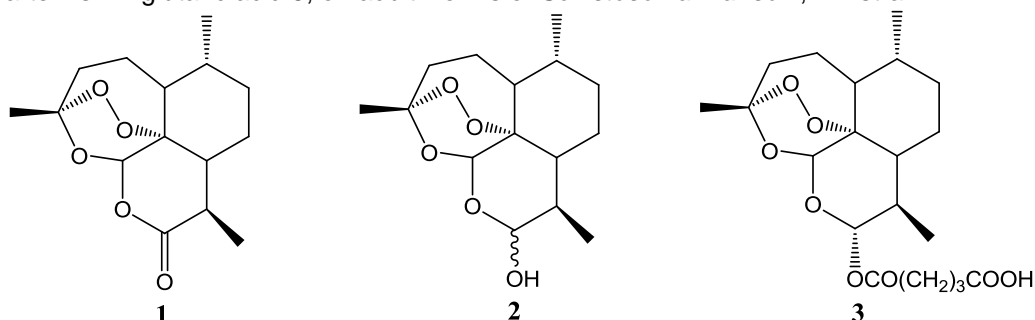
FCF-RP, CAPES, CNPq and FAPESP

Área: QPN

(Inserir a sigla da seção científica para qual o resumo será submetido. Ex: ORG, BEA, CAT)

Nº de Inscrição: 01391

(Inserir o número de inscrição do autor que fez a submissão)

Artemisinin, dihydroartemisinin and 10-dihydroartemisinin glutaric acid: Evaluation of *in vitro* schistosomicidal activity**Sinésio Boaventura Júnior (PQ),^{1*} Rosimeire Nunes de Oliveira (PQ),² Sheila de Andrade Penteadó Corrêa (PG),² Silmara Marques Allegretti (PQ),² Vera Lúcia Garcia (PQ)¹****sinesio@cpqba.unicamp.br**¹Research Center for Chemical, Biological and Agricultural (CPQBA), State University of Campinas (UNICAMP); ²Institute of Biology, Department of Animal Biology, State University of Campinas (UNICAMP)Keywords: Artemisinin, Dihydroartemisinin, 10-dihydroartemisinin glutaric acid, *Schistosoma mansoni* BH strain**Highlights**Schistosomiasis is a neglected chronic disease caused by trematodes of *Schistosoma* genus. Dihydroartemisinin and 10-dihydroartemisinin glutaric acid showed *in vitro* activity against *S. mansoni*.**Resumo/Abstract**Artemisinin **1** (Figure A) is a sesquiterpene lactone isolated from the leaves of *Artemisia annua* L. (Asteraceae), that contains in its structure an endoperoxide function, which is attributed its potent antimalarial activity. In this research, we evaluated the *in vitro* schistosomicidal activity of **1** and its derivatives, dihydroartemisinin **2** and 10-dihydroartemisinin glutaric acid **3**, on adult worms of *Schistosoma mansoni*, BH strain.**Figure A:** Chemical structures of artemisinin (**1**), dihydroartemisinin (**2**) and 10-dihydroartemisinin glutaric acid (**3**)

The biological tests were performed according to the methodology described¹. The tests used female mice (*Mus musculus*), Swiss SPF strain, infected with approximately 100 cercariae of *S. mansoni* through the tail immersion technique. Adult worms were recovered by perfusion of the portal-hepatic and mesenteric veins and transferred to culture plates containing RPMI-1640 solution. The samples were incorporated into polyvinylpyrrolidone (PVP) and tested in concentrations of 25, 50, 100 and 200 µg/mL. The following parameters were evaluated: motility, oviposition, skin and/or morphological alterations and mortality of worms. In the results, it was observed that the motility for all samples tested decreased after the first 6 h of incubation. With respect to mortality, it was found that this parameter is directly dependent on the measured concentration and incubation period. The treatment with **2**, at a concentration of 200 µg/mL, showed 100% mortality in 12 h of incubation, whereas **3** caused a mortality of 40% of the worms within the same period. The mortality of 100% of the worms exposed to treatment with **3** occurred after 24 h incubation. All male and female worms showed changes in the tegument and oral and acetabular suction cups, except for those treated with **1**. Artemisinin showed no schistosomicidal effect at the highest concentration tested (200 µg/mL). There was no oviposition in treatments with **2** and **3**. Treatment with **1** showed oviposition in all evaluated concentrations. In conclusion, **2** and **3** presented *in vitro* activity against *Schistosoma mansoni*, BH strain.

¹ Oliver, L.; Stirewalt, M.A.; "An efficient method for exposure of mice to cercarias of *Schistosoma mansoni*", *Journal of Parasitology*, v. 38, p. 19-23, 1952.

Área: ANA

Nº de Inscrição: 01392

Extração Líquido-Líquido por Partição à Baixa Temperatura de Bisfenol A em amostras de leite bovino

Natalia Navarro Teixeira (PG),^{1*} Wanessa R. Melchert (PQ).²

natalianavarro@usp.br

¹Centro de Energia Nuclear na Agricultura – CENA/USP – Av. Centenário, 303; Piracicaba/SP

²Escola Superior de Agricultura “Luiz de Queiroz” - ESALQ /USP – Av. Pádua Dias, 11; Piracicaba/SP

Palavras Chave: Bisphenol A, LLE-LTP, Milk, Green chemistry.

Highlights

Development of clean analytical procedure for extraction of Bisphenol A from bovine milk samples. Minimization of reagent consumption and residue generation; Green chemistry

Resumo/Abstract

Os procedimentos de extração de Bisfenol A, (BPA), 2,2-bis (4-hidroxifenil) propano, possuem etapas morosas que empregam grandes quantidades de solventes orgânicos, como acetonitrila ou metanol. O presente trabalho visa o desenvolvimento de um procedimento analítico limpo de clean-up fundamentado nos preceitos da Química Verde. Para tanto, foi empregada a extração líquido-líquido por partição à baixa temperatura em amostras de leite bovino para extração de Bisfenol A.

Os estudos de extração foram realizados com amostras de leite bovino dopadas com quantidades conhecidas de Bisfenol A $2,0 \times 10^{-4}$ mol L⁻¹ e as etapas otimizadas foram: equipamento, tempo e velocidade de agitação; velocidade e tempo de centrifugação; e tempo de congelamento. A quantificação foi realizada por espectrofotometria em 279 nm.

No intuito de favorecer e acelerar o processo de transferência do analito entre as fases imiscíveis foi avaliada a viabilidade do emprego de aparelho vórtex ou mesa agitadora com movimentos orbitais. Equações das retas foram obtidas $A = 1401C + 0,1518$, $R = 0,9955$ e $A = 1430C + 0,1467$, $R = 0,9996$, respectivamente para vórtex e mesa. A mesa agitadora apresentou melhor linearidade entre as diferentes concentrações estudadas, além de possibilitar o preparo de um maior número de amostras ao mesmo tempo. O tempo (1 – 30 minutos) e a velocidade (100 e 200 rpm) de agitação foram avaliados. As melhores recuperações do Bisfenol A foram estimadas em $94,1 \pm 1,1\%$ quando foi empregado 100 rpm e 20 minutos, respectivamente para velocidade e tempo de agitação.

Após a transferência do analito para a fase orgânica, a solução foi centrifugada para que o processo de separação entre as fases fosse acelerado. Para tanto, o período (5 – 40 minutos) e a rotação (2000 – 4000 rpm) de centrifugação foram avaliados. Recuperação foi alcançada em $100\% \pm 1\%$ quando foram empregados 5 minutos de centrifugação com 2000 rpm.

A LLE-LPT consiste da partição entre as fases à baixa temperatura, deste modo, o frasco contendo as fases separadas foi acondicionado no freezer (-16 °C) até congelamento da amostra. O tempo de congelamento foi avaliado com variação de 4 horas entre uma medida e outra (4, 8, 12, 24 e 48h). A fase orgânica foi então transferida para um tubo tipo Falcon e o volume completado com o solvente orgânico otimizado, acetonitrila, até 4 mL. Não houveram alterações significativas nas porcentagens de recuperação obtidas que foram ca. $93,0 \pm 6,5\%$.

O procedimento de extração líquido-líquido por partição à baixa temperatura, vem apresentando resultados promissores na recuperação de Bisfenol A de amostras de leite bovino, indicando ser um procedimento de alta eficiência e baixo impacto ambiental.

Agradecimentos/Acknowledgments

À CAPES pela bolsa concedida.

Área: ORG

(Inserir a sigla da seção científica para qual o resumo será submetido. Ex: ORG, BEA, CAT)

Nº de Inscrição: 01394

(Inserir o número de inscrição do autor que fez a submissão)

Palladium-Catalyzed Enantioselective Heck-Matsuda Arylation of Acyclic Enol Ethers: A Direct Synthesis of Fluoxetine

Ellen Christine Polo (PQ), Martí Fernández Wang (PQ), Carlos Roque Duarte Correia (PQ)

ellen_polo41@hotmail.com; croque@unicamp.br

Organic Chemistry Department, Chemistry Institute, University of Campinas, UNICAMP

Keywords: Heck reaction, Enantioselective palladium catalysis, N,N-ligands, Open flask, Fluoxetine

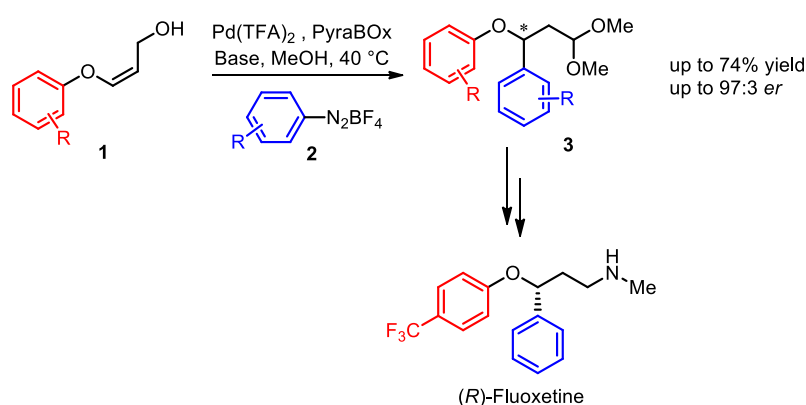
Highlights

The first examples of enantioselective Heck-Matsuda arylation of acyclic enol ethers was achieved using a Pd-N,N-ligand complex. The arylated products were obtained in excellent enantioselectivities for a wide variety of enol ethers. These products can be readily transformed into fluoxetine through simple synthetic transformations.

Abstract

The coupling of arenediazonium salts to olefins under palladium catalysis, known as the Heck-Matsuda reaction, have generated great interest in the last few years. Its ability to increase the structural complexity of organic molecules under operationally simple conditions have been widely employed in the synthesis of highly-valuable compounds. The interest in this reaction is demonstrated by the significant contributions made by our research group and others to extend the application of the Heck-Matsuda reaction to more complex olefins as well as to the enantioselective construction of stereogenic centers.

The work reported here discloses the unprecedented enantioselective Heck-Matsuda reaction involving linear electron-rich olefins. The selectivity of the reaction presents a challenge due to the inherent high reactivity of these compounds. The methodology developed should allow the total synthesis of Fluoxetine in an enantio-enriched manner.



Acknowledgments

We acknowledge the São Paulo Research Foundation (grants 2014/25770-6 and 2017/21494-2) for financial support and fellowship and Coordination for the Improvement of Higher Education Personnel (PNPD-Capes).

Development of new compounds derived from the 1-methyl-1H-benzo[d][1,2,3]triazole center for application as OLED carrier layers

Nícolas O. Decarli (PG),¹ André A. Vieira (PQ),² Ivan H. Bechtold (PQ).^{1*}

nick_decarli@hotmail.com; ivan.bechtold@ufsc.br

¹Departamento de Química, UFSC; ²Departamento de Química UFBA

Palavras Chave: Benzotriazol, OLED.

Highlights

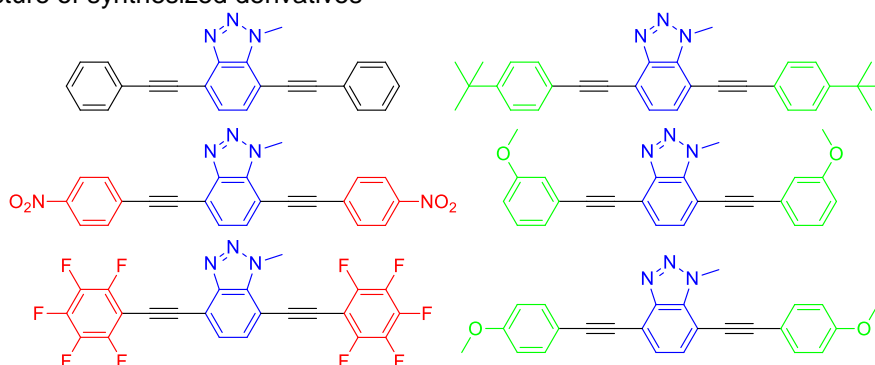
In this work different derivatives were synthesized using the benzotriazole center. Theoretical calculations were made to predict the HOMO and LUMO orbitals. Determination the values of quantum yield and absolute fluorescence.

Resumo/Abstract

There are many papers focusing on the development of luminescent layers for OLED devices.^{1,2,3} Meanwhile studies aimed at improving the other layers of the devices are infinitely less. In this way the development of new compounds for application as transport layer in these devices is necessary. In this work some new derivatives were developed, focusing on the benzotriazole center substituted in positions 1 and 7 by donor groups and acceptors of electron density linked to benzenes separated from the center by triple bond. Among the acceptors we have the nitrobenzene group and pentafluorobenzene. Donors are methoxybenzenes and tert-butylbenzene groups.

The synthesis of these compounds was done in two steps. The first step was the sonogashira reaction between sidechain bromides such as 1-bromo-4-nitrobenzene and 2-methylbut-3-yn-2-ol using palladium catalyst and copper iodide at reflux for 12 h. After purification of the product from the first reaction, deprotection was done using KOH and K₃PO₄ in toluene at 120°C, then obtaining the alkyne (1-ethynyl-4-nitrobenzene) as the product. The alkyne was then used for sonogashira reaction with 4,7-dibromo-1-methyl-1H-benzo[d][1,2,3]triazole center to obtain the product 1-methyl-4,7-bis(4-nitrophenyl)ethynyl-1H-benzo[d][1,2,3]triazole. These reactions were made for all synthesized derivatives (Figure 1.).

FIGURE 1. Structure of synthesized derivatives



The results showed that there is an increase in the energy levels of the HOMO and LUMO orbitals with the addition of donor groups to the derivative with only the benzene group as the substituent. While the addition of acceptor groups shows a decrease in the HOMO and LUMO orbitals. The energy levels are between -4.97 and -5.86 eV for HOMO and between -2.87 and -4.04 eV for LUMO. This result shows that the derivatives may be potentially used as carrier layers in OLED devices, since the energy of the orbitals is lower than that of the ITO (-4.7 eV) and higher than that of the aluminum (-4.3 eV), anode and cathode respectively.

1. Torres, I. et al. RSC Adv., 2016, 6, 36544;
2. Torres, I. et al. DYES PIGMENTS, 2017, 42, 212-225;
3. Odabas, S. et al. J LUMIN, 2016, 176, 240-249.

Agradecimentos/Acknowledgments

Thanks to UFSC and the chemistry department for learning, to CNPq and CAPES for financial support.
42ª Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química: Eixos Mobilizadores em Química

Área: MAT

Nº de Inscrição: 01396

Preparation of Bimetallic Heterogeneous Catalysts based on Nb and Mn for removal of N and S-containing contaminants from oil phases

Guilherme R. Farias (IC),¹ Fernanda G. Mendonça (PG),² Gustavo M. do Nascimento (PQ),³ Humberto O. Stumpf (PQ),² Wallace D. do Pim (PQ)^{1*}

rodriguesguilherme92@gmail.com; walacedopim@cefetmg.br

¹Departamento de Química, Centro Federal de Educação Tecnológica de Minas Gerais, Belo Horizonte-MG.

²Departamento de Química, ICEx, Universidade Federal de Minas Gerais, Belo Horizonte-MG.

³Centro de Ciências Naturais e Humanas, Universidade Federal do ABC, Santo André-SP.

Keywords: Niobium(V), Manganese(II), Heterogeneous Catalysis, Oxidation.

Highlights

- Nb/Mn-based materials were prepared and extensively characterized by several techniques.
- The materials were applied as heterogeneous catalysts towards oxidation of N and S-containing compounds.

Abstract

Niobium is an abundant element in Minas Gerais state, Brazil, where it is explored by the company CBMM in Araxá.¹ Incentive policies are being adopted aiming at the use of niobium-based compounds for technological applications of national and global interest.² One of the applications of niobium is the use of its compounds as catalysts towards oxidation reactions of organic compounds present in both aqueous and oil phases.³ In the latter, there is a great appeal for the removal of nitrogen and sulfur compounds present in petroleum in order to minimize the environmental impacts caused by its combustion, leading to the formation of acid rain, whose impacts are devastating. In this contribution, we prepared a series of bimetallic Mn/Nb-based materials starting from the precursor $\text{NH}_4[\text{NbO}(\text{ox})_2] \cdot n\text{H}_2\text{O}$ and potassium permanganate in acid medium using citric and succinic acids as molecular templates. The materials were obtained as polycrystalline solids and were extensively characterized by FTIR and Raman spectroscopies; thermal analyses; powder X-ray diffraction; and SEM/EDS analyses. The materials were applied as heterogeneous catalysts towards the oxidation of quinoline and dibenzothiophene, model compounds of N and S-containing contaminants, respectively. The biphasic reactions (acetonitrile/cyclohexane) were conducted at room temperature and the removal of the contaminants were monitored by GC-FID. The influence of the reaction time was investigated, and the catalysts were efficient towards the oxidation of the compounds, removing up to 70% quinoline and 40% of dibenzothiophene.

1. Castro, T. E. S.; Catalisadores de Nióbio com Propriedade Anfífila Empregados no Estudo de Transformação de Biomassa, 2017
2. Lima, J. M. G.; MINISTÉRIO DE MINAS E ENERGIA - MME Relatório Técnico 20 - Perfil da Mineração do Nióbio, 2010
3. Lopes, O. F.; de Mendonça, V. R.; Silva F. B.; Paris, E. C.; Ribeiro, C.; Quim. Nova, Vol. 38, No. 1, 106-117, 2015

Acknowledgments

CEFET-MG, FAPEMIG, CNPq, CAPES, RMQ-MG, and CBMM.

Effect of Ag nanoparticles in the luminescence properties of [Eu(tta)₃(phen)] Langmuir films: real-time, *in situ* monitoring PLS

Douglas R. Assis (PG)*,¹ Marco A. Cebim (PQ),¹ Miguel Jafelicci Jr.(PQ),² Marian R. Davolos (PQ)¹

douglas.assis@unesp.br; marian.davolos@unesp.br

¹Departamento de Química Geral e Inorgânica, ²Departamento de Físico-Química, Unesp, Instituto de Química, Araraquara; SP, Brasil

Palavras Chave: Langmuir films, Silver nanoparticles, Europium(III) complex, In situ photoluminescence

Highlights

In situ emission spectra were recorded in real time during the preparation of Langmuir films. The luminescence intensity enhancing or quenching depends on the AgNPs concentration control.

Resumo/Abstract

The conformation of europium(III) complexes in 2D systems brings a new perspective in the study of different luminescent properties of the three-dimensional solid. Langmuir and Langmuir–Blodgett (LB) technique is the most promising method to prepare organized films with of a monolayer thickness¹. The incorporation of noble metal nanoparticles in these luminescent Langmuir films can intensify their luminescence, assigned to the energy transfer of nanoparticles (NPs)-lanthanides or by surface plasmon absorption of metal nanoparticles, increasing the chance of potential applications.^{2,3} This work aims to investigate the effect of AgNPs on luminescent properties during the preparation of [Eu(tta)₃(phen)]/OA Langmuir films. Mixed Langmuir films were prepared using different wt% of AgNPs, in the same conditions, fixing the complex and oleic acid (OA) concentration. *In situ* luminescence spectra with $\lambda_{exc} = 394$ nm were recorded in real time during the preparation of Langmuir films in the Langmuir trough at 298 K. The photoluminescence spectra profile from the complex recorded in the presence and absence of AgNPs present narrow lines arising from f–f transitions, and the $^5D_0 \rightarrow ^7F_2$ transition is the most intense. The intensification of the luminescence takes place at concentrations between 3.3 to 20 wt% of Ag (Fig. 01). LB films were prepared by deposition of one monolayer on glass substrates at a constant surface pressure of 15 mN m⁻¹. LB films present the same behavior of Langmuir films and one monolayer presents high intensity showing the potentiality of the films for applications in optical devices. Therefore, the incorporation of AgNPs led to a significant enhancement in the luminescence of the complex, nevertheless the AgNPs concentration results in a delicate balance between an enhancing and a quenching effect on the luminescence intensities.

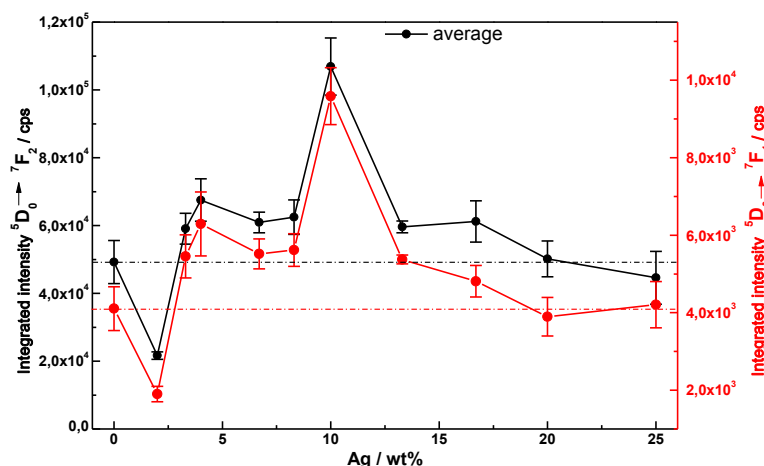


Figura 01 Integrated intensities of $^5D_0 \rightarrow ^7F_2$ and $^5D_0 \rightarrow ^7F_1$ transitions as a function of Ag wt%

¹ WALES,D.J.; KITCHEN,J.A., Chemical Central Journal, 10:72, p.1-8 (2016)

² KAUR,G.; et. al., Journal of Luminescence, v. 132, p.1683-1687 (2012)

³ Fang,X.; et. al., The Journal of Chemical Physics, v.131, 054506 (2009)

Agradecimentos/Acknowledgments

Authors thank CNPq, CAPES and FAPESP for the financial support.

Use of mini-course on thermal analysis as a tool for the contextualization of chemistry in the classroom

Fernanda Faria Martins* (FM), **Érica de Melo Azevedo** (FM)¹

fernanda.martins@ifrj.edu.br

¹Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia do Rio de Janeiro Campus Duque de Caxias, IFRJ-CDuc

Palavras Chave: *análise térmica, química em sala de aula, ensino de química, minicurso*

Highlights

Application of a mini-course for students of Basic, Technical and Technological Education; Chemistry teaching; application of investigative quiz; use of thermogravimetry to chemistry teaching.

Resumo/Abstract

The purpose of this study was to evaluate the use of a mini-course for students of Basic, Technical and Technological Education as a methodological tool for teaching concepts of chemistry and stoichiometric calculation. Two investigative quiz were applied before and after the mini-course and these were used to evaluate the initial knowledge and level of learning obtained. The objective of this initial quiz was to evaluate the level of knowledge about the theme and the students profile. For the first question (Do you know what is thermal analysis?), 71.5% of the students replied that no / had no idea, and 28.5% replied that they had heard. For the second question (What is your level of scholarship?), 57.1% answered Technical High School, 14.3% answered complete Higher Education and 28.6% answered regular high school. The final question, which consisted of two discursive items (What is the amount of residue at 1000°C and how many steps of mass loss are observed?). The results are represented in the Figure 1. A similar question was asked in the initial quiz, so that it was observed that half of the students did not understand the question or understood that it was the same initial question (What is the mass loss at 800°C?). The results show that thermal analysis techniques can be used as a tool to teach chemical concepts to students of different levels of education.

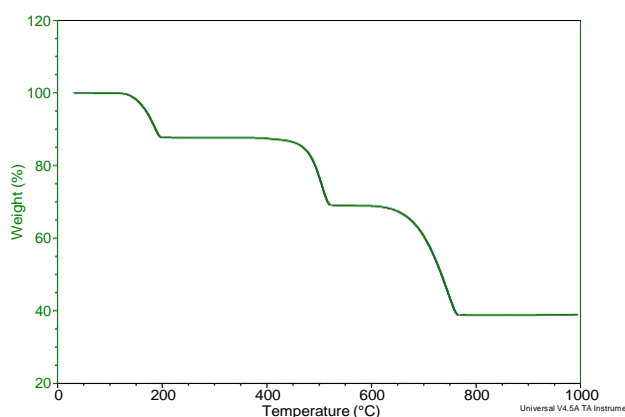


Figure 1. Thermogravimetric curve of calcium oxalate decomposition (weight as a function of temperature)

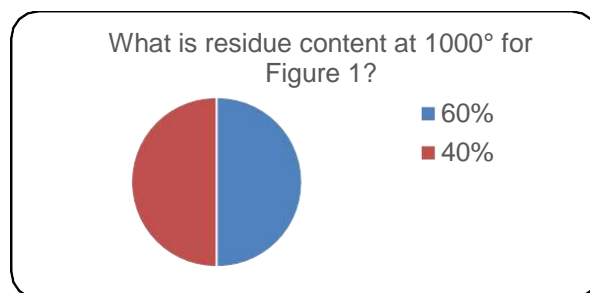


Chart 1. Answers for final question of quiz (What the content of residue at 1000°C?)

Área: CATNº de Inscrição: 01402

(Inserir o número de inscrição do autor que fez a submissão)

Au/TiO₂ Catalyst to CO₂ Conversion to Higher Alcohols

Tomaz Neves-Garcia (PG),¹ Pedro Vidinha (PQ),¹ Liane Marcia Rossi (PQ),¹*

tomaz@iq.usp.br; lrossi@iq.usp.br

¹Instituto de Química, Universidade de São Paulo)Palavras Chave: CO₂ Conversion, CCU, Ethanol Production, Au/TiO₂, Gold Catalysts, Catalysis.

Highlights

Au/TiO₂ has been successfully prepared by a variation of the deposition-precipitation with urea (DPU) method. 1nm particles, sub-nanometric clusters and even single-atoms of gold has been observed by the transmission electron microscopy. The catalyst successfully converts CO₂ and H₂ to ethanol when dimethylformamide is used as the solvent or ligand in aqueous solution.

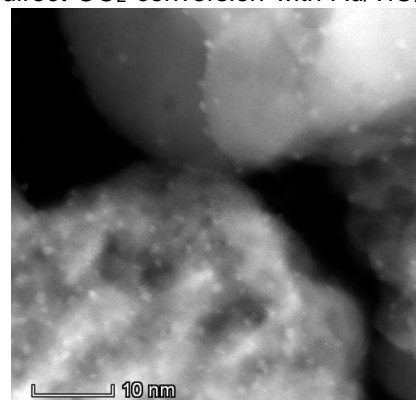
Resumo/Abstract

Carbon Capture and Storage (CCS) and Carbon Capture and Utilization (CCU) are nowadays one of the most important knowledge areas, and its importance has grown over the years whereas CO₂ emissions are contributing to global warming and changing the world as we know. Aligning those environment concerns with the need for the formation of the valuable C-C bonds from a non-fossil resource, Carbon Capture and Utilization has a special significance, thus the present work studies the direct CO₂ conversion with Au/TiO₂ catalysts. [1], [2].

Au/TiO₂ catalyst was prepared by a variation of the deposition-precipitation with urea (DPU) method, where HAuCl₄ was added in a vigorous stirred solution of urea in deionized water at 80°C for 20 hours. Afterwards, the catalyst was washed three times with acetone and macerated to finally give a purplish fine powder, Au/TiO₂. The TEM characterization shown 1nm particles, sub-nanometric clusters and even single-atoms of gold **Figure 1**. The analogous N or P-doped version of the catalyst was prepared as previously described by our group [3].

The catalytic reaction was carried out on an autoclave reactor, where 20mg the catalyst was stirred in 10mL of solvent with or without the chosen ligand under 40bar of CO₂ : H₂ (3:1) at room temperature and then the reaction was heated at 100°C for 20h. The reaction then was naturally cooled to room temperature, the gas phase was slowly relieved, the solid was separated from the liquid by decantation and the liquid phase was analyzed by Gas Chromatography (GC).

The reaction has been performed in different solvents, however the CO₂ only converts to ethanol, in the conditions studied, when DMF is used as solvent or ligand in aqueous solution (the blank reaction in water does not convert CO₂). Now the working is studying the role of the DMF, as well as its side products (mainly DMF hydrolysis products) and its effects in the main reaction, the effect of different ligands and catalysts doping in the yield/selectivity and the reaction mechanism.

Figure 1: Au/TiO₂ catalyst

1. Čuček, L.; Klemeš, J. J.; Varbanov, P. S.; Kravanja, Z., Clean Technol Environ Policy., 17, 2125 (2015).
2. Budzianowski, W. M.; Postawa, K., Renew Sustain Energy Rev., 68, 852 (2017).
3. Fiorio, J. L., Gonçalves, R. V.; Teixeira-Neto, E.; Ortuño, M. A.; Lopez, N.; Rossi, L. M. *et al.* ACS Catal. **8**, 3516 (2018).

Agradecimentos/Acknowledgments

This work was supported by FAPESP, CNPq and CAPES. We gratefully acknowledge support of the RCGI – Research Centre for Gas Innovation, hosted by the University of São Paulo (USP) and sponsored by FAPESP – São Paulo Research Foundation (2014/50279-4) and Shell Brasil. Special acknowledgment to FAPESP for the Scholarship to Tomaz Neves-Garcia.

Designing Hybrid Nickel Catalysts for CO₂ Hydrogenation

Bruno Henrique Arpini (PG),¹ Adriano Henrique Braga, (PQ)¹, Liane Marcia Rossi (PQ).^{1*}

brunoarpini@usp.br; lrossi@iq.usp.br

¹Instituto de Química Universidade de São Paulo, São Paulo 05508-000 (Brazil)

Palavras Chave: Carbon Dioxide, RWGS, Nickel, Methanation

Highlights

Here, we developed a study about the design of nickel catalysts embedded in N-doped carbon and its influence on CO₂ hydrogenation through RWGS.

Resumo/Abstract

The use of Ni catalysts for CO₂ hydrogenation is growing; e.g. in the RWGS reaction that provides valuable CO. Side reactions, such as Methanation, can decrease the RWGS yield producing undesired CH₄^[1]. The preparation of catalysts embedded in N-doped carbon was inspired by the method developed by Beller's group for the preparation of cobalt catalysts^[2]. 1,10-phenanthroline was used as C and N source. All catalysts were tested in the hydrogenation of CO₂ in 1 atm using a fixed-bed with programmed heating. The catalysts were characterized by DRX, TEM, TPR and in-situ XAS analysis. All Nickel catalysts were active in the hydrogenation of CO₂ to CO and CH₄ at different temperatures (Fig. 1a). The Ni catalyst embedded in N-doped carbon, Ni5@NC/SiO₂ (Ni-A), was more selective to CO than Ni5/SiO₂ (Ni-B). The particles size is close to 17 nm (by XRD) and Ni-B has less intense diffraction peaks compared to Ni-A. TPR analysis (Fig. 1b) showed that the Ni-A has a narrow temperature reduction range, which suggests a more uniform size distribution, while Ni-B has a broad-range distribution. Moreover, from TEM, corroborating with DRX and TPR, the Ni-A and Ni-B catalysts showed particles of about 20 and 3 nm, respectively. In RWGS reaction, the coated Ni-A catalyst, which has bigger particles, gives higher selectivity. Moreover, the commercial silica was better support than lab synthesized for that kind of hybrid catalyst. A "naked" catalyst with similar particles size of Ni-A was prepared by the incipient wetness impregnation method, but the RWGS selectivity had a significant decrease. The same behavior was observed when Ni-A was treated with HCl to decrease the particle size). Overall, the results show that the presence of C and N on the catalyst surface may have an important role to avoid undesired CH₄ formation.

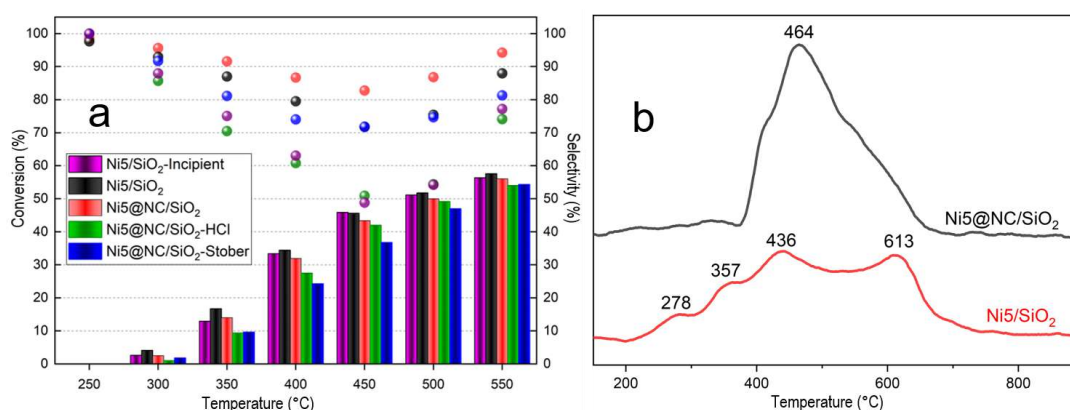


Figure 1: (a) Conversion and selectivity for all catalysts; (b) TPR analysis for Ni-A and Ni-B.

[1] Chen et. al. *J. Am. Chem. Soc.* 139, 9739-9754 (2017)

[2] Beller et. al. *Nat. Protoc.* 10, 548 (2015)

Agradecimentos/Acknowledgments

The authors would like to thank FAPESP, CNPq and CAPES for financial support. We gratefully acknowledge support of the RCGI – Research Centre for Gas Innovation, hosted by the University of São Paulo (USP) and sponsored by FAPESP–São Paulo Research Foundation (2014/50279-4) and Shell Brasil.

42ª Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química: Eixos Mobilizadores em Química

Degradação do paraoxon pelo aminoácido L-cisteína

Matheus M. Cascarano (IC),^{1*} Bárbara O. Gonçalves (IC),¹ Lais F. Pereira (IC),¹ Marcelo F. Lima (PQ).¹
*mccascarano3181@gmail.com

¹Laboratório de Química Bio-orgânica Ambiental, Departamento de Química e Ciências Ambientais, UNESP/IBILCE

Palavras Chave: (Paraoxon, L-Cisteína, Cinética química, Pesticidas, Mecanismo de reação).

Highlights

In this work we show the first results for the dephosphorylation reaction of the organophosphate paraoxon by L-cysteine. The reaction rate has a maximum around pH 10 and the dependence on the cysteine concentration has shown a quadratic behavior.

Resumo/Abstract

O método utilizado atualmente para a destruição de estoques indesejados de agrotóxicos é a incineração, um método caro e que, sem a devida fiscalização, gera gases com elevado potencial tóxico. É necessário, portanto, propor métodos ambientalmente sustentáveis para a eliminação dessas substâncias. Além disso, há interesse por formas viáveis de destoxificação dos agrotóxicos em compartimentos ambientais: como no tratamento de água para o abastecimento público, e até mesmo para a destoxificação de pessoas contaminadas por armas químicas com estruturas moleculares similares. O objetivo deste trabalho foi avaliar a tiólise do paraoxon pelo aminoácido L-cisteína. O tiol presente na L-cisteína tem características nucleofílicas e é facilmente oxidado, comportamento este que pode ser observado em várias enzimas. A sua reatividade é aumentada quando o grupo tiol é ionizado, fenômeno diretamente dependente do valor do pH do meio. De acordo com nossos resultados, a velocidade da reação em função da variação do valor do pH apresentou um perfil do tipo "bell-shaped", com uma estreita faixa de reatividade entre os valores de pHs 10 e 12. Trabalhamos na proposta de que a cisteína possui um efeito catalítico promovido pelo grupo amônio, uma vez que o máximo de reatividade ocorre entre os valores de pH do grupo tiol e do grupo amônio (Figura 1).

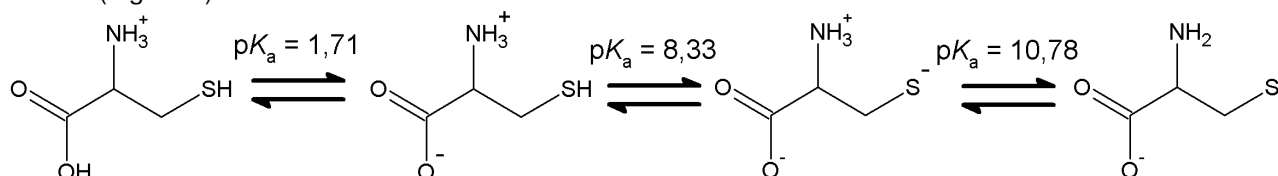


Figura 1. Desprotonação da L-cisteína.

Um fenômeno parecido foi descrito por Kirby e colaboradores (2006) em um trabalho envolvendo a reatividade da hidroxilamina; Lima e colaboradores (2018) em estudo mais recente com a hidroxilamina e o paraoxon também descreveram um mecanismo dependente do mesmo efeito (Figura 2). A constante de velocidade observada para a cisteína foi $5,7 \times 10^{-4} \text{ s}^{-1}$, quase 6.000 vezes mais rápido que a constante de velocidade para a hidrólise (10^{-7} s^{-1}) espontânea do paraoxon.

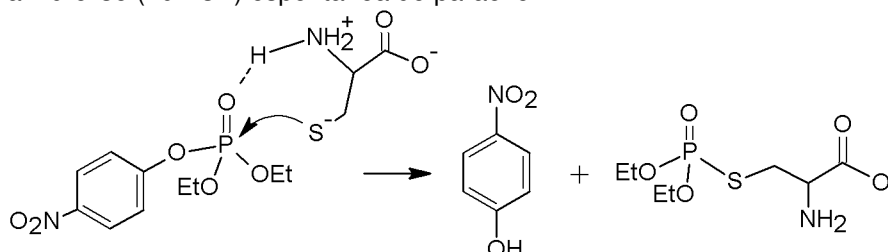


Figura 2. Reação envolvendo mecanismo equimolar para a desfosforilação do paraoxon por cisteína.

Agradecimentos/Acknowledgments

Laboratório de Catálise e Fenômenos Interficiais e INCT Catálise.
Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de Mato Grosso.

Iron/carbon catalyst preparation from biodiesel residue for organic contaminants oxidation.

Thais A. Prado Mendonça (PG),¹ Ana Carolina Fernandes Silva (IC),¹ Maraísa Gonçalves (PQ).^{1*}

thaisap2004@yahoo.com.br; *goncalves.maraisa@unifesp.br

¹Universidade Federal de São Paulo, Instituto de ciência e Tecnologia, Campus São José dos Campos.

Palavras Chave: Compósito Carbonáceo, contaminação ambiental, resíduo biodiesel, catálise.

Highlights

New composite material based on Iron-carbon from biodiesel residue.

Contaminants removal from water by iron/carbon composite: adsorption and Fenton oxidation.

Transformation of biodiesel residue into value-added materials.

Resumo/Abstract

Devido ao crescente aumento da poluição ambiental, alternativas para minimizá-la são necessárias. As estratégias propostas neste trabalho é a remoção de contaminantes orgânicos utilizando materiais carbonáceos obtidos a partir do resíduo do biodiesel, minimizando assim os impactos causados por duas fontes poluentes.

Os materiais foram preparados pela carbonização hidrotérmica da glicerina, resíduo do biodiesel na presença de sal de ferro na proporção de 1/10 (mFerro/mcarvão) em temperatura de 180° C por 24h. Os sais de ferro utilizados foram: FeCl₃ (Sigma), FeSO₄.7 H₂O (Vetec-99%) e Fe(NO₃)₃.9H₂O (Synth. PA) nomeados como 10Fe-I, 10Fe-II e 10Fe-III, respectivamente. Após a carbonização os compósitos ferro/carvão foram lavados com água destilada e acetona para a remoção do excesso de ferro e a glicerina não polimerizada. O contaminante orgânico utilizado como composto modelo foi o azul de metileno (AM). Após verificar a atividade dos compósitos estes foram avaliados na oxidação da cafeína e do paracetamol. Para os testes de oxidação dos contaminantes foram utilizados 10 mg dos compósitos, 9,9 mL de solução dos contaminantes (10 mg.L⁻¹) e 0,1 mL de peróxido de hidrogênio (H₂O₂), mantida sob agitação constante. O efeito da adsorção foi avaliado utilizando as mesmas condições anteriores, porém sem adição de (H₂O₂).

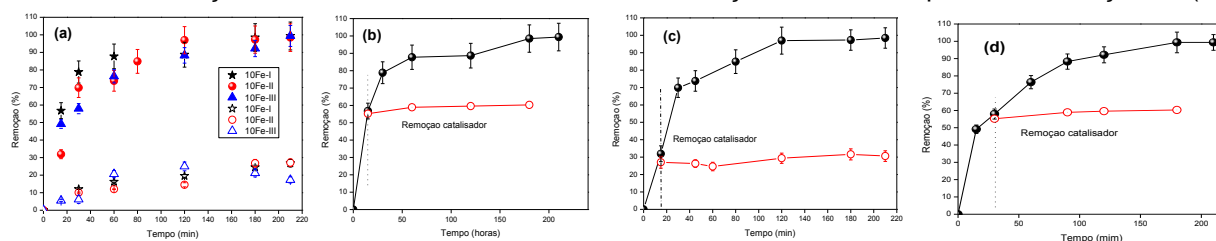


Figura 1. (a) Cinética de remoção do contaminante AM (símbolo fechado: oxidação e símbolo aberto adsorção) e teste de lixiviação: (b) 10Fe-I; (c) 10Fe-II e (d) 10Fe-III.

É possível observar uma elevada atividade catalítica, alcançando 100% de oxidação após 120 minutos. A oxidação ocorre pelo processo tipo Fenton no qual ocorre a geração de radicais hidroxilas, OH, altamente reativos pela fase de ferro, Fe²⁺, em presença de H₂O₂. A adsorção máxima foi 20% em presença de todos os compósitos preparados. Isso indica que os compósitos a base de ferro possuem atividade catalítica no processo tipo Fenton. Para avaliar se há influência do processo homogêneo, um teste de lixiviação foi realizado. Pelos resultados obtidos (Figura 1) verificamos que após a remoção do catalisador a reação é interrompida, indicando que não há lixiviação da fase ativa, ou seja, toda a catálise ocorre via processo heterogêneo. Os testes de oxidação para o paracetamol e a cafeína mostrou uma remoção de apenas 10% nas condições avaliadas. Isso pode ser devido a oxidação da fase de ferro após o longo tempo de preparação. O compósito será preparado em temperaturas de 300 e 500°C em atmosfera de nitrogênio com o intuito de preservar a fase ferro.

O resíduo do biodiesel mostrou viabilidade para preparação de compósitos a base de ferro/carvão com elevada atividade catalítica na oxidação de contaminantes orgânicos.

Agradecimentos/Acknowledgments

À Fapesp (2016/05006-5), CNPQ (401796/2016-7) e Unifesp.

Área: CAT

Nº de Inscrição: **01408**

Multicomponent Synthesis of Highly Stereoselective Pyrrolidine Derivatives

Rafaely N. Lima (PQ),¹ Radell E. Pérez (PG),^{1,2} Vitor A. F. da Silva (PG),¹ Yoisel B. Broterson (PG),¹ Fidel E. M. Vicente (PG),^{1,2} Arlene G. Corrêa (PQ),¹ Daniel G. Rivera (PQ),² and Márcio W. Paixão (PQ).¹

¹Departamento de Química, Universidade Federal de São Carlos, UFSCar; ²Center for Natural Products Research, University of Havana, UH. raffinha_lima@hotmail.com

Palavras Chave: U-3CR, Stereosynthesis; Green Chemistry; Microwave.

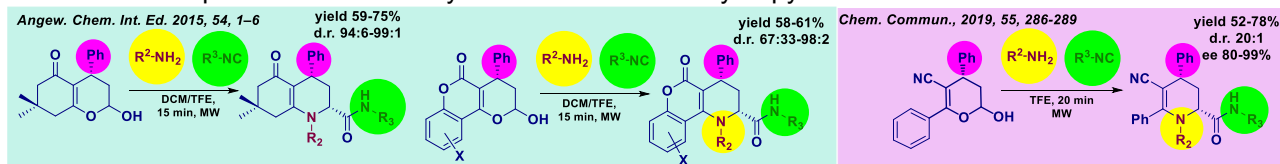
Highlights

A new protocol involving a organocatalytic/multicomponent reaction sequential; Fast and efficient synthesis of pyrrolidine analogues; Obtention of pyrrolidine derivatives with high diastereoselectivity.

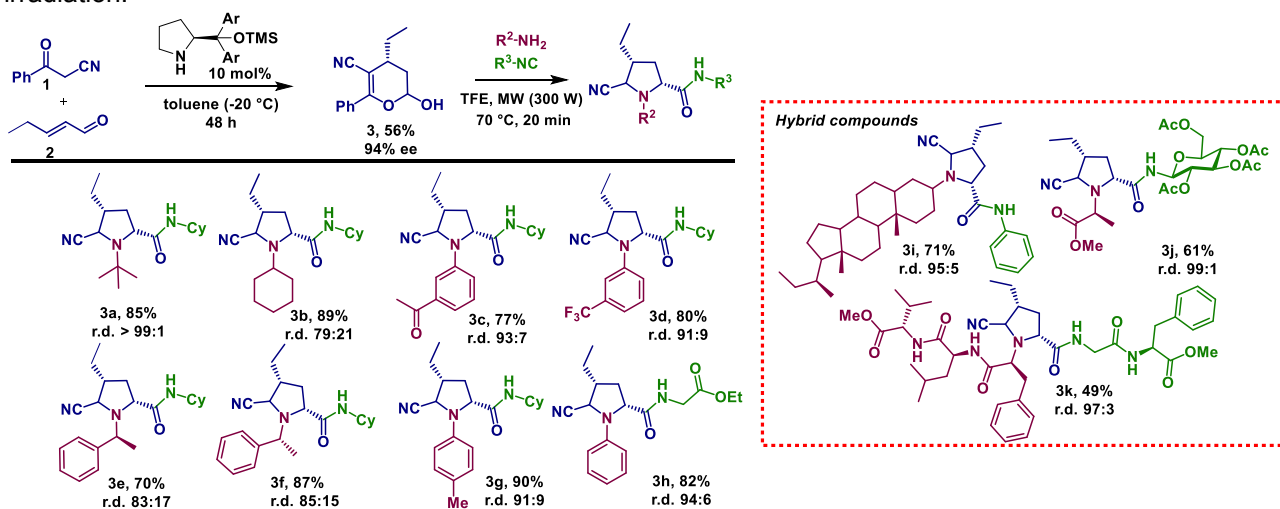
Abstract

In the last decades, the emphasis on applying the principles of Green Chemistry has been boosting the chemical industry and academia to change their behavior towards the application of a more sustainable chemistry. Having as a common goal, obtaining the desired product in as few steps as possible, high yield and use of non-toxic reagents.¹ Our research group has previously described the one-pot stereoselective synthesis of chiral tetrahydropyridines,^{2,3} and procedure worked well using aryl substituents (pink group, Scheme 1). However, when the substituent was replaced by an aliphatic group the products presented different scaffold and this results will be described. The organocatalytic process provided product **3** with high enantiomeric excess (94% ee), which was subsequently subjected to the I-MCR using a primary amine and an isocyanide. As illustrated in Scheme 2, the use of aliphatic (**3a,3b**), aromatic (**3c-3h**) or natural products (**3i-3k**) amine/isocyanide analogues led to the products with 49-90% isolated yields and high diastereoselectivity (79:21 to 99:1).

Scheme 1. One-pot stereoselective synthesis of chiral tetrahydropyridines.



Scheme 2. Synthesis of chiral pyrrolidine derivatives by combinatorial organocatalytic/U-3CR by MW irradiation.



We have developed an efficient strategy to synthesize chiral pyrrolidine derivatives combining an organocatalytic/I-MCR process. The stereoselective synthesis also permitted the obtention of peptidic, saccharidic and steroidal substituents, which can result in compounds with great biological potential.

¹ Dunn, J. P. *Chem. Soc. Rev.*, **2012**, *41*, 1452–1461. ² Niu, Z. et al. *Tetrahedron Asymm.* **2014**, *25*, 796; ³ Echemendía, R. et al. *Chem. Commun.*, **2019**, *55*, 286-289; ⁴ Echemendía, R. et al. *Angew. Chem. Int. Ed.* **2015**, *54*, 1 – 6.

Acknowledgments

We are grateful to the CNPq (151453/2018-7), the FAPESP (14/50249-8 and 15/17141-1) and the CAPES (CAPES-MES/Cuba) for financial support. GSK is also acknowledged for the financial support.

42ª Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química: Eixos Mobilizadores em Química

Recovery of Rare Earth elements from exhausted luminescent lamps

Mayrla Fernanda Vieira (IC),¹ Marray das Chagas Silva (PG)¹, Ayla Roberta B. S. Galaço (PG)¹, Sidney José Lima Ribeiro (PQ),² Osvaldo Antônio Serra (PQ)¹.

osaserra@usp.com

¹Departament of Chemistry, FFCLRP-USP.

²Institute of Chemistry of Araraquara IQ/UNESP

Keywords: *Rare Earth, recovery, luminescent lamps.*

Highlights

Recovery of the rare earth elements present in phosphoric powder from exhausted luminescent lamps using weak acids and sulfuric acid in small concentrations.

Abstract

Materials composed of elements of Rare Earth (RE) are extremely important for cutting-edge technologies. Rare earth phosphors are applied in numerous lighting devices due to their luminescent properties, such as fluorescent lamps. After reaching their useful life, mostly of these lamps are discarded without correct treatment. Some states (S. Paulo, Rio de Janeiro etc) have laws/rules for the disposal of these lamps, in order to eliminate the mercury from the bulbs. Several companies are involved in the treatment to remove the mercury and the resulting powder is mixed in cements usually. Some bulbs, mainly the ones with small diameter contain amounts of rare earths up to 70%. In this work we used the powder without mercury furnished by TRAMPPO S/A (T5 – Ø = 1,6 cm), that contains ~ 65% of rare earths as oxides. To recover the rare earths, we propose a non-aggressive and environmentally sustainable method. The process uses non-volatile acids such as citric and sulfamic, both in the presence sulfuric acid in low concentration. The initial and treated powders were analyzed by X-ray fluorescence (XRF) and luminescence spectroscopy. The process recovers almost 80% of the contents in Eu and Y as oxides. The emission spectra of the recovered powder shows only the presence of Eu^{3+} . The others rare earths La, Ce, Gd and Tb remains in the powder. In spite of the small difference, the citric acid was better in the process than the sulfamic acid, besides having a better cost benefit (Figure 1).

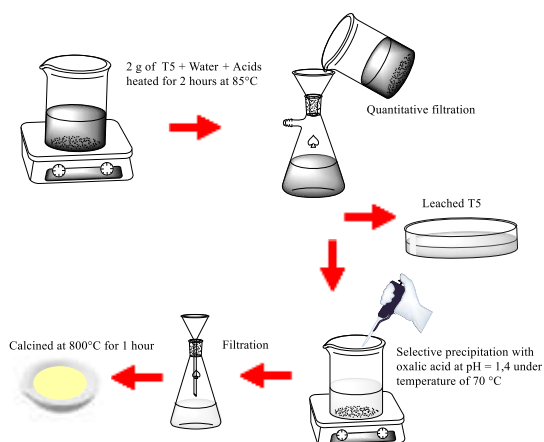


Figure 1: Recovery of rare earth elements in phosphoric dust from exhausted luminescent lamps.

de Sousa Filho, PC and Serra, OA. Rare Earths in Brazil: History, production and perspectives. *Química Nova* 37, 2014, 753.

Loy, ST; Binnemans, K; Gerven, TV. Mechanochemical – Assisted Leaching of Lamp Phosphors: A Green Engineering Approach for Rare – Earth Recovery. *Engineering*. 4, 2018, 398.

Acknowledgments

The authors would like to thank Brazilian agencies CAPES, CNPq, FAPESP, for the financial support, to Prof. Heloysa Martins Carvalho Andrade (Federal University of Bahia) for the XRF analysis and TRAMPPO S/A for the donation of mercury free powder (from T5 lamps).

Área: QPN

Nº de Inscrição: 01410

Extraction of carotenoids from the microalgae *Chlorella vulgaris* grown in two different cultivation media

Letícia M. P. Bignon (PG),¹ Isabella T. R. de Oliveira (IC)², Mônica R. C. Marques (PQ),³ Cláudia M. L. L. Teixeira (PQ)⁴

leticia@bignon.com.br; claudiateix@gmail.com

¹PPGMA, Universidade do Estado do Rio de Janeiro (UERJ); ²Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia do Rio de Janeiro (IFRJ), ³Departamento de química, UERJ; ⁴Instituto Nacional de Tecnologia (INT)

Keywords: Microalgae, Carotenoid, Extraction

Highlights

Higher biomass concentration does not imply higher concentration of total carotenoids;
Higher carotenoid concentration was observed in cultures with lower nitrogen concentrations;

Abstract

Introduction: Carotenoids are important nutraceuticals known for their anti-oxidant, anti-inflammatory, cardioprotective and hepatoprotective properties and have been used as health supplements. Microalgae are the most promising natural sources of carotenoids and *Chlorella vulgaris* has a rich carotenoid composition.

Objective: To evaluate the production of carotenoids in *Chlorella vulgaris* in two cultures medium, WC and BG-11, as they show different concentrations of nitrogen with different growth possibilities, as well as different production costs.

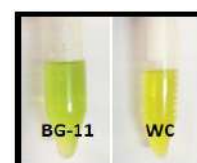
Methodology: *Chlorella vulgaris* was cultivated in WC and BG-11 medium in a 500 ml erlenmeyer flask on a constant orbital shaker with a photonic flux density of $160 \mu\text{m}^2\cdot\text{s}^{-1}$ and temperature of $25 \pm 2^\circ \text{C}$. The biomass concentration was determined at the end of the experiment. Carotenoids extraction was performed according to the method described by Strickland & Parson (1972) and quantification was performed by spectrophotometry using the equations described by Lichtenthaler (1987).

Results and discussion: A difference in the concentration of total carotenoids extracted from the biomass of the different medium was observed (Table 1). The production of carotenoids is not directly related with the biomass production. In the present work, it could be observed a higher carotenoids concentration (Table 1) in the culture medium with lower biomass content (WC: $0.250 \text{ g}\cdot\text{L}^{-1}$; BG-11: $0.450 \text{ g}\cdot\text{L}^{-1}$). The difference in the production of carotenoids may be related to the concentration of nitrogen in the medium composition. The WC culture medium was prepared with $0.085 \text{ g}\cdot\text{L}^{-1}$ of nitrate and BG-11 medium with $1.5 \text{ g}\cdot\text{L}^{-1}$ of nitrate. The most common behavior for carotenoids production is an increase in its content by decreasing the nitrogen concentration of the medium. Figure 1 shows the color change according the culture medium that was used. The green color may be reflecting the higher concentrations of chlorophyll a and b in the biomass produced in BG-11 compared to biomass produced in WC medium. According to these results, each culture medium can be applied for a different purpose. To enhance the biomass production, BG-11 may be more effective in comparison with WC. On the other hand, to improve the carotenoids content, the most suitable culture medium will be the WC instead of BG-11. One suggestion to increase the biomass and carotenoids contents would be carry out cultivation in two steps – in the first could be used BG-11 to enhance the final biomass concentration, and in the second, the cells could be transferred to a low nitrogen medium (as WC).

Table 1: Carotenoids and chlorophylls a and b concentrations in cells suspension produced in WC and BG-11 media

| Medium | Carotenoids (mg/L) | Chlorophyll a (mg/L) | Chlorophyll b (mg/L) |
|--------|--------------------|----------------------|----------------------|
| WC | $2,53 \pm 0,17$ | $2,08 \pm 0,52$ | $1,36 \pm 0,54$ |
| BG-11 | $1,88 \pm 0,44$ | $4,39 \pm 1,28$ | $2,43 \pm 0,77$ |

Figure 1: Difference in culture color for WC and BG-11 media



¹ GONG & BASSI (2016), *Biotechnology Advances*. ² HU et al. (2018), *Biotechnology Advances*

Acknowledgments



Área: EDU e AMB.

Nº de Inscrição: 49237

Ciência na Escola Pública: Biopolímero Aplicado ao Estudo de Cinética Química

Isabella O. de Lima (IC)¹.**isabellaolim.bella@gmail.com; isabellaolim_isa@yahoo.com.**

Departamento de Ensino Superior e Unidade Acadêmica de Licenciaturas, Curso Superior de Licenciatura em Química, IFPB – Campus João Pessoa.

Palavras Chave: *Biopolímeros, Ensino de Química, Cinética Química e Interdisciplinaridade.*

Highlights

Science in the Public School: Biopolymer Applied to the Study of Chemical Kinetics

The project inserts the method of scientific research in teaching methodology of Chemistry for public education of High School students as support for interdisciplinary teaching of Chemical Kinetics.

Resumo/Abstract

O projeto insere os métodos de pesquisa científica utilizados em meio acadêmico na metodologia de ensino de Química para estudantes de escola pública de nível médio como instrumento de apoio ao desenvolvimento do conteúdo de Cinética Química da disciplina, tornando-a mais reflexiva e interdisciplinar. Sob o formato de aula expositiva dialogada e ampla, foi possível discutir com os discentes os recursos empregados pela ciência para analisar e julgar o objeto de estudo, além de estender-se sobre a estrutura básica de polímeros, biopolímeros, suas aplicações econômicas e divergências ambientais análogos ao favorecimento de discussão de temas ligados à biologia e meio ambiente. Em sua metodologia técnica, o projeto explorou os processos de pesquisa, introduzindo os alunos no interior da proposta de iniciação, utilizando materiais e métodos para a produção de um biopolímero de amido de modo que fossem capazes de relacionar a proposta a uma continuação do exercício teórico do conteúdo citado em sala de aula. A atividade favoreceu não somente o progresso de notas, mas também o trabalho em equipe, desenvolvimento de senso crítico e valorização do papel do aluno no ambiente escolar. Essa ferramenta de suporte colaborou durante o processo de ensino-aprendizagem, pois priorizou trabalhar os conteúdos programáticos fora das barreiras de fragmentação de disciplinas dos parâmetros da educação no país e preocupou-se em formar cidadãos capacitados para lidar com questões que possam surgir no decorrer de seu desenvolvimento humano e histórico-científico.



(Imagem de Arquivo Pessoal da Autora)



(Imagem de Arquivo Pessoal da Autora)

Agradecimentos/Acknowledgments

Agradeço ao Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia da Paraíba – Campus João Pessoa por me proporcionar uma formação profissional qualificada. À Professora Ms. Maria das Graças Negreiros de Medeiros pela orientação nesse projeto tão importante para mim e para aqueles que o usufruíram. Ao professor de ensino fundamental e médio Diógenes Siqueira Moura pelo espaço concedido a mim em sua sala de aula e a todos os alunos da turma do 2º ano A de nível médio da Escola Estadual de Ensino Fundamental e Médio Professor João José da Costa pela participação, grande interesse e desenvolvimento desse trabalho que nos trouxe resultados valiosos.

Área: EDU

Nº de Inscrição: 01412

Brazilian in-service chemistry teachers' misconceptions concerning chemical kinetics

Pablo M. A. Castro (PG)¹, Luciane F. Goes (PG)¹, Lucas Vairolette (PG)², Carmen Fernandez (PQ)^{1,3}, Silvia M. L. Agostinho (PQ)³.

pablo.castro@usp.br; smlagost@iq.usp.br

¹Programa de Pós-Graduação Interunidades em Ensino de Ciências da Universidade de São Paulo; ²Programa de Pós-Graduação em Química da UNIFESP; ³Instituto de Química da Universidade de São Paulo.

Keywords: *Misconceptions, In-service Teacher Training, Chemistry Education*

Highlights

High school teachers present difficulties in chemical kinetics. Studies related to the conceptions of chemical kinetics are scarce. An adapted version of Chemical Kinetics Concepts Achievement Test was used. The outcomes revealed teachers' misconceptions.

Abstract

Researches concerning chemical kinetics education are relatively scarce. Moreover, most approaches in this content are limited to empirical macroscopic aspects, as to observe the influence of concentration of reagents or temperature on the reaction rate, without work with mathematical language (as graphs) or chemistry submicroscopic language (as particulate theory). The aim of this study was to investigate the chemistry teachers' conceptions of chemical kinetics through a qualitative case study. The sample consisted of 18 in-service chemistry teachers and the data were collected using an adapted version of Chemical Kinetics Concepts Achievement Test (Cakmakci, Aydogdu, 2011). The adapted version has 12 open-ended questions, of which eight were used in this research. Teachers' responses were categorized into four groups: totally correct, partially correct, misconceptions and others (incomprehensible or ungiven). The data were analysed by qualitative thematic analyse, in which the teachers' emergent misconceptions were grouped in four central misconceptions themes (Table 1).

Table 1. Percentage of teachers' responses to the test.

| Questions | Responses | | | | Misconceptions themes |
|-----------|-----------------|-------------------|----------------|-----------------|-------------------------------|
| | Totally correct | Partially correct | Misconceptions | Others | |
| 02 | 17% (03) | 11% (02) | 22% (04) | 50% (09) | Reaction order definition |
| 03 | 22% (04) | 06% (01) | 28% (05) | 44% (08) | Reaction order definition |
| 05 | 17% (03) | - | 28% (05) | 55% (10) | Concentration versus kinetics |
| 07 | 39% (07) | 06% (01) | 22% (04) | 33% (06) | Concentration versus kinetics |
| 09.1 | 11% (02) | - | 39% (07) | 50% (09) | Concentration versus kinetics |
| 09.2 | 17% (03) | - | 44% (08) | 39% (07) | Concentration versus kinetics |
| 10 | 06% (01) | 22% (04) | 44% (08) | 28% (05) | Temperature versus kinetics |
| 12 | 17% (03) | 11% (02) | 44% (08) | 28% (05) | Concentration versus kinetics |

The outcomes of this study revealed that the mainly teachers' misconceptions were: defining reaction order, reaction rate increases against the time, and the increase in temperature increases only endothermic reactions. These results may be useful for teacher education courses developers, mainly those courses focusing in subject matter and pedagogical content knowledge (as knowledge about alternative conceptions in chemical kinetics).

Acknowledgments

The authors are grateful to the Program *Encontro USP-Escola* promoted by Pró-Reitoria de Cultura e Extensão da Universidade São Paulo and to the financial support granted by São Paulo Research Foundation (FAPESP), grants #2013/07937-8, #2014/14356-4 and #2016/14138-2.

Cakmakci, G., & Aydogdu, C. (2011). Designing and evaluating an evidence-informed instruction in chemical kinetics. *Chemistry Education Research and Practice*, 12(1). 15-28.

Área: MAT

Nº de Inscrição: 01414

Light-responsive drug delivery system based on polymer functionalized reduced graphene oxide to treat leishmaniasis

Letícia S. Vitorino (PG)^{1*}, Isabela A. Albuquerque Bessa (IC)¹, Thiago Custódio (PQ)¹, Evelyn C. S. Santos (PQ)², René A. N. Silva (PQ)³, Célia M. Ronconi (PQ)¹.

leticia_vitorino@id.uff.br; cmronconi@id.uff.br

¹Universidade Federal Fluminense, Instituto de Química, Programa de Pós-Graduação em Química da UFF, Outeiro de São João Batista s/n, Campus do Valonguinho, Centro, 24020-141, Niterói, RJ, Brazil.

²Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas, R. Dr. Xavier Sigaud 150, 22290-180, Botafogo, RJ, Brazil.

³Universidade Estadual de Campinas, Instituto de Química, Rua Josué de Castro 126, Cidade Universitária, 13083-861, Campinas, SP, Brazil.

Keywords: Leishmaniasis, Amphotericin B, Drug delivery systems, Reduced graphene oxide, NIR light absorbance.

Highlights

Photodispositives based on rGO modified with polymers can be loaded with hydrophobic drugs aiming to increase its aqueous dispersion. Drug release is conducted under NIR incidence and pH change.

Abstract

Leishmaniasis is a neglected tropical disease with occurrence in Brazil. Amphotericin B (AmB) is employed to treat leishmaniasis clinical symptoms, nevertheless this drug shows low solubility in aqueous media and causes serious side effects¹. In order to reduce these side effects, we developed drug delivery systems (DDS) based on reduced graphene oxide (rGO) functionalized noncovalently with biocompatible polymers. rGO presents good biocompatibility, high capacity to be loaded with hydrophobic drugs and is an excellent photothermal agent due to the absorbance of near infrared light (NIR), which can be used as a stimulus for drug release². This work reports the construction and loading with AmB in two photodispositives based on rGO modified with Pluronic® P123 and polyethyleneimine (PEI), respectively. The devices were prepared from GO followed by noncovalent functionalization with the polymers and reduction with hydrazine hydrate. The devices rGO-P123 and rGO-PEI were confirmed by several characterization techniques such as SEM (Figure 1). The systems were loaded with AmB yielding rGO-P123-AmB and rGO-PEI-AmB with a loading capacity of 94.8 $\mu\text{g mg}^{-1}$ and 97.8 $\mu\text{g mg}^{-1}$, respectively. AmB release studies were performed employing NIR light ($\lambda = 808 \text{ nm}$, 40 W cm^{-2}) and pH change as release stimulus. These studies showed greater AmB release in acidic pH (2.0) for both systems. In addition, the samples irradiated with NIR showed an increase in temperature (hyperthermia).

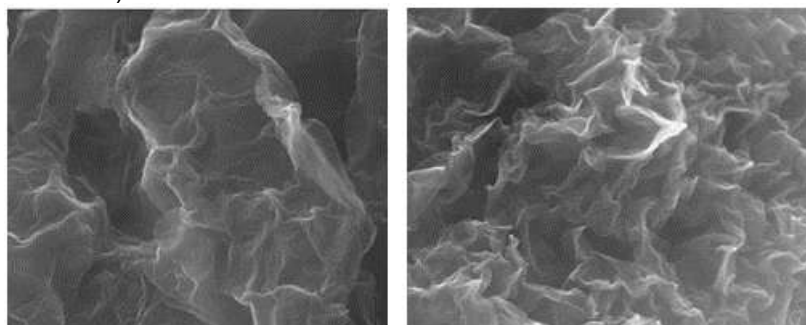


Figure 1: SEM images of rGO-P123 and rGO-PEI, respectively.

Acknowledgments

CAPES, CNPq, FAPERJ, PPGQ-UFF, LQSN, LAME, LAMATE, LAMAR-Caipe, LDRX, Microscopy Platform IB-UFF.

¹ Mendonça, D. V. C. et al. *Exp. Parasitol.* **2018**, 186, 24–35.

² Cheon, Y. A.; Bae, J. H.; Chung, B. G. *Langmuir* **2016**, 32, 2731–2736.

Área: ELE

Nº de Inscrição: 01415

Avaliação simultânea da interação do fungicida carbendazim com os íons metálicos cobre e chumbo, por pulso diferencial.

Aymara da S. Santos (IC),¹ Lúcia Codognoto (PQ),¹ Eliana M. A. Valle (PQ).¹

aymarasnts@gmail.com

¹ Universidade Federal de São Paulo – Instituto de Ciências Ambientais, Químicas e Farmacêuticas, UNIFESP – campus Diadema

Palavras Chave: Carbendazim, Chumbo, Cobre, Voltametria de redissolução anódica, Complexo.

Highlights

Simultaneous evaluation of the interaction of the pesticide carbendazim with copper and lead metal ions, by differential pulse.

Carbendazim can interact with metal ions through the nitrogen and oxygen atoms present in the structure. It was observed that the carbendazim can interact with the copper and lead. In this work, was evaluated the interaction with the both metals, simultaneously, by electroanalytical methods.

Resumo/Abstract

Visando a melhora da qualidade e do rendimento das culturas agrícolas, faz-se uso de substâncias químicas que inibem a proliferação de pragas nas lavouras, denominados agrotóxicos. O metil-benzimidazol-2-il-carbamato (CBZ)¹, denominado comercialmente, carbendazim, é um fungicida, que possui em sua estrutura átomos de oxigênio e nitrogênio, o que permite a interação com íons metálicos^{2,3}. Foi observado que o carbendazim interage com os íons metálicos cobre e chumbo, separadamente. Neste trabalho foi estudado a interação simultânea do carbendazim com os íons metálicos citados, utilizando de voltametria de redissolução anódica por pulso diferencial.

As medidas foram realizadas a partir de soluções estoque de carbendazim $1,0 \times 10^{-3}$ mol L⁻¹, em acetonitrila, $Pb(NO_3)_2$ $1,0 \times 10^{-3}$ mol L⁻¹, água ultrapura, $Cu(NO_3)_2$ $1,0 \times 10^{-3}$ mol L⁻¹, em água ultrapura. As medidas eletroquímicas foram realizadas em um Potenciostato/Galvanostato AUTOLAB PGSTAT128N, com três compartimentos. Eletrodo de trabalho: Carbono Vítreo (GC); Eletrodo de Referência: Ag/AgCl (KCl sat.); Eletrodo auxiliar: placa de platina; Eletrólito de suporte: solução de KNO_3 0,1 mol L⁻¹.

O íon metálico cobre (II) apresenta um pico de redissolução anódica em 0,211 V, o íon metálico chumbo (II) apresenta um pico em -0,616 V. Foi observado com o complexo Cu-carbendazim e Pb-Carbendazim apresentam um pico em -0,048 V e -0,518 V, respectivamente. A fim de avaliar o comportamento destes metais, simultaneamente, em presença do pesticida carbendazim, realizou o estudo combinado dos metais com adição do carbendazim, onde observou-se que a interação entre o CBZ e o chumbo, desloca o potencial para valores mais positivos, e ao interagir com cobre, nota-se o pico do complexo em -0,058V e do metal livre em 0,262V. E assim, observa que mesmo combinado os metais, a interação individual dos mesmos com o carbendazim, não se altera, logo, um metal não influencia diretamente na complexação do outro.

Referências:

[1] SILVA, C. M. M. S, MELO, I. S. Biodegradação de fungicidas benzimidazóis. **Empresa Brasileira de Pesquisa Agropecuária**, p. 141 – 160.

[2] Silva, R. C, BARROS, K. A, PAVÃO, A. C. Carcinogenicidade do carbendazim e seus metabolitos, **Química Nova**, 2014, v. 37, p. 1329 – 1334.

[3] Costa, I.M., Codognoto, L., Valle, E.M.A. J Solid State Electrochem (2017). <https://doi.org/10.1007/s10008-017-3746-5>.

Agradecimentos/Acknowledgments

Ao Instituto de Ciências Ambientais, Química e Farmacêuticas da Universidade Federal de São Paulo – campus Diadema.

Laboratório de Elequímica e Eletroanalítica (LABEE)

CNPq, CAPES e FAPESP (2017/24235-8) pelo suporte financeiro.

AMF stimuli-responsive nanodevice assembled from magnetic nanoparticles and carboxylate pillar[5]arene as a candidate for chemo-hyperthermia therapy

Tamires S. Fernandes (PG),¹ Evelyn C. S. Santos (PQ),^{1,2} Vinicius G. C. Madriaga (IC),¹ Flávio Garcia (PQ),² Vanessa Nascimento (PQ),¹ Célia M. Ronconi (PQ).^{1*}

tamires_soares@msn.com; cmronconi@id.uff.br*

¹Universidade Federal Fluminense, Instituto de Química, Outeiro São João Batista, s/n, Campus do Valonguinho, Centro, 24020-141, Niterói, RJ, Brazil;

²Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas, Rua Dr Xavier Sigaud, 150, Urca, 22290-180, Rio de Janeiro, RJ, Brazil.

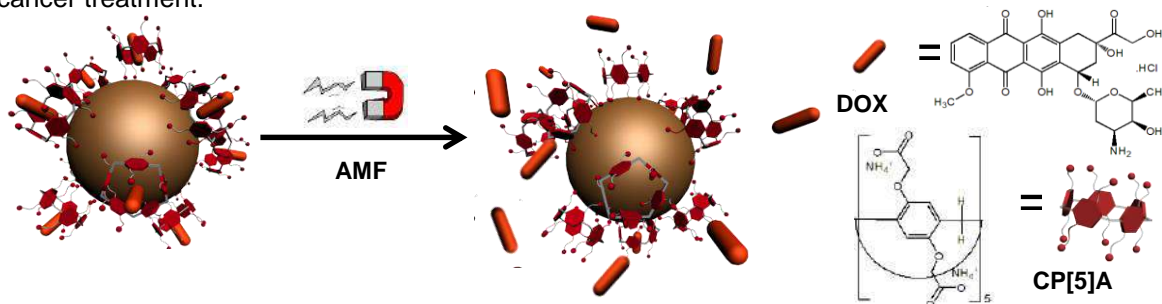
Keywords: (drug delivery systems, magnetic hyperthermia, pillar[n]arenes, doxorubicin delivery, cancer)

Highlights

Herein we report the results of a doxorubicin (DOX) loaded supramolecular alternating magnetic field (AMF) stimuli-responsive nanosystem assembled from superparamagnetic iron oxide nanoparticles and pillar[5]arene-based host-guest macrocycle as a potential nanodevice for cancer treatment.

Abstract

Superparamagnetic iron oxide magnetic nanoparticles (MNPs) are well known for their biocompatibility and hyperthermia properties.¹⁻³ Coating them is fundamental to avoid their agglomeration inside the body and to guarantee colloidal stability.¹ To address this issue macrocycle compounds, such as pillar[n]arenes, are good candidates due to their hydrophobic, electron rich cavities, and easy functionalizations.⁴ In this work we report the synthesis, characterization and operation of an alternating magnetic field (AMF) responsive nanodevice based on MNPs capped with carboxylate-functionalized pillar[5]arene (CP[5]A). The MNP-CP[5]A nanodevice was prepared by mechanical stirring of an acid aqueous solution of the MNPs obtained by Massart method followed by an acid treatment^{2,3} and CP[5]A synthesized as previously described in literature.⁴ For MNP-CP[5]A, absorption bands (ATR-IR) in 1715 (νC=OOH), 1608 (νC=OO⁻), 1400 (νC-OO⁻), 1197 (νHOC-O) and 538 (νFe-O) cm⁻¹, and the displacement of isoelectric point of bare MNPs to an acid pH value in zeta potential measurements confirm the grafting of CP[5]A onto MNP surface. The nanosystem was loaded with DOX as anticancer model drug (MNP-CP[5]A-DOX) resulting in a loading efficiency of 68%. Release studies are being performed under AMF application ($f = 307$ KHz and $H = 200$ Oe) up to 45 °C. MNP-CP[5]A-DOX is expected to be a potential candidate as hyperthermia induced agent and nanocarrier for cancer treatment.



[1] E. C. S. Santos, A. Watanabe, M. D. Vargas, M. N. Tanaka, F. Garcia, C. M. Ronconi, *New J. Chem.*, **2018**, 42, 671-680.

[2] G. B. Silva, M. Marciello, C. J. Serna, M. D. Vargas, C. M. Ronconi, R. Costo, *JBCS*, **2017**, 28, 731-739.

[3] L. Gutiérrez, S. Romero, G. B. da Silva, R. Costo, M. D. Vargas, C. M. Ronconi, C. J. Serna, S. Veintemillas-Verdaguer, M. Del Puerto Morales, *Biomed. Eng-Biomed Te.*, **2015**, 60, 417-425.

[4] T. Ogoshi, M. Hashizume, T. Yamagishi, Y. Nakamoto, *Chem. Commun.*, **2010**, 46, 3708-3710.

Acknowledgments

CAPES, CNPQ, FAPERJ, PPGQ-UFF, LQSN, LAMATE, LAME, LDRX, LaReMN, Microscopy Platform IB-UFF.

42ª Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química: Eixos Mobilizadores em Química

Synthesis and characterization of pure and doped graphitic carbon nitrides for CO₂ adsorption applications.

Luanne E.M. Ferreira (PG),¹ Thiago Custódio dos Santos (PQ),¹ Thiago de Melo Lima (PQ),¹ Célia Machado Ronconi (PQ).¹

luanne.a.93@gmail.com; cmronconi@id.uff.br

¹Universidade Federal Fluminense, Instituto de Química, Outeiro São João Batista, s/n, Campus do Valonguinho, Centro, 24020-141, Niterói, RJ, Brazil;

Keywords: CO₂ adsorption, Carbon nitride, Melamine, Dicyandiamide.

Highlights

Synthesis and characterization of modified carbon nitrides for CO₂ capture has been developed.

Resumo/Abstract

CO₂ capture on porous solids requires materials with high surface area, high selectivity, thermal resistance, and humidity tolerance.¹⁻⁴ Graphitic carbon nitrides (GCN) emerge as interesting materials for gas adsorption due to their inexpensive, easy, and sustainable production as well as their high chemical and physical stabilities. Moreover, the basicity of the terminal amines present as defects in the edges of their sheets enables acid-base interactions of GCN with CO₂ acid molecules.² Therefore, here in we report the synthesis and CO₂ adsorption studies of pure, fluorine (F) and phosphorous (P) doped GCN. GCNs were prepared from melamine and dicyandiamide by the thermal polymerization method, as previously described in literature.⁵ Subsequently, phosphorus (PGCN) and fluorine (FGCN) doped graphitic materials were prepared in different mass proportions. X-ray diffraction (XRD) patterns showed the GCN characteristic peaks at $\theta = 27^\circ$ (002) and $\theta = 13^\circ$ (100) relative to the distance between sheets of the graphitic material and the spacing between these sheets, respectively. Thermogravimetric analysis (TGA) showed two main weight loss events, the first one (100 °C) characteristic of desorption of water molecules and the second one (600 °C) characteristic of material decomposition. Preliminary studies of CO₂ adsorption were performed at low and high pressures at 30 °C (Fig. 1b) and FGCN presented the most promising result among the three materials (0.5392 mmol/g at 20 bar). The syntheses are being optimized to improve the adsorption capacities of this gas.

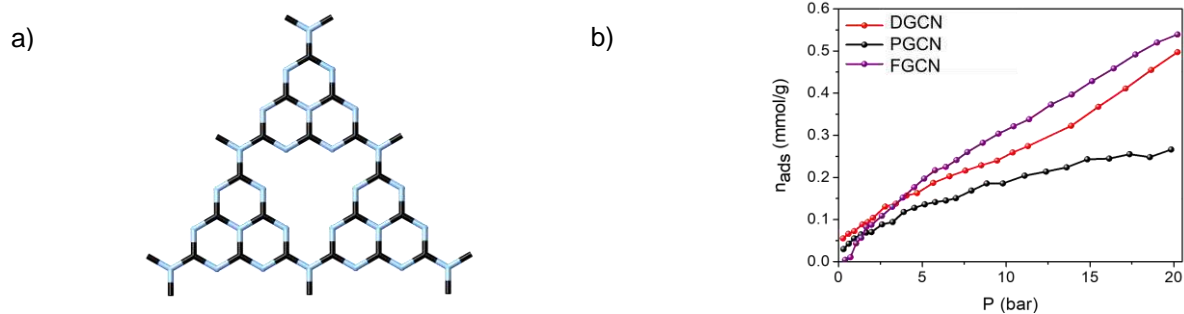


Figure 1: a) Structure of the GCN and b) CO₂ adsorption isotherm.

References:

- [1] Dos Santos, T. C.; Ronconi, C. M. *Rev. Virtual de Quim.*, **2014**, 6, 1, 112–130.
- [2] Dong, G. et al. *J. Photoch. Photobio. C*, **2014**, 20, 1, 33–50.
- [3] Dos Santos, T. C.; Ronconi, C. M. *J. CO₂ Util.*, **2017**, v. 20, p. 292-300.
- [4] Santos, T.C. et al. *Phys. Chem. Chem. Phys.*, **2015**, 17, 11095.
- [5] Wang, N. et al. *Carbon*, **2016**, 109, 141–148.

Agradecimentos/Acknowledgments

CAPES, CNPQ, FAPERJ, PPGQ-UFF, LQSN, LAMATE, LAME, LDRX, RECat.

Área: **FIS**Nº de Inscrição: **01418**

N-grafeno como adsorvente de gases de alto desempenho

Thiago C. Santos (PQ),¹ Jade Barreto (PG),² Fernando Stavale (PQ),² Célia M. Ronconi (PQ)¹

thiagocustodio@id.uff.br; cmronconi@id.uff.br

¹ Instituto de Química, Universidade Federal Fluminense, Campus do Valonguinho, CEP 24020-141, Niterói, Rio de Janeiro, Brasil

² Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas, 22290-180 Rio de Janeiro, RJ, Brasil

Palavras Chave: sólidos adsorventes, adsorção de gases, N-grafeno, armazenamento de H₂, captura de CO₂

Highlights

N-graphene as an adsorbent with high-performance in gas adsorption

- N-graphene with high surface area as an adsorbent of high-performance in CO₂ capture and H₂ storage has been obtained

Resumo

Nas últimas décadas, pesquisadores em todo mundo têm desenvolvido sólidos para serem aplicados na captura de CO₂ e/ou armazenamento de H₂. Grafenos porosos dopados com átomos de nitrogênio (N-grafeno) são um dos materiais mais promissores devido ao seu baixo custo de obtenção. Uma interessante característica dos N-grafenos é dada pela diferença de eletronegatividade dos elementos C e N que resulta na polarização local da superfície dos sólidos, aumentando a força de interação sólido-gás. Quando estes sólidos são submetidos à ativação química, resultam em materiais com altas áreas específicas e elevados volume de poros. Neste trabalho, N-grafeno foi sintetizado em duas etapas: i) síntese do óxido de grafeno (GO) através de um método de Hummers modificado [1] e, em seguida, ii) o produto foi ativado com KOH, na presença de polialilamina (PAA), a 800 °C. O espectro de XPS (*survey*) mostrou sinais relativos as energias de C1s (283,78 eV), N1s (398,18 eV) e O1s (531,78 eV). A partir da integração da área do sinal de N1s foi obtido uma composição de 7,5% de nitrogênio. A desconvolução do espectro de alta resolução do núcleo de N1s mostra que o material é composto por 80,04% de N-piridíneos (399,72 eV) e 19,96% de N-graftílicos (401,58 eV). A isoterma de N₂ mostra perfil tipo IV com histerese tipo 2, caracterizando material mesoporoso contendo poros no formato de garrafa (gargalo estreito e corpo largo). Os altos valores de área específica (BET) e volume de poros (1155 m²/g e 1,3 cm³/g, respectivamente) mostram que o material é adequado para estudos de adsorção de gases. A natureza mesoporosa foi confirmada pela distribuição de tamanho de poros (BJH) com um pico centrado em 4,3 nm. As imagens de MEV confirmaram a natureza porosa do material. Capacidades de adsorção de 2,53 mmol/g (1 bar) e 20 mmol/g (40 bar) obtidas a partir da isoterma de adsorção de CO₂ a 25 °C (Fig. 1(a)) mostram adsorções superiores as de outros grafenos porosos.[1–3] Este resultado pode ser atribuído as superiores características de área e volume de poros junto à presença de átomos de nitrogênio. A partir da isoterma de H₂ a 25 °C (Fig. 1(a)) foi obtida a capacidade de adsorção de 1,3% (p/p) a 40 bar que está muito próxima a uma das maiores adsorções da literatura [4]. Elevados valores de calor de adsorção (-72 a -26 kJ/mol) apresentados na Fig. 1(b) confirmam a presença de fortes interações entre o N-grafeno e CO₂. Experimentos de reuso realizados à temperatura ambiente e 18 bar mostraram insignificantes mudanças da capacidade de adsorção após 10 ciclos, indicando que o material é bastante robusto. Portanto, os resultados apresentados neste trabalho mostram que um N-grafeno com alto desempenho na adsorção de CO₂ e H₂ foi obtido por uma simples rota sintética.

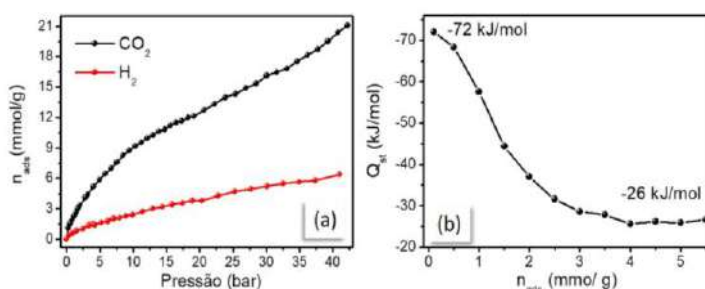


Figura 1. (a) Isotherma de CO₂ e H₂ a 25 °C. (b) Calores de adsorção obtidos a partir das isotermas a 25, 40 e 50 °C utilizando a equação de Clausius-Clayperon.

Referências: [1] Santos TC and Ronconi CM. *J CO₂ Util.* **2017**, 20, 292–300. [2] Chowdhury S and Balasubramanian R. *Ind Eng Chem Res.* **2016**, 55, 7906–16. [3] Chowdhury S, et al. *Chem Eng J.* **2015**, 263, 374–84. [4] Ariharan A, et al. *Graphene* **2017**, 6, 41–60.

Agradecimentos

Agradecemos ao PNPd-Capes pela bolsa de pós-graduação

42ª Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química: Eixos Mobilizadores em Química

Organotin(IV) catalysts: investigation in esterification of oleic acid and glycerol

Mônica A. da Silva (PG), ¹, Anderson S. S. dos Santos (IC), ¹, Antonio J.S. Neto (IC), ¹, Cristian J. Giertyas (PG), ¹, Janaína H. Bortoluzzi (PQ), ¹, Mario R. Meneghetti (PQ), ¹, Simoni M. Plentz Meneghetti (PQ),¹

simoni.plentz@gmail.com

¹Group of Catalysis and Chemical Reactivity, Institute Of Chemistry and Biotechnology, Maceió, Alagoas, Brazil.

Palavras Chave: esterification, tin catalysts, mechanism, glycerol, oleic acid

Highlights

Esterification of OA and GLY were studied at several reaction conditions.

In comparison to the reaction without the catalyst, a reduction of 15% in the activation energy can be observed in the case of BuSnCl₃.

The most active catalytic systems are those that act as typical and pure Lewis acids and the least active systems are those that follow the ligand exchange mechanism.

Resumo/Abstract

Esterification of oleic acid (OA) and glycerol (GLY) was studied in the absence and in the presence of the organotin(IV) catalysts (CAT) dibutyltin dichloride (Bu₂SnCl₂), butyltin trichloride (BuSnCl₃), dibutyltin dilaurate (Bu₂SnLau₂), butyl stannic acid (BuSnO(OH)), and di-*n*-butyl-oxo-stannane (Bu₂SnO). Figure 1 presents the results obtained in the absence of catalyst and using BuSnCl₃.

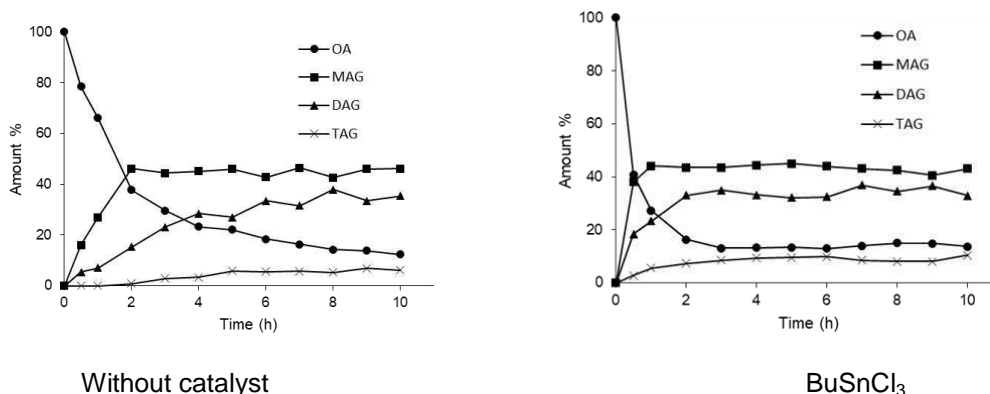


Figure 1. Conversion of OA and yields of MAG, DAG, and TAG (%) at 180 °C, using the OA/GLY/CAT molar ratio of 1/1/0.01 at 2000 rpm, in the absence of catalyst and using BuSnCl₃.

The reactivity order observed at 180 °C using a OA/GLY/CAT molar ratio of 1/1/0.01 was BuSnCl₃ > Bu₂SnLau₂ > Bu₂SnCl₂ > Bu₂SnO > BuSnO(OH), and a k_{ap} of -0.6237 h^{-1} was obtained for BuSnCl₃. The estimated activation energy for the conversion reaction of OA at the above molar ratio using BuSnCl₃ was 60.9 kJ mol^{-1} , whereas it was 71.3 kJ mol^{-1} for the reaction performed without the catalyst. Two mechanisms are accepted to explain the behavior of these catalysts [1]. The most active catalytic systems are those that act as typical and pure Lewis acids, and the least active systems are those that follow the ligand exchange mechanism, suggesting that GLY and AO are involved in the ligand exchange process and may form less reactive catalytic species.

[1] Meneghetti, M.R.; Meneghetti, S.M.P.; *Catal. Sci. Technol.*, **2015**, *5*, 765.

Agradecimentos/Acknowledgments

National Council for Scientific and Technological Development (CNPq), Brazilian Federal Agency for the Improvement of Higher Education (CAPES), Brazilian Innovation Agency (FINEP) and Alagoas Research Foundation (FAPEAL).

Multicomponent Reactions for Synthesis of Anthrazoline Derivatives Donor- π -Acceptor type Using NbCl₅ as Lewis Acid.

Gyordanna Mayara Gaspar da Costa (IC),^{1*} Giovanni Carvalho dos Santos (PG),¹ Vitor Fernandes Moreno (PG),¹ Luiz Carlos da Silva-Filho (PQ).¹

gyordannagaspar@gmail.com

¹ Chemistry Department, School of Sciences, UNESP-Bauru, Av. Eng. Luiz Edmundo Carrijo Coube, 14-01, CEP 17033-360, Vargem Limpa, Bauru, S.P, Brazil

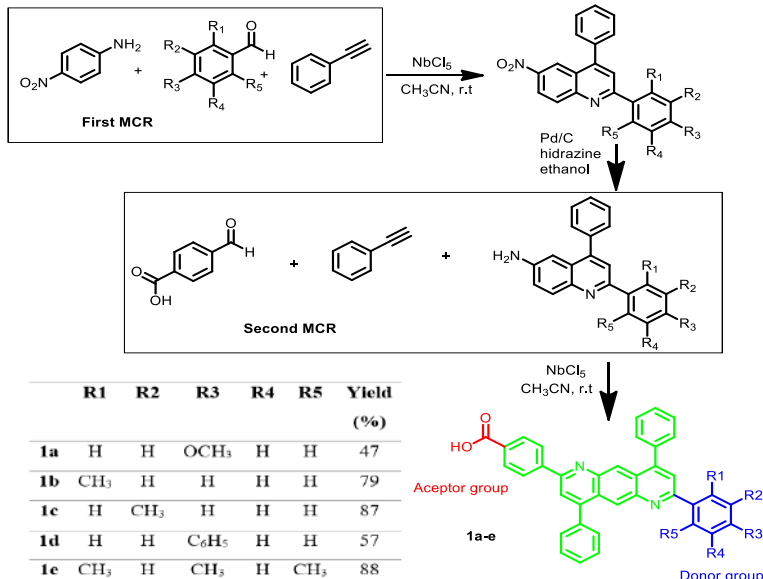
Palavras Chave: (Anthrazoline derivatives, Niobium Pentachloride, One-pot synthesis).

Highlights

Anthrazoline compound have been highlighted in the last year because of the interesting optical properties. Here, we synthesized new anthrazoline derivatives by sequential multicomponent reactions. We proved that niobium pentachloride is a good catalyst to produce anthrazoline compound.

Abstract

Anthrazoline is a compound which has three fused rings, being a central benzene ring and at the extremities pyridinium rings [1]. Diphenylanthrazolines show properties to act as n-type semiconductors and potential applications as organic semiconductors [2]. The problem is that these heterocyclic compounds are generally synthesized from complex starting materials, requiring several steps for synthesis, and in some cases, only symmetrical compounds can be synthesized. Thus, Multicomponent Reactions (MCRs) offer easy access to these derivatives with simple commercially available starting materials [3].



In the figure we can see the scheme of synthesis. We change the substituents used in the first MCR and in the second step of the MCRs the 4-carboxybenzaldehyde was fixed allowing the synthesis of D- π -A type anthrazolines. In general, good results were obtained (47-88% yield). In the two steps we can see that niobium pentachloride acts efficiently in the synthesis of these important new compounds. In this new method, symmetrical and asymmetric anthrazolines can be synthesized. Studies about the optical characterization of compounds are being made. In future, taking advantage of interesting properties, we intend to study in applications such as DSSCs and OLEDs.

Reference:

- [1] Agrawal, A. K.; Jenekhe, S. A. **Chem. Mat.**, 1996, 8.2: 579.
 [2] Tonzola, C. J., et al. **JACS**, 2003, 125.44: 13548.
 [3] a) Santos, G.C., et al. **J. Fluoresc.** 2017, 27, 271. b) Pericherla, K., et al. **Org. let.** 2013,15, 4078

Acknowledgments

FAPESP, CAPES, CNPQ, PROPE-UNESP e CBMM.

Área: _____ **Nº de Inscrição:** _____
 (Inserir a sigla da seção científica (Inserir o número de inscrição do autor que
 para qual o resumo será fez a submissão)
 submetido. Ex: ORG, BEA, CAT)

Obtenção de microfibras de Ecovio contendo extrato de *Coix lacryma-jobi*, com ação antimicrobiana.

Gabriela Lauer Breitenbach (IC),¹ Josiane Caetano (PQ),¹ Marina Giombelli Rosenberger (PG),² Douglas C. Dragunski (PQ),^{1*}

dcdragunski@gmail.com; gabilauerbrei@gmail.com

¹ Centro de Engenharias e Ciências Exatas, Curso de Química Bacharelado, Universidade Estadual do Oeste do Paraná, 85903-000, Toledo, PR, Brasil; ² Curso de Ciências Biológicas, Universidade Federal do Paraná, 85950-000, Palotina, PR, Brasil.

Palavras Chave: Lágrima de Nossa Senhora, *Staphylococcus aureus*, PBAT, PLA.

Highlights

Obtaining Ecovio microfibras containing *Coix lacryma-jobi* extract, with antimicrobial action.
 Decrease in the diameter, roughness and fiber homogeneity after the incorporation of the extract;
 The membrane with extract was effective when tested in the bacterium *Staphylococcus aureus*;

Resumo/Abstract

A partir do uso da técnica de eletrofição foi possível obter uma blenda polimérica contendo o extrato de *Coix lacryma-jobi*. Primeiramente foram obtidas as soluções poliméricas contendo 15% m/v de PBAT/PLA (Ecovio), utilizando como solventes clorofórmio e dimetilformamida (85/15% v/v), inserindo 10% m/m, em relação a massa do polímero, do extrato. Os parâmetros utilizados foram: diferença de potencial 20 kV, distância da agulha ao coletor de 15 cm e o fluxo da solução foi mantido constante em 0,5 mL/h. Todos os experimentos foram realizados utilizando uma temperatura na faixa de 24°C e umidade próxima a 35%. Nas Figuras 1A e 1B, estão as microscopia eletrônica de varredura, a primeira refere-se as fibras sem o extrato, as quais se apresentam mais homogêneas, rugosas, uniformes e sem *beads*, quando comparadas com as contendo extrato, além disso, estas possuem diâmetros menores, isto indica uma possível interação entre o extrato e o polímero, como se o extrato ordenasse melhor as fibras. A partir da análise das transições térmicas por calorimetria exploratória diferencial (DSC), pode-se confirmar alterações na estrutura da blenda polimérica após a inserção do extrato (Figura 1C), promovendo um aumento dos calores de fusão dos picos referentes aos dois polímeros, indicando assim interação entre o extrato e a blenda polimérica. A partir das análises de TGA (Figura 1D) percebe-se que após a incorporação do extrato houve mudanças no início do processo de degradação, tornando-o mais estável termicamente, aumentando a temperatura em ($\approx 25,36^\circ\text{C}$) reforçando novamente que ocorre uma interação entre o extrato e o polímero.

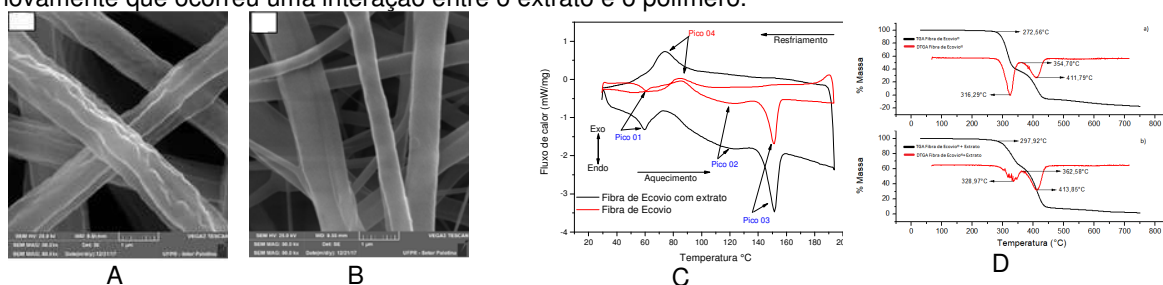


Figura 1 – A) Imagens de Microscopia eletrônica de varredura para blenda de Ecovio® sem extrato; B) com extrato ambos com ampliações de 2000x. C) Termogramas (DSC) referente às blendas poliméricas de Ecovio® com e sem extrato; D) Curva termogravimétrica (TGA) e registro da derivada da curva de decomposição (DTGA), da blenda sem (a) e com (b) o extrato.

Após realizar a caracterização do material e comprovar a interação entre o polímero e o extrato, realizou-se as análises antimicrobianas utilizando o método de disco de difusão (Kirby-Bauer). A blenda contendo o extrato teve a formação de um halo de inibição de 3mm, sendo efetivo para a bactéria *Staphylococcus aureus*.

Agradecimentos/Acknowledgments

À CNPq pela concessão da bolsa de iniciação científica, à Fundação Araucária, CAPES e UNIOESTE.

Extraction of *L*-dopa from seeds of *Mucuna cinerea* by deep eutectic solvent

Bruna T. Silva* (PG),¹ Antonio J. Demuner (PQ),¹ Rita C. S. Superbi (PQ),¹ Cristiane I. Cerceau (TC),¹ Daiane E. Blank (PQ),¹ Marcelo H. Santos (PQ).¹

bruna.tolentino@live.com

¹Departamento de Química, UFV

Keywords: Deep eutectic solvent, *L*-dopa, Parkinson's disease, *Mucuna*, Green chemistry

Highlights

Use of green chemistry in *L*-dopa extraction from *Mucuna* seeds
Natural, biodegradable and selective solvent
Quantification of *L*-dopa by HPLC analyses

Resumo/Abstract

Seeds of *Mucuna* (Leguminosae) have been used in the treatment of Parkinson's disease, due to the presence of *L*-dopa (*L*-3,4-dihydroxyphenylalanine) in its chemical composition (1). *Mucuna* extracts are generally carried out using conventional methods with volatile organic solvents. However, little has been reported about use of alternative extraction methods (2). The objective of this study was to extract *L*-dopa from the seeds of *Mucuna cinerea* using a "green" extraction method with biodegradable and natural deep eutectic solvents (DES) (2). The extractions were performed using different DES and conventional method (ethanol) with heating and magnetic stirring. The DES used were choline chloride/citric acid and choline chloride/urea. For the preparation of the extracts the seed of *Mucuna* were crushed and mixed with DES or ethanol. The quantification of *L*-dopa was made by HPLC analyses. By the conventional method the lowest values of concentrations were obtained. The lowest concentration of *L*-dopa was 0.0170 mg/mL in the ethanolic extract obtained. The highest concentration of *L*-dopa was 0.0204 mg/mL in the extract with choline chloride and acid citric. In the results we can observe that the most efficient method of extraction of *L*-dopa from *Mucuna* seed was using alternative solvents (DES).

(1) KATZENSCHLAGER et al., *J. Neurol. Neurosurgery, and Psychiatry*, **2004**, *75*, 1672-1677.

(2) SMITH et al., *Chem. Rev.* **2014**, *114*, 11060-11082.

Acknowledgment: FAPEMIG, CNPq, CAPES

A Bioinspired Copper(2+) complex with a long-chain alkyl polypyridine ligand and its DNA interaction studies

Maiara Ignês N. dos Santos* (PG),¹ Natalia Prants (IC),¹ Marcelo Melloti (PG),¹ Fernando R. Xavier (PQ),¹

maiara.ignes@gmail.com

¹Laboratório Síntese & Catálise – SINCA, Departamento de Química – UDESC – Joinville-SC, Brasil.

Key-Words: Long alkyl chains; Copper(2+) complexes; DNA interaction.

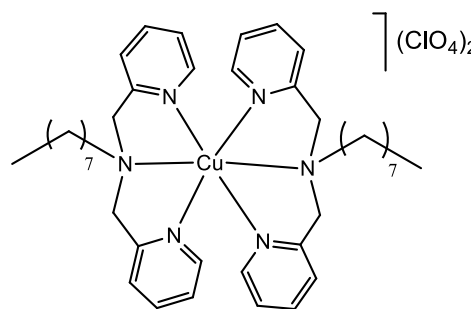
Highlights

Metal complexes containing bioinspired ligands are growing in a variety of medicinal applications. A copper complex was synthesized and had its physicochemical properties determined. Its ability to interact with salmon DNA (ssDNA) was assessed spectrophotometrically and binding constants are being calculated.

Resumo/Abstract

Complexes of other transition metals are being studied as alternative classes of chemotherapeutics instead of the effects of Pt drugs as cisplatin.^[1] Copper complexes are an attractive option on the basis that may give rise to less toxic side effects and may also potentially evade the chemoresistance related to recurrent Pt treatments.^[2] The interaction with DNA range from electrostatic interaction to strong covalent bonding and these interactions can be important for medicinal purposes by blocking or rendering DNA replication impossible by means of binding or cleavage.^[3] One example of molecule that can interact with DNA is bis(2-picoyl)amine (bpma) that is a quite versatile tridentate ligand that can be easily functionalized with pendant groups during its synthesis.^[3] In this sense, bpma was functionalized with a long-chain alkyl group, forming the ligand *N*-octyl-*N*-(2-pyridinylmethyl)-2-pyridinemethanamine (**L^{C8}**) (CAS 223519-70-8) in order to synthesized a novel copper complex. Ligand was characterized by NMR, IR and GC-MS and the complex was prepared by adding a solution of **L^{C8}** (1,0 mmol) in methanol (10mL) in a solution of Cu(ClO₄)₂·6H₂O (0,5 mmol) in methanol (10mL) at room temperature and the solution became green and later, a blue powder was formed which we claim as the complex [Cu (**L^{C8}**)₂](ClO₄)₂ (**1**). Molar conductivity in acetonitrile was measured (Λ_M= 242,1 μS) and has confirmed a 2:1 electrolyte ratio. IR spectra of **L^{C8}** and **1** were comparable and the strong/broad absorption of ClO₄⁻ in **1** confirm the presence of these counter ions. Electronic spectroscopy analysis were run for **1** and two absorption bands were observed (λ_{max}{nm}/ε {M⁻¹ cm⁻¹}: 258 {13660} and 200 {29190} all attributed to intraligand charge transfer processes (ILCT). A stability test was performed for **1** in acetonitrile/HEPES 50% v/v in a UV-Visible spectrophotometer. After 2 hours, no spectral changes were observed which lead us to conclude that the compound is stable. At the present moment, DNA interaction tests are being performed upon salmon DNA (ssDNA) and binding constants (*K_b*) will be calculated.

Figure 1 – Predicted structure for the complex [Cu (**L^{C8}**)₂](ClO₄)₂



[1] J.J. Martínez Medina et al. *Biomed. Pharmacot.* 111 (2019) 414–426 [2] T.J.P. McGivern et al. *Inorg. Chim. Acta.* 472 (2018) 12-39. [3] C. Wende, et. al. *Eur. J. Inorg. Chem.* 16, (2014) 2585.

Agradecimentos/Acknowledgments

UDESC, UFSC, FAPESC, CAPES and CNPq.

Influence assessment of the synthesis ferrite from mineral wastes in crystal violet dye degradation by Photo-Fenton process

¹Luciana B. Biazati (PG), ¹Maria de Fátima F. Lelis (PQ), ¹Eustáquio Vinícius R. de Castro (PQ), ²Bianca de A. Coutinho (IC), ²Márcio Gabriel V. Divalma (IC)

lucianabrunhara@yahoo.com.br

¹Chemistry Department, UFES (Federal University of Espírito Santo); ²Department of Chemistry Engineering, UVV (University of Vila Velha).

Keywords: Waste, Mining, Crystal Violet, Photo-Fenton, Ferrite.

Highlights

Environmental disasters involving mineral wastes cause great damage. The use of these wastes in the production of catalysts have shown to be a promising alternative to water treatment. In this research, the ferrite was used in the waste to be utilized in the crystal violet dye originated by the Photo-Fenton process reaction. The results show the efficiency in the reduction of the organic toxic charge when compared to the use of natural ferrite (Fe_3O_4) and cobalt ($\text{Fe}_{2.62}\text{Co}_{0.38}\text{O}_4$).

Resumo/Abstract

Mining wastes can be used in the synthesis of heterogeneous catalysts as the ferrites, potential auxiliation in the treatment of water contaminated with dyes. The Photo-Fenton process reaction has shown to be quite promising in water treatment with elevated organic charge. It consists in the usage of H_2O_2 , in which with the presence of Fe^{2+} source, forms highly reactive free radicals $\cdot\text{OH}$, that attacks and degrades the organic contaminants. The ultraviolet radiation is part of this reaction, because if increases the process' efficiency. This research proposes to assess the catalysts activity in synthesized ferrites from mining wastes (deposited in the Candonga dam) in the degradation of crystal violet dye. The waste, iron source, was broken apart with chloride acid 1:1 and heat bathed. The iron ion was then used in the ferrite synthesis through the method proposed by Filho et Abreu, using carboxymethylcellulose (CMC) as support to guarantee the reduction of the iron. The endeavour was performed through solar radiation and in natural pH, in a period of 60 minutes. The readings were performed through Espectrophotometry UV-Vis ($\lambda = 575 \text{ nm}$). Tryings performed with natural ferrite (Fe_3O_4) and cobalt ($\text{Fe}_{2.62}\text{Co}_{0.38}\text{O}_4$) was utilized to compare the efficiency of the ferrite degradation produced through mining wastes, both synthesized in laboratory and using the same methods. Samples were disposed with water solution crystal violet (CV) 10 ppm, solution of H_2O_2 0,3 mol.L⁻¹ and ferrite with concentration of 20 mg (Table 1). The outcomes are presented in Figure 1.

| Sample | CV | H_2O_2 | Ferrite waste | Fe_3O_4 | $\text{Fe}_{2.62}\text{Co}_{0.38}\text{O}_4$ |
|--------|--------|-------------------------|---------------|-------------------------|--|
| 1 | 10 ppm | 0,3 mol.L ⁻¹ | ---- | 20 mg | ---- |
| 2 | 10 ppm | 0,3 mol.L ⁻¹ | 20 mg | ---- | ---- |
| 3 | 10 ppm | 0,3 mol.L ⁻¹ | ---- | ---- | 20 mg |
| 4 | 10 ppm | 0,3 mol.L ⁻¹ | ---- | ---- | ---- |

Table 1: Relation of reagents present in the samples

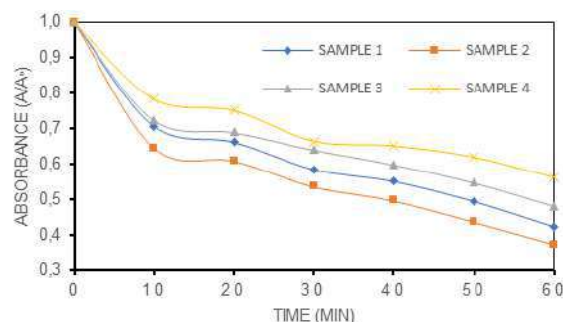


Figure 1: Analysis of the degradation of violet crystal in different systems

The results demonstrate that the ferrite produced from the mining waste was more efficient than the other ferrites in the degradation of the crystal violet dye.

Agradecimentos/Acknowledgments

Federal University of Espírito Santo (UFES); University of Vila Velha (UVV).

42ª Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química: Eixos Mobilizadores em Química

Área: _ORG N° de Inscrição: 1429

Application of the regioselective aryloxylation protocol in the alternative synthesis of a beta blocker drug

Jéssica T. Barcellos (IC), Lucas M. Bruno (IC), Angelo A. T. da Silva (PQ)*

thiesen.jessica@gmail.com; angelo.silva@ifrj.edu.

Instituto Federal de Educação Ciência e Tecnologia do Rio de Janeiro (IFRJ), campus Nilópolis

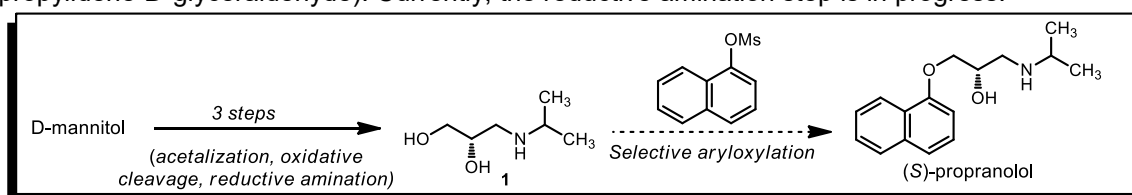
Palavras Chave: Aryloxylation, Beta blocker, Synthesis, Regioselective, Sulfonyl.

Highlights

Synthesis of a beta blocker. Regioselective aryloxylation protocol. The key step involves a sulfonyl transfer reaction. This work enables an alternative synthesis of this class of substances.

Resumo/Abstract

Chemically, beta-blocker structures are generally related to aryloxypropanolamines. This class is characterized by the presence of a -CH₂O- group between the aryl and the ethanolamine chain. Aromatic ring and the positions of its substituents on the ring are the main determinants of β -selectivity.[1] Specifically, propranolol (1-isopropylamino-3-(1-naphthyloxy)-2-propanol) is a drug belonging to a class of antihypertensives, despite having other clinical indications such as antiarrhythmics, angina, heart failure, which are known as adrenergic beta-blockers.[2] The synthesis of propranolol basically follows the same pattern as the other drugs of the aryloxypropanolamine class, where the epichlorohydrin reagent, or other epoxide of similar reactivity, plays the role of a key reagent providing the regio- and stereoselectivity necessary for the molecule-target.[3] This work aimed initially at the stereoselective synthesis of propranolol by the use of a regioselective aryloxylation method. Part of the synthesis of propranolol was performed using protocols already established in the literature with some modifications. In this route, the starting material D-mannitol, reagent more accessible than epichlorohydrin, provide the stereochemistry required for the synthesis of the (S)-enantiomer of propranolol. The key step consists of the regioselective aryloxylation of naphthyl mesylate with propanediol amine **1** via a sulfonyl transfer reaction (Scheme 1).[4,5] The reactions obtained were accompanied by CCF. The products were isolated and purified by conventional methods to identify them by spectrometric techniques (IR, ¹³C and ¹H NMR). When the synthesis of the diacetone product was carried out by changing the equivalents of the reagents, the best yield was 55 %. After this step the best yield of the oxidative cleavage product was 24.1%. Attempts to perform sequential reaction steps without prior purification are currently being performed because of difficulties with the stability of the oxidative cleavage product (2,3-O-Isopropylidene-D-glyceraldehyde). Currently, the reductive amination step is in progress.



Scheme 1 Alternative synthesis of propranolol by using a regioselective aryloxylation protocol.

- [1] D.J. Abraham, *Burger's Medicinal Chemistry and Drug Discovery*, John Wiley & Sons, Inc., Hoboken, NJ, USA, 2003.
- [2] L.A. Bortolotto, F.M. Consolim-Colombo, *Rev Bras Hipertens* 16 (2009) 215–220.
- [3] R.S. Vardanyan, V.J. Hruby, *Synthesis of Essential Drugs*, 1. ed, Elsevier, Amsterdam, 2006.
- [4] N.W. Sach, D.T. Richter, S. Cripps, M. Tran-Dubé, H. Zhu, B. Huang, J. Cui, S.C. Sutton, *Org. Lett.* 14 (2012) 3886–3889.
- [5] A.A.A.T. da Silva, M.L. FELICIO, V.M.F. CERQUEIRA, *RELATÓRIO TÉCNICO-CIENTÍFICO - PIBICT 2016-2017*: IFRJ, Nilópolis, 2017.

Agradecimentos/Acknowledgments

Financial support from IFRJ (PROCIÊNCIA) and CNPq.

Reação de Mannich catalisada por enzimas imobilizadas em nanotubos de titanato

Juliane B. Kosctiuk (IC),¹ Cristiane Pilissão (PQ).¹

jbkosctiuk@gmail.com; cristianepi@yahoo.com.br.

¹Departamento de Química e Biologia, UTFPR.

Palavras Chave: Nanotubos de titanato, Catálise enzimática, Mannich, Estereosseletividade.

Highlights

This study used enzymes as catalysts in the Mannich reaction using benzaldehyde, cyclohexanone and aniline, which provides a simpler and greener method for the synthesis of β -amino carbonyl compounds with high selectivity and also shows the potential of their immobilization on titanate nanotubes which may increase their stability and efficiency.

Resumo/Abstract

As enzimas se destacam como catalisadores por serem quimio, regio e estereosseletividade, além de atuarem em condições reacionais brandas. Entretanto, elas podem perder estabilidade ao longo do tempo ou em condições extremas de reação ou em solventes orgânicos, desnaturando-se. Para contornar este problema, elas são imobilizadas em suportes, aumentando sua estabilidade, recuperação e eficiência.¹

Neste projeto, os nanotubos de titanato foram sintetizados através do método hidrotérmico², misturando 0,5 g de TiO₂ em 100mL de NaOH 10M em um reator de Teflon e aquecendo a 120°C por 24h, o sobrenadante obtido foi submetido à lavagens ácidas até pH 2 e posteriores lavagens aquosas até atingir pH neutro. O produto obtido foi caracterizado através das análises de MEV, DRX, FTIR e Raman, evidenciando a formação dos nanotubos (Figura 1).

Para a reação de Mannich foram usados ciclohexanona (3mmol), benzaldeído (1mmol) e anilina (1mmol) em 2 mL de solvente (etanol ou etanol/água 95:5), a 45°C durante 24h. Como catalizador, utilizou-se 25mg das enzimas *Candida antarctica* (CALB) ou a lipase pancreática do porco (PPL), e 30%mmol de L-prolina como padrão. O produto obtido (Figura 2), foi caracterizado e quantificado por ¹H RMN, através do qual foi possível observar a estereosseletividade com relação a formação de diastereoisômeros, resultando nas proporções cis/trans, conforme descrito na Tabela 1.

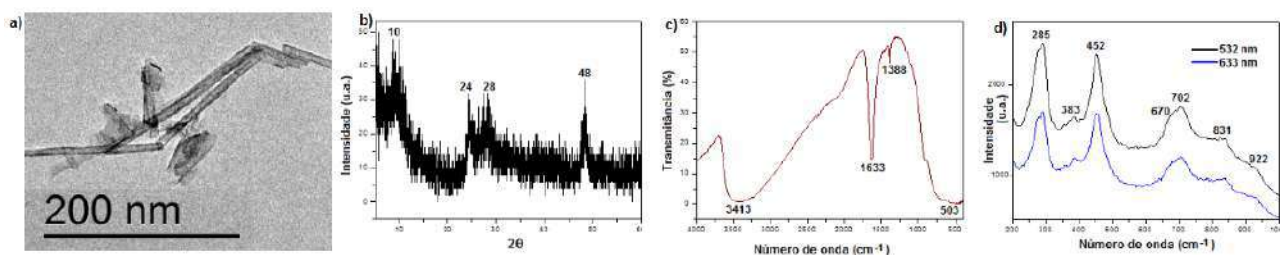


Figura 1. a) Microscopia Eletrônica de Transmissão (MET), b) DRX, c) FTIR, d) Raman.

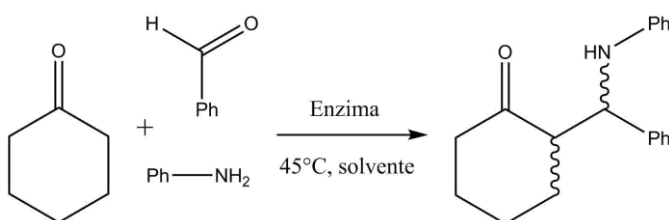


Figura 2. Reação de Mannich catalisada por enzimas

Tabela 1. Proporções cis/trans do produto.

| Solvente | Catalisador | Cis:trans |
|-------------|-------------|-----------|
| Etanol | L-prolina | 12:88 |
| Etanol | CALB | 37:63 |
| Etanol | PPL | 48:52 |
| Etanol/água | L-prolina | 22:78 |
| Etanol/água | CALB | 34:66 |
| Etanol/água | PPL | 44:56 |

Agradecimentos/Acknowledgments

CNPq, CAPES, DAQBi-UTFPR, LabRMN-UFPR, CME-UFPR, FINEP.

Referências:

- ALLOCHIO FILHO *et al.* *Tetrahedron* **2017**, *73*, 50, 6977-7004.
- BAVYKIN; WALSH. *Titanate and Titania Nanotubes*. Cambridge: RSC, **2010**.

Comparação da eficiência na cloração do cicloexano de sistemas homogêneo e heterogêneo contendo cobre(II)

Eduardo da S. Neves (PG)^{1*}, Jéssica da S. Maciel (IC)², Christiane Fernandes (PQ)¹, Leonardo M. Lube (PQ)², Adolfo Horn Jr. (PQ)¹.

eduardosnevesiff@gmail.com

¹Universidade Estadual do Norte Fluminense, UENF; ²Instituto Federal Fluminense, IFF

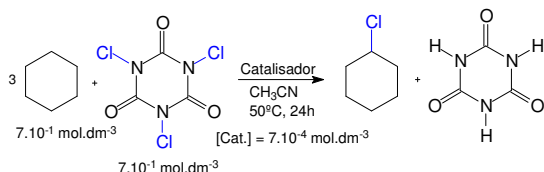
Palavras Chave: Ácido tricloroisocianúrico, halogenação de alcanos, química verde, clorocicloexano, NaX, NaY.

Highlights

Cyclohexane chlorination can be reached by the system containing trichloroisocyanuric acid and $\text{Cu}(\text{ClO}_4)_2$. The homogenous system showed higher conversion than the heterogeneous ones (zeolites NaX and NaY). The systems showed 100% selectivity for chlorocyclohexane after 24h, at 50°C.

Resumo/Abstract

A cloração de hidrocarbonetos pode representar um importante caminho para transformar essa classe de substâncias em produtos de maior valor agregado. Recentemente descrevemos um novo sistema catalítico ambientalmente amigável para a funcionalização do cicloexano em clorocicloexano, no qual utiliza o ácido tricloroisocianúrico (TCCA) como agente halogenante e um complexo mononuclear de cobre(II) como catalisador, levando a conversão de $32,0 \pm 1\%$ a 25°C e $44,7 \pm 0,4\%$ a 50°C com 100% de seletividade¹. Apesar da reconhecida reação de cloração dos alcanos, é raro na literatura trabalhos que utilizam sais simples e/ou suportados em zeólitas a fim de catalisar reações deste tipo. Neste trabalho, apresentamos uma comparação dos resultados referente à reação de cloração do cicloexano catalisada por $\text{Cu}(\text{ClO}_4)_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$ e deste sal suportado nas zeólitas NaX e NaY. A zeólita NaX foi preparada a partir da mistura do aluminato de sódio (NaAlO_2) com hidróxido de sódio (NaOH) e silicato de sódio (Na_2SiO_3) em água destilada, já a NaY foi preparada através de silicatos hidratados de alumínio (Caulim, $\text{Al}_2\text{O}_3 \cdot 2\text{SiO}_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$) com hidróxido de sódio (NaOH) em água destilada². O íon Cu^{2+} foi incorporado a partir de solução aquosa de $\text{Cu}(\text{ClO}_4)_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$. A quantidade de cobre incorporada foi quantificada por espectroscopia de absorção atômica. As reações de cloração (Esquema 1) foram realizadas em frascos de vidro selados, mantidos sob agitação magnética e controle de temperatura (50°C) por 24h, com volume final de solução de 2,0 cm^3 . Ao fim desta reação, uma alíquota de 500 μL foi transferida para o tubo de RMN contendo o padrão dimetilformamida (DMF, $\text{C}_3\text{H}_7\text{NO}$) na mesma concentração molar do cicloexano inicialmente reagido, mantendo-se uma proporção teórica de 1:1. Após análise da mistura por ressonância magnética nuclear (RMN) de ¹H, a quantificação é feita por integração das áreas dos sinais referente ao clorocicloexano, cicloexano e do padrão (Tabela 1).



Esquema 1. Reação de cloração do cicloexano.

Tabela 1. Quantificação do clorocicloexano.

| Catalisador ^a | % de conversão |
|---|----------------|
| $\text{Cu}(\text{ClO}_4)_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$ | 28,5 |
| NaX | 20,6 |
| NaY | 19,1 |

^a 7.10^{-4} mol. dm^{-3} , razão Sub:Oxid:Cat = 1000:1000:1

O sistema estudado levou a formação seletiva do clorocicloexano. Verifica-se que o sistema homogêneo foi cerca de 40% mais eficiente do que os sistemas heterogêneos. O tipo de zeólita (X, Y) não afeta significativamente o rendimento. Os sistemas aqui estudados apresentaram menor eficiência do que o complexo de cobre recentemente descrito por nós, o qual apresentou uma conversão de $44,7 \pm 0,4\%$,¹ indicando que o desenvolvimento de novos complexos de cobre é de relevância para a obtenção de catalisadores com maior atividade.

Agradecimentos/Acknowledgments

UENF, CNPq, CAPES e FAPERJ

¹MELO, I. L.; LUBE, L. M.; NEVES, E. S.; TERRA, W. S.; HORN, C. F.; MATOS, C. R. R.; FRANCO, R. W. A.; RESENDE, J. A. L. C.; VALENTE, D. C. A.; HORTA, B. A. C.; CARDOZO, T. M.; HORN, A. Jr. *Appl. Catal. A-Gen.* v. 562, p. 150-158, 2018.

²HILDEBRANDO, E. A.; ANGÉLICA, R. S.; NEVES, R. F.; VALENZUELA -DIAZ, F. R. *Cerâmica*, v. 58, p. 453-458, 2012.

42ª Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química: Eixos Mobilizadores em Química

Synthesis of 4-(phenylselenenyl)resveratrol and its potential antioxidant effect.

Maika Janine Lazzaris (PG),^{1*} Samuel Rodrigues Mendes (PQ).¹

maikalazzaris@hotmail.com

¹Departamento de Química, UDESC.

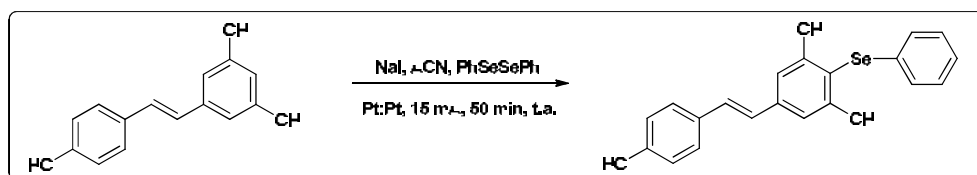
Palavras Chave: Derivados de resveratrol, Selênio, Antioxidante.

Highlights

Resveratrol (RSV) is a compound that exhibits high antioxidant activity, as well its analogues. Organic selenium compounds, similarly, are essentials in scavenging free radicals in the cell medium. RSV derivatives containing selenium atoms have potential as novel antioxidant agents more efficient. The chosen synthetic electrochemical route for the formation of selenides was well succeed in the formation of the 4-(phenylselenenyl)resveratrol compound with 57% yield.

Resumo/Abstract

Quando há uma sobrecarga nos mecanismos antioxidantes celulares, os efeitos deletérios das Espécies Reativas de Oxigênio - EROs podem causar graves patologias como o Mal de Alzheimer (MA)¹. A busca de medicamentos para tratar doenças neurodegenerativas como o MA, trazem a síntese de produtos com alto poder antioxidante. A molécula de resveratrol (RSV), amplamente difundida como antioxidante na literatura, foi alvo de pesquisas visando seu uso em doenças como o MA graças a sua eficiência contra processos de estresse oxidativos. Em contrapartida, derivações na molécula de RSV aumentam sua biodisponibilidade no organismo e criam estruturas sinérgicas². De forma semelhante, compostos contendo átomos de selênio foram investigados extensivamente por possuírem papel fundamental na atividade antioxidante celular³. Derivados de RSV com a introdução de átomos de selênio possuem potencial para novos agentes antioxidantes mais eficientes. Isto posto, este trabalho busca a síntese de selenetos derivados do RSV e a investigação de sua atividade antioxidante. Um caminho sintético para a selenação do RSV, verificado abaixo, usa condições brandas por meio da síntese eletroquímica⁴.



A reação gerou produtos de substituição eletrofílica, onde os cátions PhSe^+ interagem com sítios nucleófilos. Isto leva a crer, que a selenação de moléculas como o RSV pode ser realizada via oxidação de compostos como o PhSeSePh para gerar os eletrófilos necessários para a reação investigada. Foram testados TBA.BF_4 e KI como eletrólitos de suporte, no entanto, no uso do NaI a reação apresentou o maior rendimento, alcançando 57%. A selenação do RSV por via eletroquímica mostrou-se uma metodologia eficiente com vistas a formação de um novo agente antioxidante. O próximo passo será testar outros substratos derivados de PhSeSePh e acompanhar a atividade antioxidante dos compostos sintetizados.

¹ BISWAS, S.; DAS, R.; BANERJEE, E. R. AIMS Biophysics 2017, 4, 596-614.

² CORPAS, R. *et al.* Molecular Neurobiology, 2018. DOI: 10.1007/s12035-018-1157-y.

³ ZAMBERLAN, D. C. *et al.* Neuroscience, 2014, 278, 40–50.

⁴ RÖSE, P. *et al.* Beilstein J. Org. Chem., 2015, 11, 174–183.

Agradecimentos/Acknowledgments



Development of new synthetic routes to obtain pyrazole-benzimidazoles derivatives and evaluation against *Trypanosoma cruzi*

Byanca S. Ferreira (PG)*, Mauricio S. dos Santos (PQ).

byancaferreira@outlook.com

Laboratório de Síntese Orgânica (LABSINTO) – Chemistry and Physics Institute, Federal University of Itajubá, 1303 BPS Avenue, Itajubá, MG.

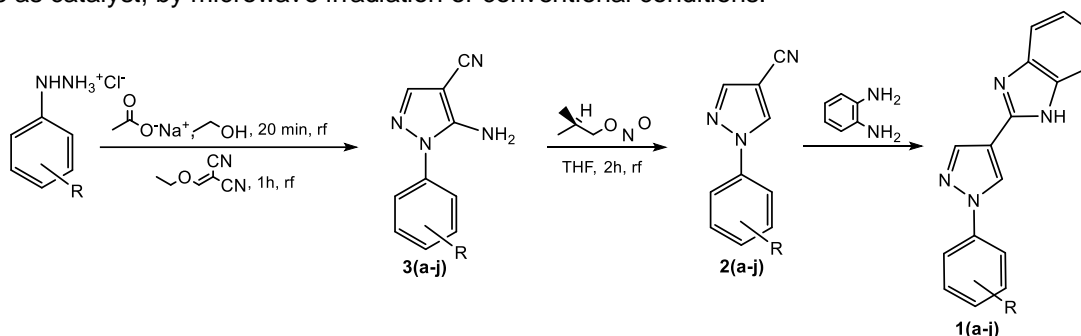
Keywords: Organic synthesis, Benzimidazoles, Pyrazoles, Chagas disease.

Highlights

The pyrazole-benzimidazole derivatives have potential trypanocidal activity. All twenty key intermediates cyanopyrazoles have been synthesized and characterized. The targets **1a** and **1b** were obtained.

Abstract

Chagas disease remains a serious health problem in Latin America affecting almost 14 million people, mainly the poorest.¹ The treatment consists on only two drugs: benznidazole and nifurtimox, efficient in just acute phase and show several side effects, such as skin problems, anorexia, weight loss, among others.² In search for new drugs, our research group has investigated the synthesis of benzimidazole derivatives for evaluation against *T. cruzi*, the protozoa responsible for Chagas Disease. The benzimidazole ring has been chosen since this pharmacophoric group presented a broad spectrum of activity, including trypanocidal.^{3,4} This work reports the synthetic route to obtain **1(a-j)** in three steps (Scheme 1). The key intermediates **3(a-j)** were obtained starting from arylhydrazine hydrochlorides, sodium acetate, ethoxymethylenemalononitrile and ethanol as solvent.⁵ After that, **3(a-j)** give **2(a-j)** by an aprotic deamination reaction with isobutyl nitrite and THF.⁵ Finally, the targets **1(a-j)** were synthesized from **2(a-j)**, *o*-phenylenediamine (OPD) and carbon disulfide as catalyst, by microwave irradiation or conventional conditions.



a: R=H b: R=3-Cl; c: R=3,5-diCl; d: R=3,4-diCl; e: R=4-F; f: R=3-F; g: R=3-Br h: R=4-OCH₃; i: R=4-Br; j: R=4-Cl

Scheme 1. Route of synthesis of the benzimidazole derivatives **1(a-j)**.

Until now, all intermediates **2(a-j)** and **3(a-j)** were obtained. The final product **1a**, obtained by microwave irradiation, using 50W for 110 min, was completely characterized by FTIR, HRMS and NMR and the trypanocidal activity has been evaluated. By conventional conditions, **1a** and **1b** were obtained at 170°C for 25h and 123°C for 43,5h, respectively.

Acknowledgments

We thank FAPEMIG, RQ-MG, CAPES, CNPq and Fiocruz for all support in this project.

¹ DNDi. Disease Factsheet: Chagas disease (2018).

² PÉREZ-MOLINA, J. A.; MOLINA, I. *Lancet* **391** 82–94 (2018).

³ OH, S. *et al. Eur. J. Med. Chem.* **84** 395–403 (2014).

⁴ DÍAZ-CHIGUER, D. L *et al. Mem. Inst. Oswaldo Cruz* **109** 757–760 (2014).

⁵ SANTOS, M. S. *et al. Bioorg. Med. Chem.* **21**, 7451-7454 (2011).

Synthesis and characterization of pyrazole-tetrazole hybrids

Rafaela Corrêa Silva (PG),* Maurício Silva dos Santos (PQ).

rafaelacorrea13@gmail.com

Laboratório de Síntese Orgânica (LABSINTO), Chemistry and Physics Institute, Federal University of Itajubá, 1303 BPS Avenue, Itajubá, MG.

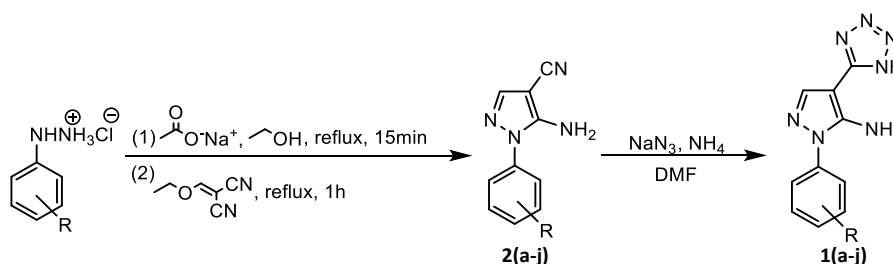
Keywords: Tetrazoles, Pyrazoles, Organic synthesis.

Highlights

Tetrazole has been studied due to its diversified biological activity. This ring is a five-membered heteroaromatic which is considered a carboxylic acid bioisostere. Given the proven biological properties and activities of tetrazole derivatives, the synthesis of new derivatives allows the extension of the spectrum of action of these substances, in addition to increasing the range of antimicrobial therapeutic agents on the market.

Abstract

In the last decades the tetrazole group and its derivatives have been gaining attention in synthetic chemistry due to its biological and pharmacological potential, such as antibacterial, antifungal, antiviral, anti-inflammatory, antioxidant, antimalaric, anticonvulsant, antipyretic, anti-allergic, antihypertensive.¹⁻³ Tetrazole is a five membered heteroaromatic acid, being considered a bioisoster of the carboxylic acid group. This bioisosteric property allows a 10-fold increase in lipophilicity, bioavailability, and reduces the side effects of the drug.^{3,4} Based on these biological activities, the synthesis of new compounds with tetrazole nucleus increases the range of therapeutic agents in the market, allowing access to new compounds which can be a great source for screening new prototypes. Our research group has synthesized several pyrazole-tetrazole hybrids and evaluated them with regard to antileishmanial activity. Simultaneously, the tetrazole ring has been reported as a pharmacophoric group in antibacterial compounds.⁵⁻⁷ The main objective of this work is to synthesize ten 5-amino-(1-aryl-1*H*-pyrazol-4-yl)-1*H*-tetrazoles **1(a-j)** in only two steps. The first step consists on cyclization reaction between arylhydrazines and ethoxymethylenemalononitrile producing the intermediates **2(a-j)**. After that, **2(a-j)** are subjected to a [3+2] cycloaddition reaction generating derivatives **1(a-j)**, second Scheme 1.^{6,7} All of the compounds were completely characterized by FT-IR, HRMS and NMR.



Scheme 1. Synthetic route to obtain 5-amino-(1-aryl-1*H*-pyrazol-4-yl)-1*H*-tetrazoles **1(a-j)**.

References

1. S. Middala *et al.* *Med. Chem. Res.*, **25**, 283–291 (2016).
2. S. N. M. Boddapati, *et al.* *J. Organomet. Chem.*, **866**, 177–183 (2018).
3. S. Bommagani, *et al.* *Bioorg. Med. Chem. Lett.*, **29**, 172–178 (2019).
4. C. Gao, *et al.* *Eur. J. Med. Chem.*, **163**, 404–412 (2019).
5. J. V. Faria, *et al.* *Bioorg. Med. Chem.*, **25**, 5891–5903 (2017).
6. M. S. dos Santos, *et al.* *Heterocyclic Chem.*, **49**, 1425–428 (2012).
7. V. dos Santos Faiões, *et al.* *Chem Biol Drug Des.*, **83**, 272–277 (2014).

Acknowledgments

This work is a collaboration research project of members of the Rede Mineira de Química (RQ-MG) supported by FAPEMIG-Brazil: Project CEX-RED-00010-14 and Programa Primeiros Projetos: CEX-AP2-01014-14. We thank the Program for Technological Development in Tools for Health-RPT-FIOCRUZ for use of its facilities.

Influência da Granulometria da Zeólita Clinoptilolita na Adsorção dos Íons Cu^{2+} e Zn^{2+}

Luana Fieszt (IC),¹ Estefany de Andrade (IC),^{1*} Beatriz M. Moraes (IC),¹ Beatriz dos Anjos (IC),¹ Gabriela M. Batista (IC),¹ Maria L. Biavatti (TC),² Clóvis A. Rodrigues (PQ),³ Marina da S. Machado (PQ).¹

marinamachado@univali.br; estefanydeandrade@edu.univali.br

¹Engenharia Química; ²Química Marinha e Poluição Aquática; ³Programa de Pós-Graduação em Ciências Farmacêuticas; Universidade do Vale do Itajaí, SC, Brasil.

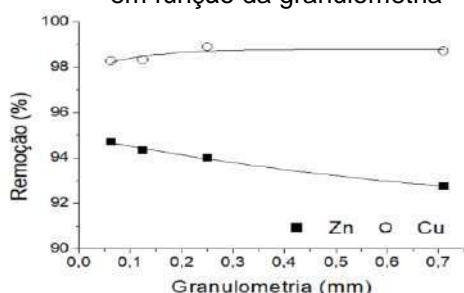
Palavras Chave: Adsorção, Clinoptilolita, Granulometria, Cobre, Zinco.

Highlights

Influence of particle size of clinoptilolite zeolite adsorption of ions Cu^{2+} and Zn^{2+} . Clinoptilolite with different granulometries was employed in the removal of metals. There were no significant differences in the removal of Cu. For Zn, the removal was favored for smaller grain sizes.

Resumo/Abstract

A zeólita clinoptilolita (Celta Brasil, Lote 408.6/15384) com diferentes granulometrias (0,063mm, 0,125 mm, 0,250 mm e 0,710 mm), foi empregada na adsorção de cobre e zinco de soluções aquosas. Preparou-se uma solução de 25 mg/L de cobre a partir do Sulfato de Cobre ($\text{CuSO}_4 \cdot 5\text{H}_2\text{O}$, grau analítico – VETEC) com pH de $4,1 \pm 0,1$ e outra de 25 mg/L de zinco com Sulfato de Zinco ($\text{ZnSO}_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O}$, grau analítico – VETEC) com pH $5,2 \pm 0,2$. Os experimentos foram realizados em batelada em temperatura controlada de 25°C , com 20mL de solução, 0,75g de zeólita, tempo de 360 minutos, com agitação constante. O teor de metal foi determinado por Espectrometria de Absorção Atômica com atomização por chama, Perkin Elmer 3110. Os resultados da Figura 1 indicaram que para o cobre não foram observadas diferenças significativas na porcentagem de remoção com a granulometria. Para o zinco, a remoção foi favorecida com granulometrias menores. Observou-se ainda uma maior afinidade da zeólita pelo cobre. No estudo da adsorção dos metais aplicou-se as expressões das isotermas de Langmuir e Freundlich com experimentos realizados com 0,1 g de clinoptilolita com granulometria de 0,71 mm e variando-se a concentração dos metais de 5 a 500 mg/L em um tempo de 360 minutos. O modelo de Langmuir apresentou uma melhor correlação para a adsorção de Cobre, 98,45% contra 96,78% pelo modelo de Freundlich e para zinco a melhor correlação foi fornecida pela equação de Freundlich, 95,80% contra 94,54% do modelo de Langmuir. De acordo com o modelo de adsorção de Langmuir, os valores de q indicaram a sequência: $\text{Cu}^{2+} > \text{Zn}^{2+}$ indo de acordo com a Figura 1. A diferença na capacidade de adsorção da zeólita natural de íons de metais pesados pode ser devido a uma série de fatores que incluem por exemplo o diâmetros de hidratação. Os raios de hidratação dos cátions hidratados são de 4,19 Å para o Cu^{2+} e 4,30 Å para o Zn^{2+} (MOTSI et al., 2009). As partículas menores como



o cobre devem idealmente ser adsorvidas mais rapidamente e em maiores quantidades comparado com as partículas maiores, desde que as partículas menores possam passar os microporos e canais da estrutura de zeólita com facilidade.

MOTSI, T.; ROWSON, N. A.; SIMMONS, M. J. H. International Journal of Mineral Processing, v. 92. Adsorption of heavy metals from acid mine drainage by natural zeolite. Elsevier, United Kingdom, p. 42-48, February 2009.

Agradecimentos/Acknowledgments

Bolsa de pesquisa FUMDES – Art. 171, Artigo 170, PROPEC/UNIVALI e Laboratório de Oceanografia Química (LOQ)-Univali pelas análises dos metais e a Empresa Celta-Brasil pelo fornecimento da zeólita.

42ª Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química: Eixos Mobilizadores em Química

MIL-101(Cr): A brief comparison of synthesis cost and sustainability between the mechanochemical and solvothermal synthetic method.

Jussara L. Miranda (PQ),¹ Paula M. Moraes (IC)¹, Luiza C. Moura (PQ)¹

jussara@iq.ufrj.br; paulamirandamoraes@gmail.com

¹Instituto de Química, UFRJ;

Key-words: Metal-organic Frameworks; Green Chemistry; MIL-101(Cr).

Highlights

A comparative analysis of raw material and energy costs was done between a method based on the principles of Green Chemistry to synthesize MIL-101(Cr), employing the mechanochemical method, and the traditional one, the solvothermal.

Resumo/Abstract

Metal-Organic Frameworks (MOFs) are interesting materials for several applications such as gas adsorption, energy storage and catalysis¹. MIL-101(Cr) presents high chemical, solvent and thermal stability and a very high superficial area² which make it a compelling option to perform various functions in different industries. However, its cost to be synthesized and the use of hazardous solvents as hydrofluoric acid (HF) and dimethylmethanamide (DMF) are the major obstacle to its large-scale implementation in industries.

In this study, the cost of the mechanochemical¹ and solvothermal¹ methods of synthesis were analyzed based on time of synthesis, quantity of reagents and cost of person worked hour. The obtained results indicated that the energetic cost of the become almost four times higher since it demands more steps and time of synthesis and the use of DMF and HF that increases substantially the price of needed raw materials (Fig1 and Table 1).

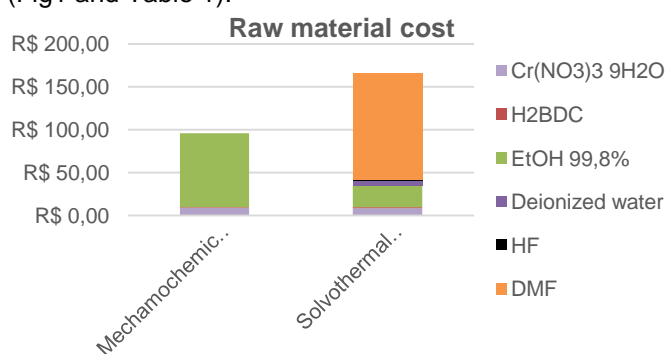


Fig1. Raw material cost to synthesize 5g of MIL-101(Cr)

| | Comparative results | |
|--------------------------------------|---------------------|---------|
| | MC | ST |
| BET surface area (m ² /g) | 3439 | 2764 |
| Number of steps | 5 | 14 |
| Total energy (kWh)* | 159.69 | 1187.82 |
| Total hours (h) | 28.5 | 97.5 |
| Energy cost (R\$)* | 274.85 | 1464.39 |
| Total cost (R\$)* | 798.25 | 3092.78 |

Table 1. MC = mechanochemical method; ST = solvothermal method;* Value to synthesize 5g of MIL-101(Cr)

The characterization of MIL-101(Cr) obtained from both methods were compared by TGA, DRX, FT-IR and BET surface area analysis. The results show that mechanochemical MIL-101(Cr) presents stability and high BET surface area (Table 1) which makes it perfectly able to perform its function besides having reduced synthesis' cost and avoiding the use of toxic chemicals.

1. FALABELLA, E. S. A., ARROYO, P. A.; BARROS, M. A. S. D. and MIRANDA, J. L. The Future of Zeolite and MOF Materials in Zeolites and Metal-Organic Frameworks From lab to industry Edited by Blay, V.; Bobadilla, L. F and Garcia, A. C. Atlantis Press B.V. Amsterdam University Press B.V., Amsterdam 2018.
2. Leng, K.; Sun, Y.; Li, X.; Sun, S.; Xu, W. Rapid Synthesis of Metal-Organic Frameworks MIL-101(Cr) Without the Addition of Solvent and Hydrofluoric Acid, 2016.
3. V V Butova et al. Russ. Chem. Rev. 85 280, 2016.

Agradecimentos/Acknowledgments

Institute of Chemistry- Federal University of Rio de Janeiro.

Voltammetric Evaluation of an Activated Biochar Modified Carbon Paste Electrode for the Determination of Caffeic Acid

Ana Paula Z. Moscardi (IC)*, Cristiane Kalinke (PG), Luiz Humberto M. Jr. (PQ), Márcio F. Bergamini (PQ)

anazmoscardi@gmail.com

Departament of Chemistry, Universidade Federal do Paraná (UFPR), Curitiba, PR, Brazil

Keywords: *Voltammetric Determination, Modified Electrode, Activated Biochar, Caffeic Acid.*

Highlights

Chemically activated biochar with HNO₃; Carbon paste modified sensor; Caffeic acid stripping voltammetric determination; phenolic compounds determination in wine samples.

Resumo/Abstract

Biochar is a carbon-rich material obtained from the pyrolysis of biomass, such as wood, manure or leaves, with oxygen-limited conditions [1]. This material presents a highly functionalized and porous surface, which confers a high capacity of adsorption/interaction with different compounds, inorganic and/or organic. In addition, an increase in the amount of these functional groups can be obtained by the chemical activation of the material, improving its adsorptive capacity. Due to these properties, biochar can be used as an electrode modifier, aiming the spontaneous preconcentration and voltammetric determination of species, such as caffeic acid. This phenolic compound is a natural origin antioxidant, and can be found in teas, coffee, wines, among others. Considering the concepts presented above, the present work refers to the construction of a carbon paste modified electrode with activated biochar with HNO₃ (CPME-AB) for preconcentration and determination of caffeic acid. In the project, the biochar was prepared from castor oil cake and activated in acid/oxidant conditions [2]. The voltammetric determination of caffeic acid was performed by cyclic voltammetry, which offers advantages since that it shows easy operation, high sensitivity and low instrumentation cost. Experimental procedure was performed in three steps: (1) caffeic acid preconcentration (1.0 mmol L⁻¹) in open circuit; (2) cyclic voltammetric measurement from 0.0 to 0.8 V, with a scan rate of 75 mV s⁻¹; (3) cleaning electrode surface. The analytical potential of CPME-AB was evaluated by the monitoring of caffeic acid oxidation process, by formation of o-quinone, and presented response signals with greater intensity compared to an unmodified and modified electrode with biochar precursor. This demonstrates that the activated biochar contributed effectively to the higher preconcentration capacity of caffeic acid, due to the increase of functional groups and porosity, proven by characterization analyses. Thus, the experimental parameters were evaluated and optimized, aiming the improvement of the response signals. After the construction of the analytical curve, the sensor presented a linear region from 1.0 μmol L⁻¹ to 3.0 mmol L⁻¹ and a sensitivity of 11.06 μAL mmol⁻¹. Limits of detection and quantification of 30.90 and 103.0 nmol L⁻¹ were obtained, respectively. The method was applied for caffeic acid determination in red, rosé and white wine samples, and showed comparable to the Folin-Ciocalteu spectroscopic method. In addition, recovery percentages between 90.6 and 118.6 %, and reproducibility of ± 5.06 % were obtained. The proposed method presented satisfactory results, demonstrating the analytical potentiality of a simple, easily built and low cost sensor, constructed with allowing the determination of caffeic acid with high sensitivity and detectability.

[1] LEHMANN, J.; JOSEPH, S. *Biochar for environmental management: science and technology*. Earthscan: London, 2009.

[2] KALINKE, C., OLIVEIRA, P. R., OLIVEIRA, G. A.; *Anal Chim Acta* 2017, 983, 103-111.

Agradecimentos/Acknowledgments

We gratefully acknowledge financial support from Brazilian foundations CAPES, and Universidade Federal do Paraná (UFPR)

Área: ANA

Nº de Inscrição: 01440

Glyphosate-cation clusters detection by mass spectrometry for quantitative analysis

Erika A. I. Rivero (IC), Renan Karpfenstein (PG), Diogo Oliveira-Silva (PQ)*

erika.rivero@unifesp.br; dosilva@unifesp.br

Departamento de Química, Instituto de Ciências Ambientais, Químicas e Farmacêuticas, Universidade Federal de São Paulo – Campus Diadema, Diadema, Brazil.

Palavras Chave: Electrospray, Adduct, Sensitivity

Highlights

Novel mass spectrometry detection of glyphosate in positive polarity using metal cations. Glyphosate clusters presented good correlation, dynamic range and sensitivity for quantitative analysis.

Resumo/Abstract

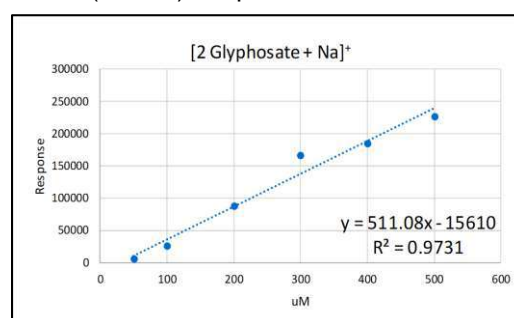
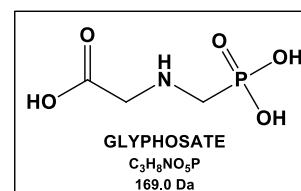
Glyphosate is one of the most commonly used pesticides in the world. Its popularity stems from price, low environmental impact, effectiveness for weed control and pre-harvest desiccation as well [1]. Although early research on glyphosate has reported accepted toxic impact on humans, recent studies suggest glyphosate and its related compounds can affect human health [2]. The continuous use of glyphosate has raised concern regarding residue appearance in water, food, soils and other environmental matrices, exposing both humans and livestock to toxicological risks [3]. Several analytical methodologies for the determination of glyphosate and its related compounds have been reviewed and ionic chromatography, electrochemical detection or non-derivatization approaches were introduced. However, methods based on pre or post-column derivatization remained as standard procedures and reliable protocols persists as a challenge.

In this study we investigated the non-derivatized glyphosate detection by mass spectrometry using positive electrospray ionization in presence of several cations. The aim of our contribution is to develop an alternative low time-consuming and robust strategy to quantify glyphosate in water, biological and environmental matrices.

Glyphosate solutions (50 – 500 uM) in presence of cations (H^+ , Li^+ , Na^+ , K^+ , Ca^{2+} , Ni^{2+} , Zn^{2+} , Cu^{2+} , Co^{2+} , Sn^{2+} , Fe^{3+}) were analyzed by direct injections on a micrOTOF-QII (Bruker) coupled to a Prominence LC (Shimadzu) using ESI+ and recording 50-1200 m/z range.

The preliminary outcomes showed a consistent preference of glyphosate to form clusters constituted of 2 to 4 molecules complexed to the cation. The consistence of the clusters presence was evaluated considering the dynamic range and the determination coefficient (R^2) of calibration curves obtained by cluster detection in different glyphosate concentrations. The figure presents the results by detecting m/z 361.0 ($2M+Na^+$) employing 300 uM of Na^+ . When the angular coefficient is compared with $M+Na^+$ (m/z 192.0) and $3M+Na^+$ (m/z 530.0) results, both presented lower sensitivity (496.79 and 194.45, respectively). A very unique behavior was observed applying Fe^{3+} as cation since no glyphosate adduct was detect.

Eventhough glyphosate has been a constant subject on analytical studies, there is no evidence of the detection of its clusters nor its implications on literature. Further investigations are under conduction to confirm the complete set of results that will be presented during the conference.

[1] J. Chromatogr. A, **2016**, 1443, 93.[2] Sensors **2018**, 18, 2961.[3] Sci. Total Environ. **2018**, 645, 34.

Agradecimentos/Acknowledgments

FINEP, CAPES, CNPq and FAPESP

Synthesis of CdTe quantum dots: Evaluation of Reaction Parameters and of the Dependent Optical Properties

Luana Caroline de Oliveira Lima (IC), Lucas Tadeu Aparecido da Rosa (PG), Cinthia das Dores Aguiar (PG), Isabela de Souza Aversa (IC), Ellen Raphael (PQ), Luciano Sindra Virtuoso (PQ)

luanacarolineolima@gmail.com; tlucas.23@gmail.com

Grupo de Pesquisa em Química de Colóides, Instituto de Química, Rua Gabriel Monteiro da Silva, 700, UNIFAL-MG

Palavras Chave: *Quantum dot, Semiconductors, aqueous synthesis, surface ligant, quantum yield.*

Highlights

Synthesis of CdTe quantum dots by the one-pot method in aqueous medium.

Optimization of synthesis conditions.

High quantum efficient CdTe quantum dots.

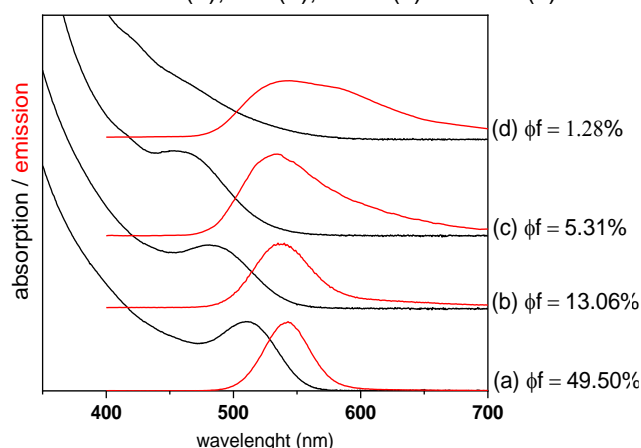
Abstract

Quantum dots (QDs) are nanocrystalline semiconductors with dimensions ranging from 2 to 10 nm that exhibit strong quantum confinement. This feature provides these materials with highly dependent optical and electronic properties of their size that can be easily modulated. In this study, the synthesis of cadmium telluride (CdTe) with different sizes was performed by the one-pot method in aqueous medium and ambient atmosphere. The influences of the reaction time, precursors Cd/Te molar ratios, pH and surface stabilizers on the quantum yield (QY) of the obtained CdTe QDs were investigated systematically (Table 1). The obtained QDs were characterized by X-ray diffraction and UV-Vis, fluorescence and infrared spectroscopies. The analyses revealed that the synthesis in the condition of pH 10.0, Cd:Te molar ratio of 20: 1 and using thioglycolic acid as surface stabilizer (SS), provided the best optical properties, that is, with low Stokes displacement, high yield ($\Phi = 49.5\%$) and low polydispersity in the size distribution of nanocrystals (FWHM). The Figure 1 below shows the absorption and emission spectra for this synthesis. In it it is possible to observe a decrease in the presence of trap bands with the use of the ratio SS:Cd of 1.5:1.

Table1. Control Parameters: precursors proportions, surface stabilizers, pH, quantum yield, Stokes Shift and Full Width at Half Maximum.

| Cd:Te | SS / Cd : LS | pH | Φ_f (%) | Stokes Shift (nm) | FWHM (nm) |
|--------|--------------|----|--------------|-------------------|-----------|
| 1 : 5 | MPA 1:2 | 10 | 33.1 | 33.07 | 60.49 |
| 1 : 10 | MPA 1:2 | 10 | 28.7 | 34.42 | 61.62 |
| 1 : 14 | MPA 1:2 | 10 | 26.8 | 34.44 | 55.47 |
| 1 : 14 | MPA 1:2 | 10 | 45.8 | 30.29 | 55.69 |
| 1 : 14 | MPA 1:2 | 11 | 26.6 | 31.06 | 57.30 |
| 1 : 14 | MPA 1:2 | 10 | 45.9 | 27.67 | 61.43 |
| 1 : 20 | MPA 1:2.3 | 10 | 24.8 | 30.31 | 54.26 |
| 1 : 20 | TGA 1:1.5 | 10 | 49.5 | 34.19 | 42.86 |
| 1 : 20 | TGA 1:2 | 10 | 13.1 | 53.11 | 51.07 |
| 1 : 20 | TGA 1:2.3 | 10 | 48.5 | 43.96 | 40.78 |
| 1 : 20 | TGA 1:2.5 | 10 | 5.3 | 63.84 | 90.13 |
| 1 : 20 | TGA 1:3 | 10 | 1.28 | 99.66 | 117.86 |

Figure 1. Absorption and emission spectra of QD CdTe synthesized under the conditions of: 120 min, SS:Cd = 1.5:1 (a), 2:1 (b), 2.5:1 (c) and 3:1 (c).



Acknowledgments

CAPES, FAPEMIG and PRPPG at UNIFAL-MG.

References:

GAO, J., FEI, X., LI, G., Jiang, Y., & LI, S. *The effects of QD stabilizer structures on pH dependence, fluorescence characteristics, and QD sizes.* Journal of Physics: Applied Physics, v.51; n.28, 285101. 2018.

Remoção de Níquel de Efluentes Aquosos Sintéticos com Mordenita

Estefany de Andrade (IC),¹ Luana Fieszt (IC),¹ Beatriz M. Moraes (IC),¹ Gabriela M. Batista (IC),¹ Maria L. Biavatti (TC),² Clóvis A. Rodrigues (PQ),³ Marina da S. Machado (PQ).¹

estefanydeandrade@edu.univali.br

¹Engenharia Química; ²Química Marinha e Poluição Aquática; ³ Programa de Pós-Graduação em Ciências Farmacêuticas; Universidade do Vale do Itajaí, SC, Brasil.

Palavras Chave: Adsorção, Zeólita, Níquel.

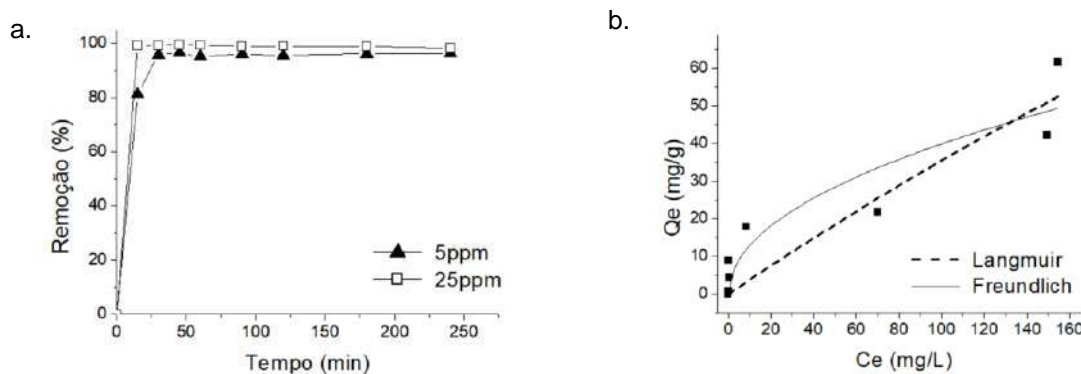
Highlights

Nickel Removal of Synthetic Aqueous Effluents with Mordenite. It was used 0.1 g of Na-mordenite zeolite in the removal of nickel in aqueous solutions, in a batch reactor. The results indicate the removal of Ni⁺² greater than 95% in 30 minutes.

Resumo/Abstract

A toxicidade de metais pesados em efluente aumenta a cada ano e se acumula nos organismos vivos. O objetivo do trabalho foi remover níquel de efluente aquoso sintético com a zeólita Na-mordenita. As cinéticas de adsorção foram realizadas em batelada, com 20 ml de solução aquosa de níquel em temperatura ambiente (25°C) e agitação constante. As soluções foram preparadas a partir de Sulfato de Níquel II (NiSO₄·6H₂O, grau analítico - Neon) com pH mantido em 6. Trabalhou-se com 0,1 g de zeólita (comercial, Zeolyst) e foram avaliados o tempo de contato (0-240 min), o teor do metal (5 e 25 ppm) e o comportamento do pH das soluções após processo de adsorção. O teor de metal foi determinado por Espectrometria de Absorção Atômica com atomização por chama, Perkin Elmer 3110. Os resultados indicaram que a partir de 15 minutos o pH após a adsorção ficou constante em 7±0,3 independente da concentração do metal na solução, indicando que o sistema atingiu o equilíbrio, estabilizando a adsorção. Os estudos cinéticos (Figura 1a) indicaram uma remoção superior a 95% em 30 minutos, independente da concentração de Ni⁺² na solução. Assim, foi possível obter uma alta porcentagem de remoção de Ni⁺² com a Na-mordenita nas condições estudadas num tempo muito curto. Para o estudo da adsorção de níquel pela zeólita Mordenita aplicou-se as expressões das isotermas de Langmuir e Freundlich com experimentos realizados com 0,1 g de mordenita e concentrações de 5 a 500 mg/L em um tempo de contato de 120 minutos (Figura 1b). Verificou-se que o processo de adsorção foi favorável tanto por Langmuir (R_L está entre 0 e 1) como por Freundlich (n entre 1 e 10). No entanto o processo adaptou-se melhor à isoterma de Freundlich, apresentando r² de 0,8754, enquanto o modelo da isoterma de Langmuir o valor de r² foi de 0,8555.

Figura 1: (a) % de remoção de íons Ni²⁺ em função do tempo para efluentes com de 5 e 25 ppm de Ni²⁺ e (b) Isotermas de adsorção de íons Ni²⁺.



Agradecimentos/Acknowledgments

Bolsa de pesquisa FUMDES – Art. 171; PROPEC/UNIVALI e Laboratório de Oceanografia Química (LOQ) da Escola do Mar, Ciência e Tecnologia da Univali pelas análises de níquel.

Área: MAT*(Inserir a sigla da seção científica para qual o resumo será submetido. Ex: ORG, BEA, CAT)***Nº de Inscrição: 1443***(Inserir o número de inscrição do autor que fez a submissão)*

pH sensitive magnetic nanohydrogel for drug delivery

Rodolfo D. Piazza* (PQ)¹, João Victor Brandt (PG)¹, Jaime Vega-Chácon (PG)¹, Rodrigo F. C. Marques (PQ)¹, Miguel Jafelicci Jr (PQ)¹

miguel.jafelicci@unesp.br; rodolfo.piazza@unesp.br

¹Laboratory of Magnetic Materials and Colloids, Department of Physical–Chemistry, São Paulo State University- UNESP

Key Words: Sensitive-hydrogels; Nanohydrogels, drug delivery, Release mechanism

Highlights

pH sensitive magnetic nanohydrogel for drug delivery

Key Words: Sensitive-hydrogels; Nanohydrogels, Drug delivery, Release mechanism.

Resumo/Abstract

Nanohydrogels consist in dispersions of nanostructured hydrogel obtained by cross-linked polymer networks that, when synthesized in polysaccharide-based matrix, reduce the non-specific recognition and absorption by plasmatic proteins responsible for reticuloendothelial system uptake, increasing its circulation time and bioavailability. The aims of the present work were to investigate the incorporation capacity of DFK by magnetic nanohydrogel platform and its surface features. Besides, the DFK release profile were studied in different dissolution media to elucidate the efficiency of magnetic nanohydrogel as a suitable drug delivery system. The presence of DFK bands on FTIR spectra indicated that it was encapsulated into the polymeric chains of magnetic nanohydrogel platform. The encapsulation efficiency was 97% at 1.5 mg mL⁻¹ of DFK solution. The high uptake value is attributed to the interactions of hydrogen bonds between the hydroxyl groups of dextran and the chloride and/or amides of the DFK molecule. The DFK cumulative release profile of nanohydrogel sample carried out in different dissolution media. At PBS media, a high release rate was observed in the first 24 hours, whose released value correspond to a 46%, followed by slow release rate until 170 hours, which result in 90% of DFK released. However, when the HCl solution was employed as dissolution media, the burst release was only 3% of DFK on the first 24 horas and reach a maximum release of 6%. Due to the low DFK release on HCl solution, the sample was exchange to PBS media. After exchange of the dissolution media the DFK release rate increase instantaneously, reaching the total release in 45 hours only. The magnetic nanohydrogel platform show a pH sensitive behavior, being suitable for drug delivery system.

Agradecimentos/Acknowledgments

The authors thank the financial support of the Brazilian agencies São Paulo State Research Foundation (FAPESP), Coordination for Higher Education Personnel Improvement (CAPES), Financing Studies and Projects (FINEP), and National Council of Technological and Scientific Development (CNPq).

Área: BEA

Nº de Inscrição: 01444

Avaliação dos teores minerais de amoras (*Morus nigra* L.)

Paula Tonatto Carlos Pereira (IC),^{1*} Arthur Klein Goelzer (IC),¹ Vera Lucia Scapin (IC),² Ricardo Sachini (PG),³ Bianca Schweitzer (PQ).⁴

paulatonatto48@gmail.com;

¹UNIARP – Universidade Alto Vale do Rio do Peixe, Caçador/SC, CEP: 89.500-000; ²UNIARP – Universidade Alto Vale do Rio do Peixe, Caçador/SC, CEP: 89.500-000; ³UDESC – Universidade do Estado de Santa Catarina, Lages/SC, CEP: 88.520-000; ⁴EPAGRI – Empresa de Pesquisa Agropecuária e Extensão Rural de Santa Catarina, Estação Experimental de Caçador, Caçador/SC, CEP: 89.500-000.

Palavras Chave: *Morus nigra*, Avaliação mineral, Nutrientes

Highlights

Evaluation of blackberries' mineral content. Blackberries (*Morus nigra*) were evaluated for Nitrogen (N), Phosphorus (P), Potassium (K), Calcium (Ca) and Magnesium (Mg).

Resumo/Abstract

Conhecida popularmente como amora ou amora preta, *Morus nigra* é uma espécie de origem asiática com grande capacidade de adaptação a diferentes climas e altitudes. No Brasil foi introduzida pela Embrapa no início da década de 70 e tem demonstrado boa adaptação. A produção ainda é tímida, apesar de todo o potencial que a fruta oferece, sendo consumida *in natura* ou em doces, como sorvetes e sobremesas. Em algumas cidades do sul do Brasil, este fruto encontra-se à beira de rios e em meio a vegetação, sendo sua produção agrícola pouco representativa como fonte de renda para produtores. O objetivo deste trabalho foi analisar os teores de macronutrientes presentes nos frutos frescos de amora. As amostras foram coletadas no município de Caçador/SC e destinadas para análise mineral no Laboratório de Ensaio Químico da Estação Experimental da EPAGRI em Caçador/SC. Foram analisadas as concentrações de Nitrogênio (N), Fósforo (P), Potássio (K), Cálcio (Ca) e Magnésio (Mg), nas polpas frescas das amoras. As amostras foram solubilizadas em ácido sulfúrico concentrado e peróxido de hidrogênio 30%, em seguida aquecidas a 150°C durante 2 horas. Para determinação de N utilizou-se o método kjeldahl. Para quantificação de P usou-se o método colorimétrico com molibdato/vanadato em meio ácido, posteriormente estimado em espectrofotômetro UV-VIS, marca Varian, em 420 nm. Os teores de K, Ca e Mg foram determinados em espectrofotômetro de absorção atômica, marca PerkinElmer, modelo AA200. Todas as análises foram feitas em triplicata e o valor expresso representa a média encontrada. A concentração de N encontrada foi de 2597 mg.Kg⁻¹ e P foi 1073 mg.Kg⁻¹, representando aproximadamente 5 vezes o que é encontrado desses minerais em polpas frescas de maçã, por exemplo. A concentração de K foi de 1362 mg.Kg⁻¹, sendo semelhante ao encontrado em outras frutas como maçã e pera. Os teores de Ca e Mg foram de 332 e 257 mg.Kg⁻¹, respectivamente, representando valores até 7 vezes superior ao encontrados em outras frutas como maçã ou uva. Os frutos de amora preta colhidos em Caçador apresentaram elevados teores minerais, mostrando que a amora pode representar um incremento nutritivo na alimentação humana e, com o aumento do consumo, uma importante fonte de renda, especialmente para pequenos produtores.

Agradecimentos/Acknowledgments

EPAGRI – Empresa de Pesquisa Agropecuária e Extensão Rural. Estação Experimental de Caçador

Área: AMB

Nº de Inscrição: 01445

Utilização de biomassa de maracujá amarelo (*Passiflora edulis f. flavicarpa*) *in natura* como bioadsorvente de Cd e Pb em água.

Marcos O. Melo (PQ),¹ Tailan Q. Cavalcante (IC),^{1*}

marcosomelo@uefs.br; cavalcante.tailan@hotmail.com

¹Departamento de Ciências Exatas e da Terra (DEXA), Universidade Estadual de Feira de Santana.

Palavras Chave: Adsorção, Metais, Biomassa, Bioadsorvente, Meio Aquoso, Reaproveitamento

Highlights

Utilization of biomass of yellow passion fruit (*Passiflora edulis f. Flavicarpa*) *in natura* as a bioadhesive of Cd and Pb in water. Bioadsorption of Cd and Pb in water. Reutilization of biomass of passion fruit biomass.

Resumo/Abstract

A UNESCO anunciou em 2017 que todos os países, exceto os mais desenvolvidos, lançam uma grande quantidade de águas residuais no meio ambiente sem tratamento adequado. Em âmbito global, esses números podem chegar a mais de 80% (UNESCO, 2017). Os resíduos descartados carregam uma grande quantidade de metais potencialmente tóxicos, podendo ser bioacumulados por animais e plantas, consequentemente trazendo grande risco à saúde dos seres humanos. (RAMOS, et al. 2016; MELO, 2017). A remoção de íons metálicos em meio aquoso é complexa e cara. A adsorção vem ganhando espaço devido sua alta eficiência e baixo custo (MENEZES, 2010, apud RAMOS, 2016.) Brasil é o maior produtor de maracujá do mundo, sendo que 95% deste produto é destinado as indústrias de sucos que geram resíduos de cascas do maracujá, sendo viável o estudo deste material como bioadsorvente. Neste sentido, agrega-se valor a casca de maracujá que seria descartada (EMBRAPA, 2017).

Neste trabalho, foi avaliada a eficiência da biomassa oriunda da casca do maracujá-amarelo (*Passiflora edulis f. flavicarpa*) *in natura* como bioadsorvente de metais potencialmente tóxicos como o cádmio e chumbo em meio aquoso.

A biomassa foi cortada e posta para secar a 100°C por 6 horas para desidratação. Depois foi triturada e peneirada em peneiras de 150 à 45 mm. A fração granulométrica escolhido foi a faixa de 45 a 75 mm (325-200 Tyler/mesh). As imagens em MEV apresentaram superfície bastante irregular. A análise de FTIR indicou a presença de grupos carbonila, hidroxila, aromático e ligações C-O características de ésteres. Os grupos funcionais observados favorecem a adsorção de cátions metálicos na superfície do bioadsorvente. O ensaio de potencial de carga zero (PCZ) indicou o pH 4,0 como valor de equilíbrio. Valores acima do PCZ encontrado (4,0) são favoráveis ao processo pois a superfície do bioadsorvente estará carregada negativamente.

Foi feito um planejamento fatorial (2³) para escolha das melhores condições de adsorção variando a massa do bioadsorvente, o pH da solução e o tempo de contato. As concentrações após a adsorção foram determinadas por FAAS. As melhores condições foram pH 7, massa de 30 mg e tempo de 60min. O material conseguiu remover 81,23% de cádmio e 73,61% de chumbo nestas condições. Os estudos cinéticos realizados apontaram adsorção máxima em torno de 10 minutos de contato para o Cd²⁺ e 15 minutos para o Pb²⁺. Os dados experimentais dos ensaios cinéticos se ajustaram melhor ao modelo de pseudo segunda ordem com coeficiente de determinação (R²) acima de 0,99. Isotermas de adsorção foram produzidas nas temperaturas 25°C (ambiente), 35°C, 45°C, 55°C. Os dados experimentais foram submetidos aos modelos de Langmuir e Freundlich e, se ajustaram ao modelo de Freundlich para o Cd²⁺ e ao de Langmuir para o Pb²⁺. À temperatura ambiente (25°C) o bioadsorvente atingiu capacidade máxima (q_{máx}) nos valores de 8,49 mg.g⁻¹ para Cd²⁺ e 0,96 mg.g⁻¹ para Pb²⁺. A maior capacidade de adsorção para o Pb²⁺ aconteceu à 55°C e foi de 3,45 mg.g⁻¹. Os valores de capacidade máxima encontrados são compatíveis com a literatura para materiais bioadsorventes (MELO, 2017; SILVA et al., 2016.; SANTOS et al., 2011).

A biomassa de casca de maracujá amarelo apresentou-se como um bom adsorvente para Cd²⁺ e Pb²⁺, comparável ao carvão ativado comercial, sendo um material de baixíssimo custo pois é utilizado *in natura* passando apenas por secagem e trituração.

Agradecimentos/Acknowledgments

LAPRON (UEFS), NEA/LEPETRO (UFBA), LAMUNE (UFBA)

Área: AMB

Nº de Inscrição: 01446

Identification, Structure Elucidation and Toxicity evaluation of Degradation By-Products of Fipronil in Chlorination Processes

Daiana R.E. Santo² (IC), Tarciane Domanski² (IC), André Luis C. Barros¹ (PG)*,

Robson José C.F. Afonso² (PQ)

daiana.santo@aluno.ufop.edu.br; andre_lcb@hotmail.com;

¹ Environmental Engineering Postgraduate Program (Proamb) - UFOP, ² Chemistry Department - UFOP

Keywords: Pesticides, Disinfection By-Products, Chlorination, High-Resolution Mass Spectrometry, Toxicity Tests.

Highlights

- The Fipronil was quickly and completely degraded in the chlorination process.
- Four DBPs were identified which biological assays demonstrate higher toxicity than the original compound.

Abstract

Occurrence of organic microcontaminants of emerging concern in the environment may cause biological damage even at low concentrations. These compounds can contaminate water sources used for public supply systems and increase the risks to human health. In addition, chlorination disinfection process can lead to the formation of a complex mixture of disinfection by-products (DBPs), which can be more toxic and persistent in the environment than the original compound. In these context, pesticides deserve major attention, particularly in Brazil, currently the world largest consumer of pesticides, even though it doesn't have the largest cultivated area. (Albuquerque *et al.*; Bombardi, 2017). The insecticide Fipronil has been detected with high frequency in Brazilian freshwater and there is a lack of studies regarding to its chlorination. For this study the first steps were to analyze the removal of Fipronil and to identify and elucidate chlorination DBPs in different reaction times (0,15,30,60,720,1440 min) using an High-Resolution Mass Spectrometer (ESI-IT/ToF) with electrospray ionization. In a second step, the acute toxicity, of the result solutions, was tested in *Artemia salina*. In addition, computational toxicity prediction methods were used to measure the toxicity of development in animals and humans, the average lethal dose (LD50) in rats by oral exposure and the mutagenic effects (Ames test) of the DBPs identified. The degradation of the pesticide reaches 100% within 60 minutes of chlorine exposure and it was possible to identify four structures formed by Fipronil chlorination. The most abundant by-product was not described in the specialized literature and it showed to be very stable when submitted to chlorination reaction. The other by-products were only described in studies involving photolysis or photocatalysis and their formations were attributed to radical chain reactions. By means of the obtained results, it was possible to propose a possible degradation route for Fipronil based on different reaction mechanisms. The biological assay demonstrated that the resulting solutions were toxic to *A. salina* in all reaction time. However, only the solution exposed to the chlorine for 24 hours presented higher toxicity in *A. salina* assays when compared to the Fipronil solution. Additionally, the results of in-silico toxicity assays, using the (Q)SAR methodology in the software T.E.S.T from US EPA, revealed that the DBPs can be potentially toxic for the development of animals and humans.

Acknowledgments

PROGRAD, UFOP, DEQUI, FAPEMIG, CAPES.

Síntese e caracterização de adsorventes à base de quitosana

José Adolfo O. Chagas (PG),^{1*} Emanuella Ribeiro (IC),¹ Gustavo O. Crispim (IC),² Lucas C. N. Mo (IC),² Bianca P. Pinto (PQ),¹ Claudio J.A. Mota (PQ),^{1,2,3}

adolfo_oliveiraqp@yahoo.com.br; adolfo_oliveiraqp@yahoo.com.br

¹Instituto de Química, UFRJ; ²Escola de Química UFRJ; ³INCT Energia e Ambiente

Palavras Chave: Sustentabilidade, Biomassa, Quitosana, Adsorventes Básicos, Carbonização Hidrotérmica.

Highlights

Synthesis and characterization of chitosan-based adsorbents. The hydrothermal carbonization (HTC) of chitosan process may lead to increase of surface area, whereas the presence of amino groups may confer basic properties to the sorbent, possibly making it a potential material for CO₂ capture.

Resumo

Várias fontes de biomassa são usadas para obtenção de adsorventes com alta área superficial, porém apresentam baixa seletividade a CO₂ devido às fracas propriedades básicas [1]. Neste sentido, dentre as fontes, pode-se destacar a quitosana, como um material atrativo para captura de CO₂. A quitosana (Fig. 1b) obtida através da reação de *N*-desacetilação, é um heteropolissacarídeo derivado da quitina (Fig. 1a) [2].

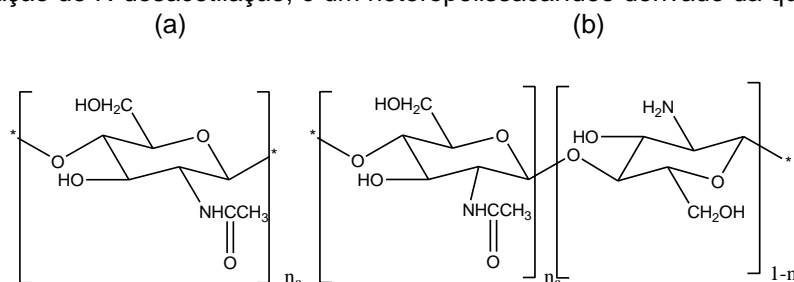


Figura 1: Estruturas químicas da (a) Quitina e (b) Quitosana

A carbonização deste polímero pode levar a um aumento da área superficial, enquanto que os grupos amino podem conferir propriedades básicas aos adsorventes [3]. O objetivo deste trabalho é sintetizar e caracterizar adsorventes à base de quitosana. Os adsorventes de quitosana foram preparados por carbonização hidrotérmica (HTC) em diferentes condições e caracterizados por análise elementar CHN, espectroscopia de Infravermelho (IV) e titulação de Boehm. As análises CHN indicam que os hidrocarbões apresentaram um aumento no conteúdo de carbono e uma redução no oxigênio, devido à desidratação do polímero. No entanto, a quantidade de nitrogênio não variou significativamente nas condições estudadas. Por IV foi observada uma redução da banda de estiramento O-H, assim como o aparecimento de bandas referentes a ligações C-N e C-O de estrutura aromática nos materiais carbonizados. Pela titulação de Boehm foram verificados que os hidrocarbões se apresentaram ligeiramente menos básicos que a quitosana, provavelmente devido a formação de aminas aromáticas. Desta forma, os adsorventes derivados da carbonização hidrotérmica da quitosana podem ser uma alternativa atraente dentro das tecnologias de captura de CO₂, tendo em vista a manutenção das suas características básicas.

Agradecimentos: Shell; CNPq; CAPES; FAPERJ

Referências: [1] COROMINA, H. M.; WALSH, D. A.; MOKAYA, R. Biomass-derived activated carbon with simultaneously enhanced CO₂ uptake for both pre and post combustion capture applications. *Journal of Materials Chemistry A: Materials for energy and sustainability*, v.4 p. 280–289, 2015. [2] RAVI KUMAR, M. N. A review of chitin and chitosan applications. *Reactive and Functional Polymers*, v. 46, n. 1, p. 1–27, 2000. [3] LAGINHAS, C.; NABAIS, J. M. V.; TITIRICI, M. M. Activated carbons with high nitrogen content by a combination of hydrothermal carbonization with activation. *Microporous and Mesoporous Materials*, v. 226, p. 125–132, 2016.

Methylene Blue Adsorption in soil and humus – kinetic study and “spot” test.

Emanuele Costa¹ (IC), Izabelly Karol Poncio de Oliveira¹ (IC), Ísis Kaminski Caetano^{1*}(PQ)

emanuele_costa@hotmail.com; *isiskc@hotmail.com

¹Departamento de Química, UNICENTRO, Guarapuava – PR.

Keywords: Oxisol, Sheep Manure humus, Commercial Organic Fertilizer, Methylene Blue, Adsorption Kinetic.

Highlights

Sheep manure humus had methylene blue adsorption capacity about 3 times greater than soil Haplodux according “spot” adsorption test. Humus showed the same model of adsorption kinetics than soil.

Resumo/Abstract

Sheep manure humus and some soil types can have potential as low cost adsorbents, therefore this work evaluated the adsorption of methylene blue (MB) in a commercial fertilizer of sheep manure and in soil (Haplodux or Oxisol – “dystrophic red Latosol”), using the “spot” test^{1,2} in triplicate and kinetic study. The adsorption kinetics tests^{3,4} were in duplicate at 27 ± 1 °C, pH = 6.0. The “spot” test for the Haplodux (“dystrophic red Latosol” or Oxisol, A Horizon) resulted in a specific surface area of 41 ± 4 m² g⁻¹ and for humus 125 ± 18 m² g⁻¹. The best fit for the adsorption kinetics was of pseudo-second order (Figure 1A, R² = 0.9996) for both, humus and soil (Figure 1B, R² = 0.9800). The constant K₂ was equal to 0.00689 g soil mg⁻¹ min⁻¹ and equilibrium concentration was 56.5 mg g⁻¹ for humus and for the soil K₂ was equal to 0.000483 g soil mg⁻¹ min⁻¹ and equilibrium concentration was 23.4 mg g⁻¹. Humus showed a greater potential for MB adsorption than soil probably due to chemically stabilized organic matter (C/N = 9.93), confirmed for the decomposition in 430 °C of the organic matter in thermal analysis. The adsorption specific surface area of MB of Oxisol was compatible with that of caulin³, reflecting the high clay content of the soil.

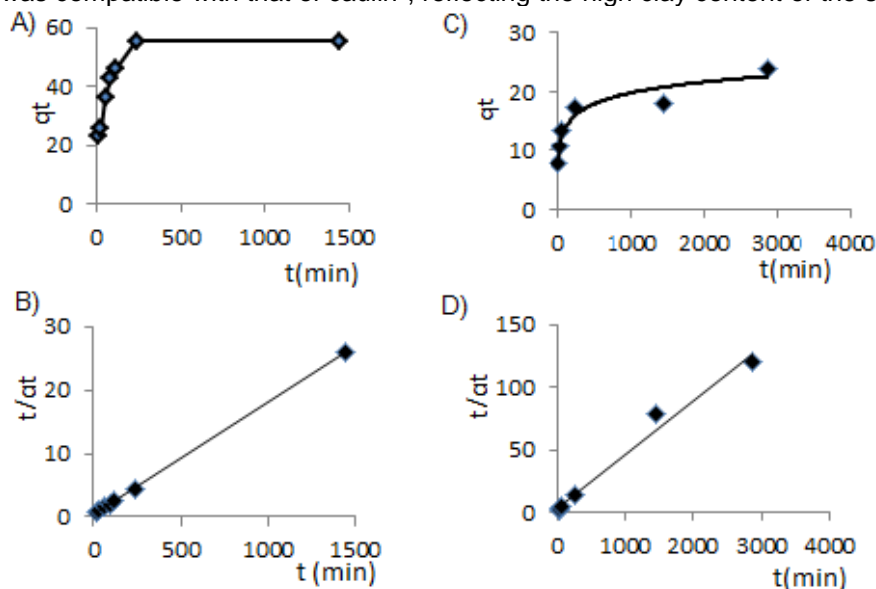


Figure 1 – (A) Adsorption kinetic curve and B) Pseudo second order kinetic of AM adsorption in sheep manure humus and (C) Adsorption kinetic curve and D) Pseudo second order kinetic of AM adsorption in soil. Adsorbents at a soil solution ratio of 0.5000 g to 100 mL dye solution, where qt = MB adsorbed amount mg g⁻¹ of adsorbent, t = time (min).

¹ Yukselen, Y. Kaya, A. *Engineering Geology*, **2008**, 102, 38.

² Topal, T. *Proceedings of 8th International Congress on Deterioration and Conservation of Stone, Berlin, 1996. Germany, Vol. 2, 791..*

³ Mouni, L. et al. *Applied Clay Science*. **2018**, 153, 38.

⁴ Chagas, N. V. et al.. *Rev. Virtual Quim.* **2014**, 6 (6), 1607.

Agradecimentos/Acknowledgments

UNICENTRO, Labgat- UNICENTRO, prof^a Dra. Eryza Castro for thermal analysis measures.

Área: AMB

Nº de Inscrição: 01449

(Inserir o número de inscrição do autor que fez a submissão)

Perfluorooctanesulfonic Acid (PFOS) Degradation by Heterogeneous Photocatalysis (TiO₂/UV) Using Factorial Design

Rafaely X. de S. Furtado (PG)^{1*}, Marcelo Zaiat (PQ)², Eduardo B. Azevedo (PQ)¹

rafaelyximenes@usp.br

¹Department of Physics and Molecular Chemistry, São Carlos Institute of Chemistry, University of São Paulo; ²Department of Hydraulic Engineering and Sanitation, School of Engineering of São Carlos, University of São Paulo.

Keywords: Perfluorooctanesulfonic acid, Heterogeneous photocatalysis, Factorial design.

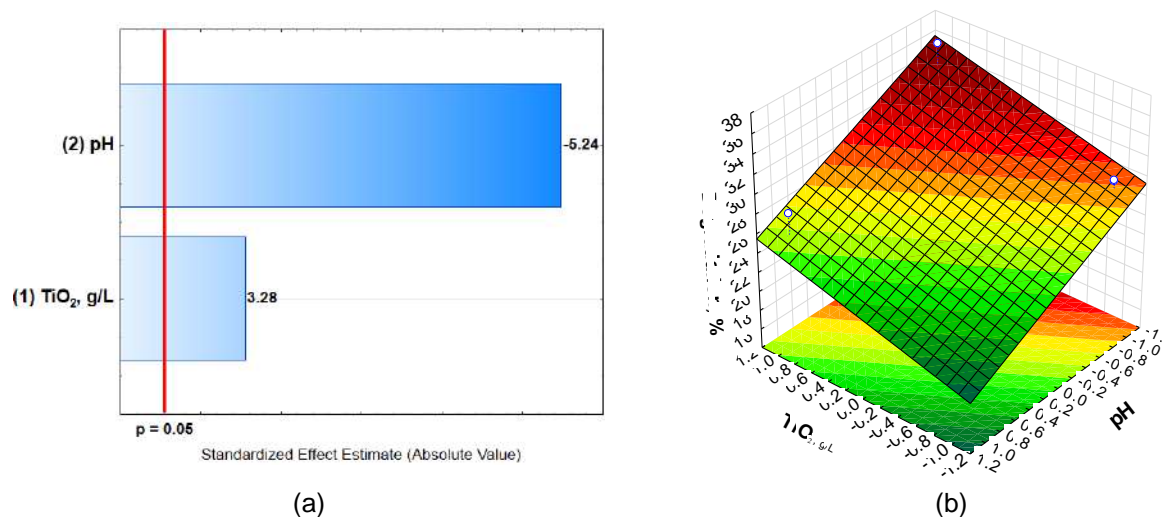
Highlights

- PFOS is a persistent, bioaccumulative, and endocrine disruptor compound.
- Best degradation conditions: 1.25 g TiO₂ L⁻¹ and pH 3.6 (90 min).
- 33% of the initial PFOS (100 µg L⁻¹) were removed.

Abstract

Perfluorinated compounds are emerging aquatic pollutants. Due to their chemical stability, they are quite persistent in the environment. This work studied the degradation of perfluorooctanesulfonic acid (PFOS) by heterogeneous photocatalysis (TiO₂/UV). The experiments were carried out using an open cylindrical Pyrex[®] cell with 100 mL of 100 µg PFOS L⁻¹ (magnetically stirred) and a medium-pressure mercury-vapor lamp (250 W, Philips HPL-N) positioned 13 cm above the suspension (maintained at 25°C). Air was pumped through the suspension and an exhaust system was in place to prevent overheating of the lamp. After adding the photocatalyst, the PFOS suspension was kept in the dark for 30 min under stirring and air bubbling, in order to achieve the adsorption equilibrium. Then, the suspension was irradiated for 90 min. PFOS concentrations were determined by liquid chromatography coupled to mass spectrometry (LC-MS) using selected reaction monitoring (SRM) (499 → 99). The degradation experiments followed a 2² factorial design in duplicate, in which the studied factors (levels) were: TiO₂ concentration (0.75 and 1.25 g L⁻¹) and pH (3.6 and 5.6). The results (Fig 1a) showed that the studied factors were statistically significant (95% confidence interval, Statistica[®] 10) and higher PFOS removals were obtained when TiO₂ concentration was increased and the pH decreased, within tested levels (Fig. 1b). Thus, the degradation achieved was, in average, 33% (with 1.25 g TiO₂ L⁻¹ and pH 3.6). This is because PFOS is negatively charged throughout the pH range (0–14) and at lower pH the catalyst surface is positively charged, thus allowing a greater electrostatic attraction between the contaminant and the catalyst, and consequently the higher percentages of removal.

Figure 1– (a) Pareto plot and (b) surface response obtained for the degradation of PFOS (100 µg L⁻¹) by heterogeneous photocatalysis (TiO₂/UV).



Área: QPN

(Inserir a sigla da seção científica para qual o resumo será submetido. Ex: ORG, BEA, CAT)

Nº de Inscrição: 01450

(Inserir o número de inscrição do autor que fez a submissão)

Constituents and Antifungal Screening of the Essential Oil from Leaves of *Rhabdocaulon lavanduloides* (Bentham) Epling (Lamiaceae)**Ricardo A. Rebelo (PQ),¹ Bianca M. da Cunha (PG),¹ Iêda M. Begnini (PQ),¹ Luiz E. da Silva (PQ),^{2*} Wanderlei do Amaral (PQ),² Vagna A. S. Munhão (PG),² Alexandre Bella Cruz (PQ),³ Rosana Cé Bella Cruz (PQ)³ ricardorebelo@furb.br; luiever@gmail.com.**¹Departamento de Química, FURB; ²Programa de Pós-Graduação em Desenvolvimento Territorial Sustentável, UFPR; ³Escola de Ciências da Saúde, UNIVALI.Keywords: Essential Oil, *Rhabdocaulon lavanduloides*, GC-FID, GC-MS, 2-methoxythymol; Antifungal properties.**Highlights**

Essential oil extraction; Essential oil characterization; New natural source of 2-methoxythymol; Antifungal screening of the essential oil.

Resumo/Abstract

The genus *Rhabdocaulon* is characteristic of Brazil, embracing about seven species distributed from Mato Grosso to Rio Grande do Sul.¹ *R. lavanduloides* is an aromatic shrub cited in phylogenetic studies¹ and in ESR spectroscopy study which showed the presence of phenolics in its leaves,² however its essential oil has not been analyzed to any extent. In continuation of a programme of systematic investigation of aromatic plants in different biomes of the Atlantic Forest, leaves of *R. lavanduloides* were collected in São José dos Pinhais, February 2017. The plant material was dried at 40 °C using an electric dryer with air circulation and submitted to hydrodistillation. The oil obtained in 0.68% yield based on dry material was then characterized by means of GC-FID (quantification and retention index) and GC-MS (computing library search). Aromatic monoterpenes were the major compounds with 2-MOTHY (6-isopropyl-2-methoxy-3-methyl-phenol), a thymol derivative, as the most abundant constituent (50.5%), followed by cymene (14.8%). Thymol methyl ether (9.7%) and the sesquiterpenes α -copaene (4.5%) and *E*-caryophyllene (6.5%) were also identified in considerable amounts. 2-MOTHY was previously identified in the essential oil of *Ocimum viride* Willd. (Lamiaceae) in low amount (1.3%),³ being a commercial product obtained by synthesis.⁴ The total oil was further submitted to a fungal panel of eleven organisms. The results are presented in Table 1. It was active on all the fungi tested, however the dermatophytes representatives were among the most sensitives, especially *Microsporum gypseum*. The same result was also observed for the yeast *Cryptococcus neoformans*. Both organisms presented MIC value of 156 ppm ($\mu\text{g g}^{-1}$). The essential oil from aerial parts of *R. lavanduloides* is a new natural source of 2-MOTHY and its essential oil shows a significant antifungal activity. It is under investigation the isolation of 2-MOTHY for its molecular structure assignment by 1D and 2D NMR and its contribution for the antifungal activity here observed.

Table 1 - Antifungal activity of the essential oil from *Rhabdocaulon lavanduloides* against filamentous and yeast fungi.

| Fungi | EO (MIC, ppm) ^a | Fungi | EO (MIC, ppm) ^a |
|---------------------------------|----------------------------|--------------------------------|----------------------------|
| <i>Aspergillus fumigatus</i> | 2500 | <i>Trichophyton rubrum</i> | 312 |
| <i>Aspergillus niger</i> | 2500 | <i>T. mentagrophytes</i> | 312 |
| <i>Epidermophyton floccosum</i> | 625 | <i>Candida albicans</i> | 1250 |
| <i>Microsporum canis</i> | 312 | <i>Candida krusei</i> | 625 |
| <i>Microsporum gypseum</i> | 156 | <i>Cryptococcus neoformans</i> | 156 |
| <i>Rhizopus sp</i> | 2500 | | |

EO: essential oil; MIC: minimum inhibitory concentration; (a) experiments were conducted in duplicates.

¹Colussi, G. et al. UNICIÊNCIAS, 21 (2), 71-73, 2017; ²Pedersen, J. A. Biochem. Syst. and Ecology, 28, 229-253, 2000; ³Ekundayo, O. Planta Medica, 3, 200-202, 1986; ⁴https://www.chemsrc.com/en/Spectral/104236-57-9_67771.html; <http://www.angenechemical.com/productshow/AGN-PC-000A31.html>.**Agradecimentos/Acknowledgments**

FURB, UFPR-Câmpus Matinhos, UNIVALI, INCT-Catálise.

42ª Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química: Eixos Mobilizadores em Química

Evaluation antibiotics removal from synthetic sewage by a consortium microalgae and bacteria in LED photobioreactors by HPLC-MS

Daniel A. S. Rodrigues (PG)^{1*}, Mylena G. Freitas (IC)¹, Aníbal F. Santiago (PQ)², Robson J. C. F. Afonso (PQ)¹

daniel00rodrigues@hotmail.com

¹Departamento de Química (DEQUI), UFOP; ²Departamento de Engenharia Civil (DECIV), UFOP

Keywords: Antibiotics, Bacterial resistance, Removal, Microalgal consortia, HPLC-MS

Highlights

Consortium was tolerant to SMX (100 and 500 $\mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$)
Dissolved oxygen values almost 18 $\text{mg O}_2\cdot\text{L}^{-1}$
Biomass values ranged from 315.00 to 527.50 $\text{mg}\cdot\text{L}^{-1}$
Consortium is promising to remove antibiotics

Abstract

The insertion of antibiotics in aquatic environments has been increasing significantly. Nowadays, the major concern about the exacerbated use of antibiotics is the considerable increase in the bacterial resistance process. It is responsible for reducing the therapeutic potential against human and animal pathogens. This fact has aroused the worldwide attention of governments and scientific communities. Wastewater treatment plants (WWTP) were not designed to remove antibiotics and other micro-contaminants. Therefore, it is necessary to find an alternative way with lower cost and more effective in removing these micro-contaminants. The aim of this study is to use photobioreactors containing a consortium formed by microalgae and bacteria, lighted by LED, to evaluate the removal/degradation of some of the most consumed antibiotics in Brazil, among them, to investigate the removal/degradation characteristics of Sulfamethoxazole (SMX). The photobioreactors were at 250 mL capacity erlenmeyers flasks containing 200 mL microalgal suspension with 10% v/v of microalgal consortia were cultivated for 20 days. The consortium were cultivated in an incubator at 100 rpm and 22°C under white LED (alternate light/dark periods of 16/8 h) of $235 \pm 22 \mu\text{E m}^{-2} \text{s}^{-1}$. To quantify the analytes the samples were prepared by low temperature partition extraction (LTPE) and analyzed by High-performance liquid chromatography-mass spectrometry (HPLC-MS). The microalgal system was spiked with 100 and 500 $\mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$ of a mix containing 10 antibiotics (Amoxicillin, Cephalexin, Tetracycline, Ciprofloxacin, Norfloxacin, Levofloxacin, Sulfamethoxazole, Trimethoprim, Sulfadiazine and Chloramphenicol). Another experiment was done using only the sulfamethoxazole (SMX). In the culture spiked with the antibiotic mix, the pH values ranged from 7.60 to 10.13, the maximum values of dissolved oxygen ranged from 11.22 to 14.67 $\text{mg O}_2\cdot\text{L}^{-1}$. In the SMX test, the pH values ranged from 7.37 to 9.53, maximum dissolved oxygen values ranged from 15.94 to 17.88 $\text{mg O}_2\cdot\text{L}^{-1}$. The biomass values ranged from 315.00 to 527.50 $\text{mg}\cdot\text{L}^{-1}$ over the growing period. The organic matter removal efficiency for this system was almost 80%. The SMX removal kinetics of microalgal consortia is in progress. It will be evaluated the possible mechanisms of antibiotic degradation in the microalgal system: biodegradation, bioadsorption, bioaccumulation, and photodegradation. The preliminary results demonstrated that the microalgal consortia is promising to remove sulfamethoxazole and other antibiotics.

Agradecimentos/Acknowledgments

The authors would like to thanks the University Federal of Ouro Preto (UFOP), Coordination of Superior Level Staff Improvement (CAPES), FAPEMIG and Minas Chemical Network (RQ-MG).

Photochemical assisted tandem reaction for the synthesis of 3-selenylindoles

Felipe L. Coelho (PQ)¹, Andressa H. Weber (PG)¹, Ricardo F. Affeldt (PQ)², Paulo H. Schneider (PQ)^{1*}

langecoelho@gmail.com; paulos@iq.ufrgs.br

¹ Laboratório de Catálise Molecular – Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Brazil. ² Laboratório de Catálise e Fenômenos Interficiais – Universidade Federal de Santa Catarina, Brazil.

Palavras Chave: photochemical reaction, indole, selenium, cyclization, fluorescence

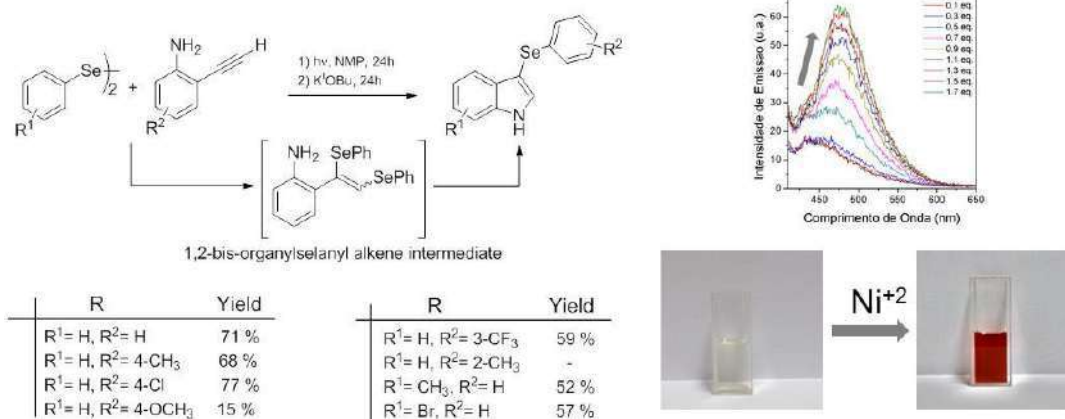
Highlights

Preparation of highly functionalized heterocycles from terminal alkynes and diorganoyl diselenides. The key step is the photochemical reaction, for the *in situ* formation of the intermediate 1,2-bis-organylselanyl alkene. Naked eye sensor for nickel in solution.

Resumo/Abstract

The preparation of the indole core was fully investigated by chemists, in the last century, mainly due to the broad application of these compounds in many areas of science.¹ In this context, this work presents a new methodology to synthesize functionalized indole rings, with chalcogen containing substituents. The tandem reaction to access the indole analogues, combines a photochemical step and a base catalyzed cyclization. In the first step, the light driven reaction between diorganoyl diselenides and *ortho*-aminated phenylacetylenes affords a 1,2-bis-organylselanyl alkene intermediate, which is not isolated. The last step involves the cyclization of the intermediate and require the addition of potassium *tert*-butoxide, leading to the formation of the desired product. The reaction scope is under investigation and seven examples were already prepared in moderate to good yields. The presence of strong donating groups or hindered diorganoyl diselenides seems to be detrimental to the reaction efficiency.

The photophysical study of one analogue (without substituents) showed an absorption maxima located in UV-Vis region and a low intensity fluorescence emission in the blue region. In presence of nickel in solution, an enhancement in fluorescent emission was observed and a changing in compound solution color from transparent to red occurred. This suggests the application of these analogues as naked eye sensors.



Scheme 1. Synthesis of substituted 3-selenylindoles and their application as nickel naked eye sensor.

¹ Humphrey, G. R.; Kueth, J. T. *Chem. Rev.* **2006**, *106*, 2875-2911.

Agradecimentos/Acknowledgments



Área: INO

Nº de Inscrição: 01455

SYNTHESIS, CHARACTERIZATION AND REACTIVITY OF NITROSYL COMPLEXES AS VASODILATORS

Iury A. Paz^{1,2} (PG)*, **Carlos Daniel S. Silva**³ (PQ), (PQ), **Izaura C. N. Diógenes**¹(PQ), **Elisane Longhinotti**⁴(PQ), **Eduardo H. Sousa**¹ (PQ), **Nilberto R. F. Nascimento** (PQ), **Luiz G. F. Lopes**¹

iury.paz@hotmail.com

¹Laboratório de bioinorgânica, Departamento de Química orgânica e inorgânica, UFC – Campus do picí; ²Laboratório de Fisiologia cardiovascular e renal, ISCB, UECE – campus Itaperi; ³Departamento de Química, IFBA – Salvador, ⁴Departamento de Química Analítica e Físico-Química, UFC.

Palavras Chave *Cardiovascular diseases, hypertension, nitrosyl complexes, metal complexes.*

Highlights

NO-releasing complexes, vasodilation activity through the GCs-cGMP pathway; being possible antihypertensive drugs.

Abstract

Cardiovascular diseases are one of the leading causes of death worldwide, often caused by endothelial dysfunction. In hypertensive crises, sodium nitroprusside (SNP), $\text{Na}_2[\text{Fe}(\text{CN})_5\text{NO}]$ is often used, which causes undesirable side effects, such as strong hypotension and release of cyanide in the body. Therefore, coordination compounds containing 5-azaindole and nitrosyl group, with bipyridine and phenanthroline as auxiliary ligands, were synthesized and characterized by spectroscopic and electrochemical techniques. Vasodilation experiments were performed on aortic rings of wistar rats. The nitrosilocomplexes $\text{cis}[\text{Ru}(\text{NO})(5\text{-aza})(\text{L})_2](\text{PF}_6)_3$, where L = bipyridine or phenanthroline, showed a characteristic frequency of stretching frequency of the nitrosyl group at 1942 cm^{-1} . In the Uv-vis spectrum, intra-ligand charge metal to ligand charge transfer bands (IL and MLCT) were observed, one of them involving the nitrosyl group. Through the hydrogen nuclear magnetic resonance technique, it was observed the signals suggesting the presence of 22 protons, confirming part of the proposed structures. In the cyclic voltammogram, it was observed potentials characteristic of the reduction of the nitrosyl in both complexes. They exhibited NO release under blue light irradiation and exhibited nitrosyl-nitro pK conversion at 5.5 and 4.7 for the complexes containing bipyridine and phenanthroline, respectively. Both compounds demonstrated reaction with glutathione (GSH) as well as a vasodilatory action on aortic rings, with the maximum effect similar to SNP.

Knowledgements

CAPES, CNPq, FUNCAP

Estudo de filmes de Gelatina para aplicação na engenharia de alimentos

João Pedro da Hora (IC),¹ Dráulio S. Da silva (PQ),^{1*} Francisco Helder A. Rodrigues (PQ).¹
joaopedrodahora6@gmail.com; draulio4000@yahoo.com.br

¹coordenação do curso de Química, UVA

Palavras Chave: Embalagens, Gelatina, Biodegradável.

Highlights

- Study of gelatin films for application in food engineering
- Biodegradable gelatin-based packaging
- Analysis of swelling and infrared films of gelatin and poly (vinyl alcohol)

Abstract

Problemas ambientais gerados por acúmulos de materiais oriundos do petróleo tem incentivado o estudo de embalagens biodegradáveis. Polímeros naturais, como a Gelatina (GE), destacam-se por suas propriedades filmogênicas. Adição de polímeros sintéticos como o poli(álcool vinílico) (PVA) e glicerol (GL) na gelatina aumenta a resistência e flexibilidade dos filmes gerados. O objetivo desse trabalho é verificar a influência do PVA nos filmes com gelatina no estudo de intumescimento. Os filmes foram preparados por soluções de GE 1%, PVA 4% e GL em proporções estequiométricas (Tabela 1). Após secos, os filmes foram caracterizados por FTIR. A Figura 1 apresenta os resultados do FTIR, observa-se uma variação na intensidade das hidroxilas na região de 1450 cm⁻¹ devido interações com moléculas da água. Observa-se também em 1633 e 1525 cm⁻¹ picos relacionados ao estiramentos das ligações C=O das aminas 1 e C-N das aminas 2, respectivamente, isso é devido às ligações de hidrogênio nos grupos responsáveis pela estrutura da cadeia. A Figura 2 apresenta os resultados da análise de intumescimento, onde observa-se que a maior concentração de PVA nos filmes gera maior intumescimento, tal resultado é devido ao caráter hidrofílico do PVA. Os resultados obtidos nos mostram que a concentração do PVA nos filmes com GE tem influência direta nas propriedades.

TABELA 1: Proporções de GE e PVA usadas na produção dos filmes.

| FILMES | GE% | PVA% |
|--------|-----|------|
| F1 | 100 | --- |
| F2 | 75 | 25 |
| F3 | 50 | 50 |
| F4 | 25 | 75 |
| F5 | --- | 100 |

FIGURA 1: Gráfico referente as análises de FTIR dos filmes.

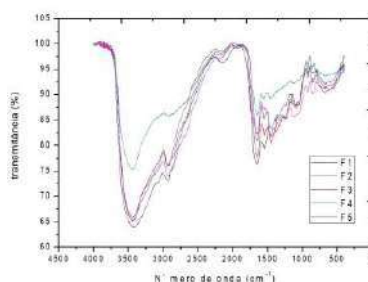
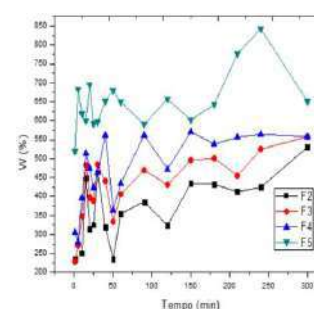


FIGURA 2: Gráfico referente as análises de intumescimento em solução de glicose.



Acknowledgments



Synthesis and characterization of analcime-type material without metakaolinization

Maria C. N. Corrêa (IC)^{1*}, Suelen A. C. Pereira (IC)¹, Renata de S. Nascimento (PG)², Bruno A. M. Figueira (PQ)², Thays C. C Lavra (PG)³, José M. R. Mercury (PQ)³

maria.clara.santos.nascimento@gmail.com; brunoufopa@hotmail.com

¹Instituto de Engenharia e Geociências, UFOPA; ²Pós Graduação em Sociedade, Ambiente e Qualidade de Vida, UFOPA; ³Pós Graduação em Engenharia de Materiais, IFMA.

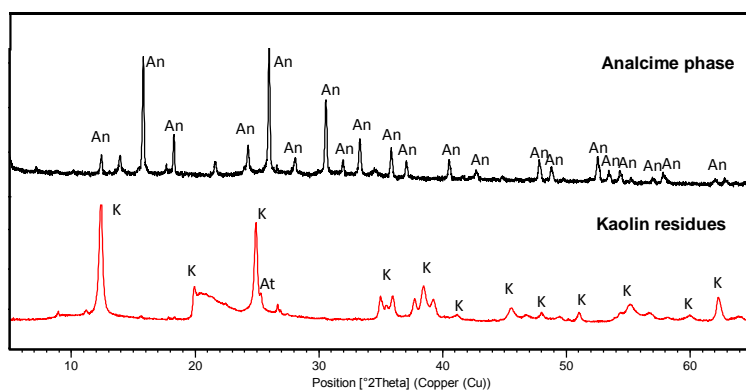
Keywords: Analcime, Zeolite, Kaolin mining residues, Synthesis, Characterization.

Highlights

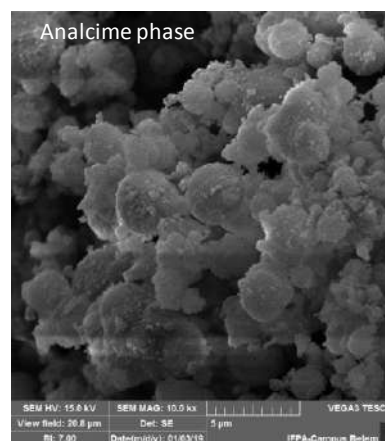
The kaolin mining residues from Amazon Region were converted into analcime phase by alkaline fusion and without metakaolinization; The analcime crystals presented globule morphology.

Abstract

The aim of this research was to develop a simple process to synthesis analcime-type molecular sieve employing Kaolin residues from Amazon Region, which actually has no commercial importance. A route synthetic was achieved by alkali fusion and low hydrothermal treatment in the starting material and it was not required heat procedure to metakaolinization technique. Materials characterization was performed using X-ray diffraction, infrared spectroscopy and scanning electron microscopy. According the X-ray diffraction measurement, a crystalline analcime phase was synthesized with I41/acd tetragonal system and cell unit parameters $a = b = 13.72 \text{ \AA}$, $c = 13.22 \text{ \AA}$ and $V = 2489 \text{ \AA}^3$, average crystallite size around 218 nm (Scherrer equation) and lattice strain (4ϵ) of 0.0154. The FTIR spectra displayed major bands at $\sim 1640, 973, 731, 628$ and 4448 cm^{-1} , attributed to the zeolitic water, Si-O-H, Si-O-Si and TO4 (T=Al or Si) vibration modes, respectively. The product had globule shapes as identified by SEM.



An = analcime; At = anatase; K = kaolinite



Acknowledgments

This work was supported by National Council for Scientific and Technological Development (No. 420169) and Coordination for the Improvement of Higher Education Personnel (No. 88881.160695), IFMA and UFOPA.

Área: ANA

Nº de Inscrição: 01462

Low Temperature Partitioning Extraction: An Interesting Alternative for Analysis of Organic Microcontaminants in Surface Water Samples

André Luis C. de Barros (PG)^{1*}, Felix F. Schmidt (PG)², Daiana R. E. Santo (IC)³, Gilmare A. da Silva (PQ)³, Robson J.C.F Afonso (PQ)³. andre_lcb@hotmail.com

Environmental Engineering Postgraduate Program (Proamb), Universidade Federal de Ouro Preto (UFOP)¹; Natural and Medical Sciences Institute, University of Tuebingen, Markwiesenstraße 55, 72770 Reutlingen, Germany²; Chemistry Department, Universidade Federal de Ouro Preto (UFOP)³;

Keywords: *Organic Microcontaminants, Low Temperature Partitioning Extraction, Mass Spectrometry, Water, Pesticides, Pharmaceuticals.*

Highlights

- The LTPE has emerged as an alternative to extract polar and nonpolar compounds from water samples
- Methods were developed for pesticides and pharmaceuticals analysis and applied in Brazilian rivers

Abstract

The presence of organic microcontaminants in surface water samples adversely affects the aquatic environmental and might pose a risk to human health. The poor sanitation condition and the intensive agricultural activity in Brazil are responsible by the presence of pharmaceutical active compounds (PhACs), hormonally active compounds (HACs) and pesticides in the surface and groundwater at high concentrations levels (until $\mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$). Given the growing concern about the possible adverse effects added to high sensitivity of analytical methods, several approaches have been developed to detect these compounds. Organic microcontaminants are traditionally monitored using gas or liquid chromatography coupled with mass spectrometry. In addition, the extraction and preconcentration of the samples are determinant steps to obtain satisfactory results. The extraction of pesticides from aqueous samples is commonly performed using liquid–liquid extraction (LLE), solid-phase extraction (SPE), solid-phase microextraction (SPME) and dispersive liquid–liquid microextraction (DLLME). Recently, the low temperature partitioning extraction (LTPE) has emerged as an alternative for organic compounds extraction from different aqueous samples. Thus, our research group have developed and validated different LTPE-based methods to determine these compounds in Brazilian rivers. A method to pharmaceutical analysis was validated to quantify pharmaceutical-active compounds (PhACs) in surface water samples by high-performance liquid chromatography coupled to electrospray ionization tandem mass spectrometry (HPLC-ESI-MS/MS). The PhACs analyzed were acetaminophen, bezafibrate, diclofenac, diltiazem, fluconazole, linezolid, miconazole, ondansetron hydrochloride, and trimethoprim. The detection and quantification limits ranged from 0.15 to 12.30 $\text{ng}\cdot\text{L}^{-1}$ and 0.43 to 40.60 $\text{ng}\cdot\text{L}^{-1}$, respectively. Recovery rates ranged from 46 to 135%, and relative standard deviation (RSD%) varied between 0.49 and 6.13%. This method was applied to monitor water contamination by PhACs in the Paraopeba River Basin (PRB), recently affected by the Brumadinho tragedy. All compounds, except linezolid which was not detected, were found in PRB water samples in concentrations that ranged from 2.6 $\text{ng}\cdot\text{L}^{-1}$ to 2.62 $\mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$. In addition, it was developed a LTPE-based method for simultaneous analysis of the pesticides acephate, difenoconazole, fenamidone, fluazifop, fluazinam, methamidophos and thiamethoxam in surface water samples by high performance liquid chromatography-electrospray ionization-tandem mass spectrometry. The optimized methodology showed LOD and LOQ levels from 0.33 to 8.13 $\text{ng}\cdot\text{L}^{-1}$ and from 1.09 to 26.84 $\text{ng}\cdot\text{L}^{-1}$, respectively. The recovery values ranged from 38.37 and 99.83% and the RSD values varied from 2.33 to 18.92%. The method was applied to surface water analysis sampled in areas with intensive agricultural practices in Ouro Branco City, Minas Gerais, Brazil. The difenoconazole was detected in concentrations between 12.53 and 94.76 $\text{ng}\cdot\text{L}^{-1}$. It is important to highlight that the LTPE demonstrated to be a good alternative to extract very polar compounds from aqueous matrices. The pesticides acephate and methamidophos, for example, are highly polar and the more common LLE and SPE procedures have demonstrated limitations in the extraction of these pesticides. Thus, it is important to discuss this technique that has showed to be simple, inexpensive, versatile, efficient and environmental friendly. The LTPE can replace more expensive extraction techniques for the determination of diverse organic contaminants in environmental matrices.

Acknowledgments

PROGRAD, UFOP, DEQUI, FAPEMIG, CAPES.

Dye Adsorption Study from Aqueous Solution on a Hybrid Material

Natan G. Filippi (TC),¹ Hérica A. M. Volpato (PQ),² Miguel Soriano Balparda Caro (PQ)¹

Natan.filippi@ufsc.br; herica.magosso@ufsc.br.

¹Departamento de Química, UFSC; ²Departamento Ciências Rurais, UFSC

Keywords: Dye, Adsorption, Hybrid material, Silsesquioxane, Waste

Highlights

A silica-based hybrid material modified with 3-picoline was synthesized and characterized. The material was then used as an adsorbent for three different phenol-containing dyes from aqueous solution.

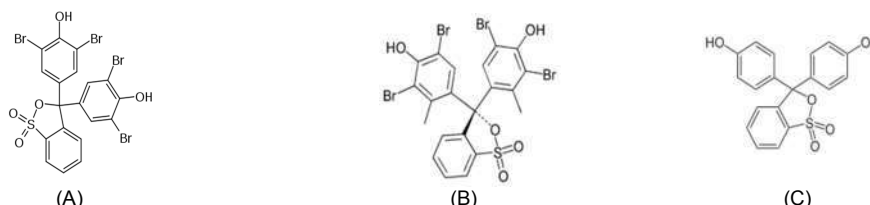
Abstract

In recent years, emerging pollutants (EP) have become an issue for the sewage treatment system, and new ways to treat this kind of effluent are being studied. One of the most used types of EP are dyes, therefore, this work had the objective of treating this kind of molecules through adsorption in a silica-based organic-inorganic hybrid material synthesized by the sol-gel method and modified with 3-picoline: 3-n-propyl-(3-methylpyridinium)silsesquioxane chloride (Si-3Pic).

The material was completely characterized using FT-IR, SS-NMR, potentiometric titration, SEM, TGA and elemental analysis. Potentiometric titration showed a chlorine exchange capacity of $1.47 \cdot 10^{-3} \text{ mol.g}^{-1}$ for the material and the other characterization methods confirmed the predicted structure of the adsorbent.

Then, three dyes were chosen. The dyes had the same structure, varying only the substituent attached to the phenol ring, as seen in the figure below:

Image 1: Fully protonated structures of the dyes used in this investigation, being: A) bromophenol blue, B) bromocresol green and C) phenol red.



In the present work, it was concluded that the rate determining step of the adsorption process was the interaction of the dye with the active site (AS). Curiously, the reaction order seemed to change during the course of the reaction. The data was well fitted using adapted first and second order kinetic equations, as observed by the quadratic correlation coefficient, which was equal to or higher than 0,97 for all the phenol-containing dyes in all pHs.

To further probe the process, adsorption isotherms were built, along with a simple desorption experiment. The material had a good adsorption capacity for the numerous dyes studied, varying from $6,49 \cdot 10^{-4} \text{ mol.g}^{-1}$ to $3,71 \cdot 10^{-4} \text{ mol.g}^{-1}$, depending on the size of the studied dye. Electronic effects also seemed to affect adsorption speed and capacity, as seen by some trends in the collected data.

After analyzing the collected data, it was noted that exist a relationship between adsorption speed, adsorption capacity and electron density in the aromatic ring. Some results seem to show antagonistic effects, for example, the *meta*-substituted methyl present in dye **B** caused significant steric hindrance, lowering the adsorption capacity, but at the same time, makes the adsorption process go faster when compared to dye **A**. The evidences found in this work make us believe that, initially, the interaction between adsorbant and adsorbate is weak, causing a buildup of the dye near empty AS. Lastly, after the dye concentration is high enough or the adsorbant and adsorbate are in close proximity, they can react, which is observable by the change in the reaction rate when contact time increases.

Acknowledgements



Understanding the infection process of *Candidatus Liberibacter asiaticus* (CLas) in *Citrus sinensis* using Imaging Mass Spectrometry

João Guilherme de Moraes Pontes (PQ),¹ Laura Soler Fernandes (IC),¹ Pedro Henrique Vendramini (PG),² Rodrigo Facchini Magnani (PQ),³ Nelson Arno Wulff (PQ),³ Marcos Nogueira Eberlin (PQ)² Taicia Pacheco Fill (PQ).^{1*}

joaoguilhermepontes@gmail.com; taicia@unicamp.br

¹LABIOQUIMI IQ-UNICAMP; ²THOMSON laboratory IQ-UNICAMP; ³FUNDECITRUS Araraquara;

Keywords: Huanglongbing, *Candidatus Liberibacter asiaticus*, *Citrus sinensis*, Imaging Mass Spectrometry.

Highlights

In this study, we compared the metabolic profile of healthy plants and infected plants with the bacteria CLas, the causing agent of Huanglongbing (HLB), the biggest problem of world citriculture.

Abstract

Huanglongbing (HLB) is an infectious disease associated with *Candidatus Liberibacter* spp., which is transmitted by the vector psyllid (*Diaphorina citri*) and it is responsible for great losses to the worldwide citrus industry. HLB affects different species of citrus (lemon, orange and mandarin), causing the development of defective fruits, yellowish leaves, atrophic shoots and protruding ribs.¹

This work aims to monitor using Mass Spectrometry techniques, the metabolic profile of the healthy *Citrus sinensis* plant compared to the metabolic profile presented at different stages of infection, in order to gain insights concerning the chemistry and biochemistry governing the bacterium-host interaction. To develop this work, our research group has analyzed healthy and diseased leaves samples of orange trees *Citrus sinensis* kept at greenhouse though Imaging Mass Spectrometry (IMS) in order to achieve a better understanding of the metabolites involved in both plant defense, as well as in the identification of some possible virulence factors. Images have been processed in BioMAP 3.8.0.4 software (Figure 1) and results have been compared with databases (Dictionary of Natural Products) and literature.

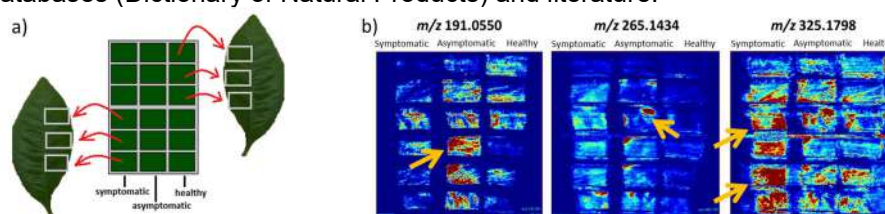


Figure 1. a) Sampling preparation for Imaging Mass Spectrometry (IMS). **b)** Results of IMS for diseased and healthy leaves from *Citrus sinensis*. The orange arrows indicate a higher ion concentration.

In the images obtained it is possible to observe an increase in the level of ions m/z 191; 265 and 325 in symptomatic and asymptomatic leaves (red color of Figure 1b). Metabolites such as quinic acid (m/z 191) and another still unknown (m/z 265 and 325) may play important role in the infection process. Other results have been obtained by leaf extraction and analyzed by LC-MS/MS to obtain information about its molecular structures and verify that the data corroborate.

Through the IMS technique it was possible to observe metabolic differences between the diseased and healthy profiles of leaves samples from *Citrus sinensis*. The ions m/z 191 (quinic acid), 265 and 325 were also detected for LC-MS/MS and are currently under investigation.

1- Blaustein RA, Lorca GL, Teplitski M. Phytopathology, 2018, 108: 424-435.

Acknowledgments

This study was financed in part by the Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior - Brasil (CAPES) - Finance Code 001 and Fundação de Amparo à Pesquisa no Estado de São Paulo [grant number FAPESP 2017/24462-4].

Avaliação de dois métodos de transesterificação na obtenção de biodiesel a partir de diferentes óleos vegetais

Bruna P. N. Bernal (IC)¹, Jeancarlo P. dos Anjos (PQ)^{1,2}, Lilian L. N. Guarieiro (PQ)^{1,2}, Edna S. Almeida (PQ)¹. brunapivanb@gmail.com; jeancarlo.anjos@fieb.org.br

¹Centro Universitário SENAI CIMATEC, 40170-010, Salvador, BA, Brasil; ²INCT de Energia e Ambiente, UFBA, 40170-290, Salvador, BA, Brasil

Palavras Chave: Óleos vegetais, Transesterificação, Ácidos graxos, Biodiesel, GC-MS

Highlights

Evaluation of two transesterification methods for obtaining biodiesel from different vegetable oils

Fatty acid profile in biodiesel produced from canola, coconut, soybean and palm oils using GC-MS. Transesterification by conventional reaction and by ultrasound. Ultrasound showed smaller reaction time and higher biodiesel yield.

Resumo/Abstract

O biodiesel é um combustível biodegradável, composto por ésteres metílicos de ácidos graxos que determinam a qualidade do mesmo. É um importante substituto do diesel, oferecendo vantagens ambientais e econômicas¹. Assim, este trabalho teve como objetivo avaliar o perfil de ácidos graxos em biodiesel produzido a partir de óleos vegetais utilizando dois métodos de transesterificação e análise por GC-MS. Foram utilizados óleos de canola, coco, dendê e soja. Para o óleo de soja foram utilizados óleo virgem e residual (fritura). O biodiesel dos mesmos foi obtido por transesterificação utilizando refluxo (convencional) e por ultrassom. Foi utilizada a proporção de 1 mol de óleo para 9 mol de metanol e 3% de KOH (catalisador) da massa de óleo utilizada. Pelo método convencional, a reação permaneceu sob refluxo (90 minutos) sob agitação constante (80°C). Já a reação por ultrassom foi realizada em 30 minutos (temp. ambiente). Após a transesterificação, as amostras foram diluídas e injetadas no sistema GC-MS. Os ácidos graxos majoritários foram: palmitato de metila e linoleato de metila (biodiesel de canola); laurato de metila e tetradecanoato de metila (biodiesel de coco); palmitato de metila e octadecanoato de metila (biodiesel de dendê); palmitato de metila, linoleato de metila e octadecanoato de metila (biodiesel de soja e de óleo residual), conforme indicado na literatura (Tabela 1).^{2,3} Observou-se um aumento significativo na composição percentual utilizando ultrassom. Para o óleo de canola, não foi obtido rendimento considerável por refluxo. Houve uma semelhança na composição dos biodieseis de óleo de soja, porém, observou-se que a qualidade da matéria-prima influenciou na eficiência da transesterificação. O método por ultrassom mostrou-se mais viável devido ao menor tempo de reação e maior rendimento de conversão dos óleos.

Tabela 1: Composição de ácidos graxos (%) nos biodieseis dos óleos de canola, coco, dendê e soja

| Ácidos graxos* | Canola | | Coco | | Dendê | | Soja | | Soja (óleo residual**) | |
|---------------------------------|-------------|-------------|-------------|-------------|------------|-------------|-------------|-------------|------------------------|--|
| | Ultrassom | Refluxo | Ultrassom | Refluxo | Ultrassom | Refluxo | Refluxo | Ultrassom | Refluxo | |
| Octanoato de metila | ND | 1,38 | 1,28 | ND | ND | ND | ND | ND | ND | |
| Decanoato de metila | ND | 2,76 | 2,63 | 0,01 | 0,01 | ND | ND | ND | ND | |
| Laurato de metila | 0,02 | 46,8 | 44,3 | 0,40 | 0,39 | ND | 0,05 | 0,02 | 0,02 | |
| Tetradecanoato de metila | 0,27 | 28,5 | 30,3 | 1,01 | 1,03 | 0,16 | 0,62 | 0,20 | 0,20 | |
| Palmitoleato de metila | 0,08 | 0,70 | ND | 0,05 | 0,04 | 0,03 | 0,03 | 0,02 | 0,02 | |
| Palmitato de metila | 36,6 | 13,1 | 14,1 | 65,2 | 65,1 | 27,2 | 29,9 | 29,5 | 29,5 | |
| Linoleato de metila | 21,9 | 0,54 | 0,64 | 9,21 | 9,23 | 46,2 | 47,0 | 47,4 | 47,4 | |
| Linolenato de metila | 3,48 | ND | ND | 0,17 | 0,18 | 2,12 | 1,98 | 1,99 | 1,99 | |
| Cis-9-éster de metila Oléico | 21,5 | 1,33 | 1,41 | 13,1 | 13,3 | 7,44 | 6,70 | 6,74 | 6,74 | |
| Octadecanoato de metila | 10,7 | 4,77 | 5,20 | 9,58 | 9,57 | 12,5 | 10,3 | 10,3 | 10,3 | |
| Araquidato de metila | 2,85 | 0,11 | 0,13 | 0,86 | 0,82 | 1,62 | 1,18 | 1,24 | 1,24 | |
| Erucato de metila | ND | ND | ND | ND | ND | ND | ND | ND | ND | |
| Docosanoato de metila | 1,77 | ND | ND | 0,15 | 0,16 | 2,00 | 1,66 | 1,79 | 1,79 | |
| Lignocerato de metila | 0,86 | ND | 0,03 | 0,19 | 0,21 | 0,74 | 0,60 | 0,66 | 0,66 | |
| Rendimento (% conversão) | 51,1 | 40,0 | 22,9 | 15,4 | 4,0 | 42,8 | 42,8 | 32,3 | 32,3 | |

*ND = não detectado; **Óleo residual proveniente de fritura

1- SANTOS, A. P.; PINTO, A. C. *Química nova na escola*, 2009, v. 31, n.1, 58-62. / 2- BUNYAKIAT, K.; et al. *Energy & Fuels*, 2006, v. 20, n. 2, 812-817. / 3- OLIVEIRA, D. M.; et al. *Química nova*, 2013, v. 36, n. 5, 734-737.

Agradecimentos/Acknowledgments

CAPES, CNPq, FAPESB e INCT-E&A

42ª Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química: Eixos Mobilizadores em Química

Synthesis of Polyaniline nanofibers/ multi-walled carbon nanotube by “in situ” oxidative polymerization

Fabio Andrés Silva Vega* (PG),¹ Daniela Becker (PQ)¹, Carla Dalmolin (PQ)²,

carla.dalmolin@udesc.br; fabioandres-sv@outlook.com;

¹Pós-graduação em Ciência e Engenharia de Materiais, PGCEM, UDESC; ²Departamento de Química, UDESC

Keywords: Conducting polymers, Nanocomposites, Nanofibers, Polyaniline, Multiwalled carbon nanotubes

Highlights

PANI-MWCNT was prepared at room temperature in a one-pot reaction by the liquid/liquid interfacial route

Nanocomposites were obtained as conductive fibers in nanometric scale

Nanofibers present high electrical conductivity and can be used as charged load in order to improve electrical properties of polymeric materials

Abstract

Polyaniline (PANI) is a conjugated conductive polymer, that is used as a binder to improve the conductivity in many carbon nanoparticles for different applications. PANI containing multi-walled carbon nanotubes (MWCNTs) was synthesized by in situ polymerization. Aniline monomer (ANI) (analytical grade), was distilled under vacuum prior to polymerization. Ammonium persulfate (APS) (analytical grade) and Chloroform and Chlorhydric acid (technical grade, Carlo Erba Reagentes do Brasil) both were used as received. A ANI was polymerized according to procedure the liquid/liquid interfacial route, with the addition of the MWCNT to the reaction medium. Firstly, the MWCNTs were added to 200 mL of Chloroform. This suspension was sonicated for 30 min. Then, the ANI (100 mmol) was added to the suspension. Finally, aqueous solution of APS/HCL was added to the stirred suspension. Polymerization was finished after 24h. Resulting dispersion was poured and the dark powder was filtered, washed with acetone and deionized water and then dried for 24 h at 60°C. Fourier Transform Infrared Spectroscopy (FT-IR), RAMAN Spectroscopy, and X-Ray Photoelectron spectroscopy (XPS) analysis were used in order to investigate the effect and type of interaction between MWCNT and Pani. The improvement on thermal stability and crystallinity were evaluated by Thermogravimetry (TGA) and Differential Scanning Calorimetry (DSC). Scanning Electronic Microscopy (SEM) and Transmission Electron Microscopy (TEM) images were used to access the morphology of the particles. The conductivity properties were measured by four probe methodology. As expected, preparation method influenced the final morphology of MWCNT/PANI, which produced nanofibers polymerized around the MWCNT. The π - π interaction between MWCNT and PANI enhances carrier mobility, also related to the fact that MWCNT may serve as a conducting bridge between the PANI domains due to their large aspect ratio and surface area, which leads to the increase on thermal stability and electrical conductivity of PANI with 1% MWCNT.

Acknowledgments

This study was financed in part by the Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior – Brasil (CAPES) – Finance Code 001. The authors are grateful to the Brazilian science funding agencies CAPES, CNPq, and FAPESC for scholarships and grants that made this work possible.

Área: EDU

Nº de Inscrição: 01468

Diagnóstico de discentes do Curso de Química a cerca do Ensino da Ciência e Tecnologia, como ferramenta de Aprendizagem.

Micheline S. C. Oliveira (PQ)^{1*}, Victória R. P. Albuquerque (IC)¹, Antônio R. F. Moura (IC)¹, Hemilly S. Albuquerque (IC)¹, Michelle M. M. Costa (FM)¹, Cristiane D. A. Tavares (PQ)¹.

*micheline.oliveira@uece.br

¹Curso de Química, Centro de Ciências e Tecnologia – CCT, Universidade Estadual do Ceará – UECE

Palavras Chave: Educação, Tecnologia, Aprendizagem.

Abstract

Diagnosis of students of the Chemistry Course about the Teaching of Science and Technology, as a Learning tool.

This work aims to identify the opinion of undergraduates about the impacts caused by the indiscriminate use of technology by current society, strictly connected.

Introdução

Nos dias de hoje, a ciência e a tecnologia se encontram tão presentes em nossa sociedade que não percebemos, e até porque não dizer, que muitas vezes não entendemos a relação ciência, tecnologia e sociedade (CTS). Essa relação interfere em diversos ramos da sociedade como, por exemplo, a política, economia, cultura, e também, em problemas práticos do cotidiano. No contexto da sociedade científico-tecnológica, torna-se imprescindível que o estudante tenha amplo domínio das ferramentas de estudo como a leitura, o cálculo e a escrita, para que então consiga, de maneira adequada, interpretar o mundo¹. O público alvo da pesquisa foram alunos do 5o. semestre de Licenciatura em Química, que cursavam a disciplina de CTS, ao todo foram 17 respondentes. Para tal investigação foi aplicado um QUIZ com questões relacionadas ao tema.

Resultados e Discussão

De acordo com os resultados obtidos no QUIZ, foi observado um maior Índice Atitudinal Global (lag) dos respondentes na Q10411, onde todos concordaram que tecnologia é uma excelente ferramenta para aprendizagem nos dias de hoje e deve ser usada para como estratégia dominante no ensino principalmente dos jovens conectados ao mundo virtual, nas demais questões os lag se mantiveram dentro do padrão de concordância. O aluno A4 foi o que mais se aproximou da concordância plena em todas as questões, quando comparado à escala de likert. Pesquisas realizadas no CEFET – RJ valores semelhantes foram obtidos com alunos na mesma faixa etária².

Tabela 1 – Índice Atitudinais por questão e global (lag).

| A/Q | Q 90411 | Q 40421 | Q 10211 | Q 90621 | Q 10411 | Q 90211 | Q 20511 | lag |
|-----|---------|---------|---------|---------|---------|---------|---------|-------|
| A1 | 0,37 | -0,4 | -0,22 | -0,25 | 0,3 | -0,007 | -0,125 | 0,047 |
| A2 | 0,19 | -0,39 | -0,22 | -0,19 | 0,3 | -0,07 | -0,125 | 0,072 |
| A3 | -0,06 | 0,39 | -0,031 | 0,3 | 0,55 | -0,32 | -0,41 | 0,060 |
| A4 | -0,125 | -0,18 | 0,031 | 0,3 | 0,55 | 0,32 | 0,41 | 0,187 |
| A5 | -0,44 | -0,29 | -0,44 | 0,45 | 0,2 | 0,43 | 0,19 | 0,014 |
| A6 | 0,25 | -0,64 | -0,25 | 0 | 0,35 | -0,61 | 0,28 | 0,089 |
| A7 | 0,312 | -0,21 | -0,16 | -0,4 | 0,5 | 0,18 | -0,19 | 0,005 |
| A8 | -0,06 | -0,46 | -0,125 | 0 | 0,6 | -0,28 | 0,34 | 0,002 |
| A9 | -0,06 | -0,46 | -0,125 | 0 | 0,6 | -0,28 | 0,343 | 0,003 |
| A10 | 0,5 | 0,18 | 0,16 | 0,25 | 0,5 | 0,25 | 0,28 | 0,303 |
| A11 | 0,31 | -0,14 | -0,31 | 0,15 | 0,15 | 0,32 | 0,41 | 0,127 |
| A12 | -0,56 | -0,11 | -0,9 | 0,3 | 0,35 | 0,214 | 0,15 | 0,079 |
| A13 | 0,375 | 0,18 | 0 | -0,2 | 0 | 0 | 0,53 | 0,126 |
| A14 | 0,19 | 0,43 | -0,28 | -0,05 | -0,2 | -0,28 | 0,031 | 0,023 |
| A15 | 0,43 | 0,214 | -0,5 | 0 | 0,35 | 0,03 | 0,125 | 0,032 |
| A16 | 0 | 0 | 0,125 | 0,3 | 0,3 | 0,07 | 0 | 0,114 |
| A17 | -0,125 | 0,035 | -0,06 | -0,15 | 0,25 | 0,18 | 0,125 | 0,036 |
| lag | 0,0881 | | 0,1944 | 0,0476 | 0,3324 | 0,0086 | 0,1391 | |

Conclusão

Concluimos que os jovens estão cada vez mais tecnológicos e conectados participando assim efetivamente do século XXI, o século da explosão tecnológica, era cyber.

Agradecimentos

À todos que participaram da pesquisa.

¹DAGNINO, R. Enfoques sobre a relação ciência, tecnologia e sociedade: neutralidade e determinismo. In: Organização dos Estados Iberoamericanos para a educação, **A ciência e a cultura**, 2009.

²Chripino, A. et al. A area de CTS no Brasil como Rede Social: Onde aprendemos? Ciência & Educação (Bauru) 2013.

First Example of Auto-sustainable Enantioselective Heck-Matsuda Reaction: Evaluation of Desymmetrization of One-pot Cyclopentenol in Batch and in Continuous Flow

Christian L. Herrera (PG),¹ Prof. Dr. Julio C. Pastre (PQ),¹ Carlos Roque D. Correia (PQ)¹.

cleonardoh@uni.pe; croque@unicamp.br

¹Chemistry Institute, University of Campinas – Unicamp, Campinas – SP, Brazil

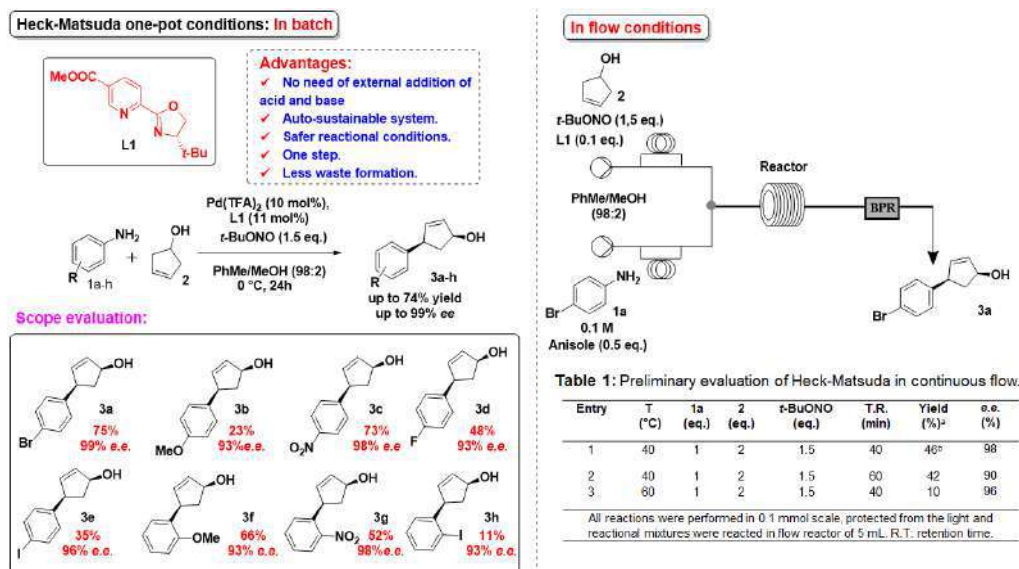
Palavras Chave: Heck- Matsuda reaction, Multicomponent reaction, Enantioselectivity, Continuous flow

Highlights

Herein, we disclose the application of multicomponent Heck-Matsuda reaction to desymmetrization of cyclopentenol in batch and under continuous flow conditions.

Abstract

One-pot reactions are considered an efficient approach in organic synthesis since it allows the construction of new molecules by reducing the numbers of steps and waste formation.¹ We present the first example of the enantioselective version of the Heck-Matsuda (HM) reaction in one-pot applied to the desymmetrization of cyclopentenol.² One-pot was previously studied by Felpin in coworkers using very activated system, showing good results.³ Our approach highlights the development of new auto-sustainable Heck reaction protocol considering that there is no need of acidic and basic conditions or the previous preparation of diazonium salts. Under optimized conditions, arylated Heck-Matsuda products were obtained of high yields up to 74% and excellent enantiomeric excess (up to 99% e.e.). Additionally, we performed our approach under continuous flow conditions, and we obtained moderated yields (51%) and high e.e. (up to 96%). This very interesting result shows a new perspective about o application of continuous flow technologies in asymmetric reactions, allowing to decrease reactional time to 40 min and scaling possibility. The optimization of the reaction and evaluation of reactional scope in flow conditions is underway.



¹Hayashi, Y. *Chem. Sci.* **2016**, *7*, 866. ²(a) Oliveira, J.; Oliveira, C.; Angnes, R.; Correia, C. *Chem. Eur. J.* **2014**, *20*, 13117. (b) Oliveira, J.; Angnes, R.; Muhammed, A.; Correia, C. *J. Org. Chem.* **2016**, *81*, 2010. ³Oger, N., Le Callonnec, F., Fouquet, E. Felpin, F. *Org. Lett.* **2011**, *13*, 2646. Oger, N., Le Callonnec, F., Jacquemin, D., Fouquet, E., Le Grogne, E., Felpin, F., *Ad. Synth. Cat.* **2014**, *356*, 1065.

Acknowledgments

This study is being financed in part by Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior – Brasil (CAPES)- Finance Code 001 and by FAPESP (award numbers: 2015/18572-6, 2014/26378-2 and 2014/25770-6).

42ª Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química: Eixos Mobilizadores em Química

Área: FOT

(Inserir a sigla da seção científica para qual o resumo será submetido. Ex: ORG, BEA, CAT)

Nº de Inscrição:1470

(Inserir o número de inscrição do autor que fez a submissão)

Study of the solvent effect on the N-methylisatin

Anderson M. Arandas (PG)^{1,2}, Bianca N. M. Silva (PG)³, Bárbara V. Silva (PQ)³, Carla C. S. Cavalheiro (PQ)¹, Irlon M. Ferreira (PQ)⁴

andersonarandas@gmail.com

¹Laboratório de Fotoquímica, Universidade de São Paulo Avenida Trabalhador São-carlense, 400 CEP 13566-590 - São Carlos - SP – Brasil. ²Instituto Federal do Amapá, Campus Porto Grande – BR 2010, Zona Rural, CEP 68997-000, Porto Grande –AP. Instituto de Química, Universidade Federal do Rio de Janeiro, 21949-900 Rio de Janeiro-RJ, Brazil. ⁴Grupo de Biocatálise e Síntese Orgânica Aplicada, Departamento de Ciências Exatas, Universidade Federal do Amapá, Rod. JK, KM 02, 68902-280, Macapá, Amapá, Brasil.

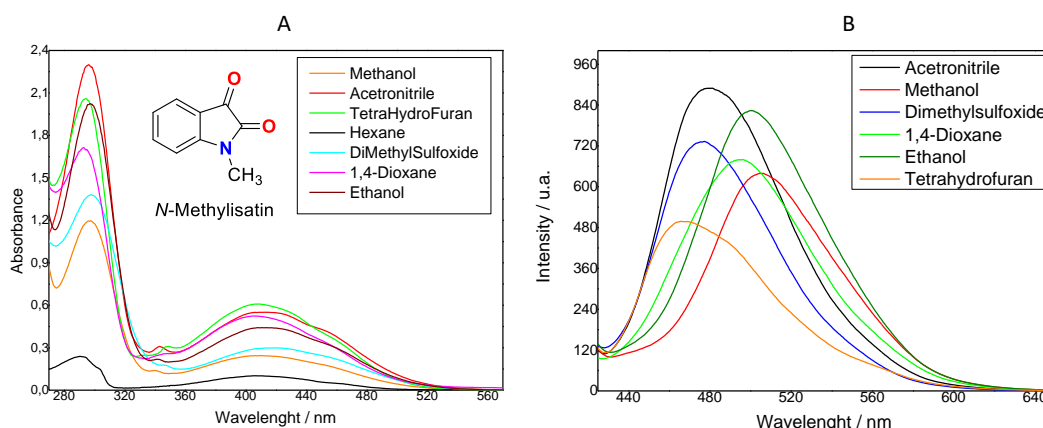
Keywords: N-methylisatin; Solvent Effect; UV-vis, Quantum Yield; Fluorescence.

Highlights

Study of the solvent effect on the N-methylisatin; High polarity solvents generate a slight bathochromic shift of the emission spectrum; The quantum fluorescence yield of N-methyl isatin in methanol was significant ($\phi = 0.12$).

Resumo/Abstract

Isatin (1*H*-indole-2,3-dione) and its derivatives were found in fungi, plants, animals and even in humans as a metabolic derivative of adrenaline. It was first synthesized by Erdmann and Laurent in 1840 when these researchers reacted indigo with nitric and chromic acids. In this work is presented the effect of different solvents on N-methylisatin. These results were followed by fluorescence and absorption measurements. The fluorescence and absorption spectra were performed at room temperature using quartz bucket (1 cm). All solvents (EtOH, MeOH, dioxane, hexane, THF, MeCN and DMSO) used in this work were purchased from Sigma-Aldrich. N-methylisatin showed absorption spectrum with two characteristic bands; one in the ultraviolet with $\lambda_{\max} = 296$ nm and another one in the visible one with $\lambda_{\max} = 410$ nm. For all used solvents was observed a low variation on absorption spectrum (Figure 1a). In the fluorescence emission spectrum, it was observed a shift hypochromic for aprotic solvents such as MeCN, DMSO and THF in relation the protic solvents as MeOH and EtOH (Figure 1b). The quantum yield was $\phi = 0,12$ for N-methylisatin and $\phi = 0.30$ for riboflavin as standard, this preliminary results showed important parameters promising for N-methylisatin. As a future perspective others N-methylisatin derivatives will be characterized.



- da Silva, J. F. M.; Garden, S. J.; Pinto, A. C.; J. Braz. Chem. Soc. 2001, 12, 273; Silva, B. V.; J. Braz. Chem. Soc. 2013, 24, 707.

Agradecimentos/Acknowledgments

The authors would like to acknowledge Fundação de Amparo à pesquisa do Estado do Amapá (FAPEAP, grant no. 34568.515.22257.28052017) and Fundação de Amparo à pesquisa do Estado do Rio de Janeiro (FAPERJ) for their financial support.

Adsorção de íon amônio em efluentes aquosos sintéticos com zeólita Clinoptilolita

Daniela D. Sparenberg (IC),^{1*} Marianna V. Brandellero (IC),¹ Vilma C. T. Delavy (IC),¹ Jéssica R. Marques (IC),¹ Renata S. Fonseca (TC),¹ Gabriela M. Batista (IC),¹ Clóvis A. Rodrigues (PQ),² Marina da S. Machado (PQ)¹.

danielasparenberg@hotmail.com

¹Engenharia Química, ² Programa de Pós-Graduação em Ciências Farmacêuticas, Universidade do Vale do Itajaí, SC, Brasil.

Palavras Chave: Adsorção, clinoptilolita, Amônia

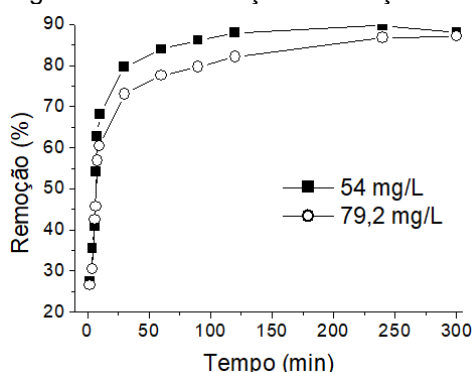
Highlights

Adsorption of ammonium ions in synthetic aqueous effluents with zeolite Clinoptilolite. It was used 0,4g of Na-clinoptilolite zeolite to remove ammonium ions in synthetic aqueous effluents, in a batch reactor. The results indicate removal of NH_4^+ nearly 90% in 240 minutes.

Resumo/Abstract

O nitrogênio na forma amoniacal que está presente nas águas residuárias é um poluente extremamente sério à vida aquática, pois é nutriente de algas e outros micro-organismos, reduzindo a concentração de O_2 dissolvido e, também, sendo um dos responsáveis pelo fenômeno da eutrofização. A clinoptilolita apresenta uma grande afinidade com íons amônio em comparação com outros materiais. Neste trabalho utilizou-se a zeólita natural clinoptilolita (Celta Brasil, Lote 408.6/15384) para remoção de íon amônio de efluentes aquosos sintéticos. Os experimentos foram realizados em batelada a partir de 20 ml de efluente, com massa de zeólita de 0,4g e em temperatura ambiente (25°C). Foram avaliados o tempo de contato (0-300 min), o teor de íon amônio (54 e 79,2 mg/L) e o comportamento do pH após processo de adsorção. As soluções foram preparadas a partir de uma solução estoque de 180 mg/L de íon amônio obtida do Sulfato de Amônio ($(\text{NH}_4)_2\text{SO}_4$, grau analítico - Vetec). A concentração de íons NH_4^+ antes e após o processo de adsorção foi medida pelo método de Solorzano (BAUMGARTEN, 2010), com auxílio de um espectrofotômetro UV-VIS da marca Instrutherm, em absorvância de 640nm. Construiu-se uma curva de calibração com concentrações de 0 até 450 $\mu\text{mol/L}$ obtendo-se a equação de reta $y=0,0058x+0,0315$ com r^2 de 0,998 para quantificação de íons NH_4^+ . Os resultados indicaram que a partir de 90 minutos o pH final ficou constante em $6,0\pm 0,2$ para as duas concentrações de íons NH_4^+ estudadas, indicando que o sistema atingiu o equilíbrio, estabilizando a adsorção.

Figura 1: % de remoção em função do tempo



Os estudos cinéticos (Figura 1) indicaram uma remoção próxima de 90% em 240 minutos, independente da concentração de íons amônio na solução. Nos estudos de adsorção de íons amônio pela zeólita Clinoptilolita realizados com 0,2 g de clinoptilolita e concentrações de 40 a 600 mg/L em 300 minutos foi aplicado as expressões das isotermas de Langmuir e Freundlich. Verificou-se que o processo de adsorção foi favorável tanto por Langmuir (R_L está entre 0 e 1) como por Freundlich (n entre 1 e 10). O processo de adsorção seguiu o tipo L, segundo o modelo de Langmuir, ou seja, a adsorção aumentou à medida que a concentração dos íons NH_4^+ aumentou.

BAUMGARTEN, M.G.C.; WALLNER-KERSANACH, M.; NIENCHESKI, L. F. H. Manual de análises em oceanografia química. 2. ed. Rio Grande: FURG, 2010.

Agradecimentos/Acknowledgments

Bolsa de pesquisa – Art. 170; PROPEC/UNIVALI e a Empresa Celta-Brasil pelo fornecimento da zeólita.

Benzocalcogenodiazoles-containing trialkoxysilane groups to obtain fluorescent hybrid materials

Victória Goulart Isoppo (PG),¹ Roger Braun (IC),¹ Fabiano Severo Rodembusch (PQ),¹ Angélica Venturini Moro (PQ)^{1*}

victoriagi@hotmail.com; angelica.venturini@ufrgs.br

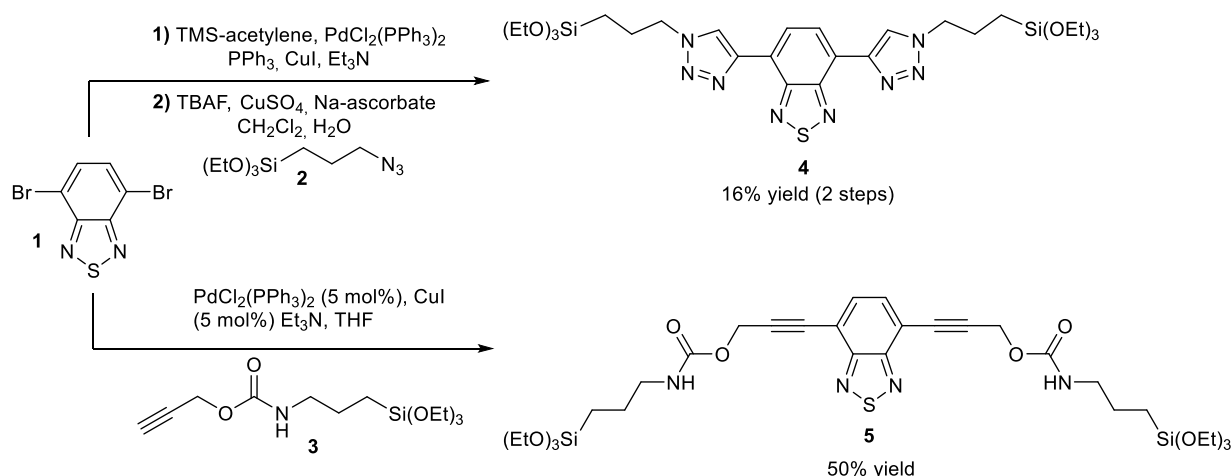
¹Instituto de Química, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Av. Bento Gonçalves 9500, Porto Alegre, Brasil
Palavras Chave: Benzothiadiazole, Fluorescency hybrid-materials, Fluorescent silsesquioxane, Fluorescent silica

Highlights

Compounds containing the 2,1,3-benzothiadiazole (BTD) core have received much attention in the last decade due to their application as fluorescent materials,¹ solar cells,² markers in biological systems,³ among others. Fluorescent nuclei such as the BTD can be applied in the synthesis of organic-inorganic hybrid materials which can be obtained through sol-gel process. These materials are applied as components in the manufacture of organic solar cells, photoactive coatings on surfaces, various optical sensors, electron carriers or are used as photosensitive materials for latent fingerprint development. The present work describes the synthesis of silylated and fluorescent BTD compounds with application in obtaining hybrid materials.

Abstract

The compounds containing the BTD nucleus and the trialkoxysilane group with different spacers were synthesized starting from the dibromo-BTD **1**. Compound **4** containing the triazole spacer was obtained after two reaction steps: Sonogashira coupling reaction with commercial TMS-acetylene alkyne followed by *in situ* alkyne deprotection reaction using TBAF, and Cu-catalyzed [3+2] cycloaddition reaction with a previously prepared silylated azide **2**. Compound **5** was obtained by the Sonogashira coupling reaction of **1** with silylated alkyne **3**. Both molecules were photophysically characterized and showed high fluorescence intensity and large Stokes shifts.



Acknowledgments

The authors would like to thank CNPq and CAPES/PROEX for the financial support.

[1] Neto, B. A.; Lapis, A. A. M.; Silva, E. N.; Dupont, J. *Eur. J. Org. Chem.* **2013**, 228.

[2] Park, S. H.; Roy, A.; Beaupré, S.; Cho, S.; Coates, N.; Moon, J. S.; Moses, D.; Leclerc, M.; Lee, K.; Heeger, A. J. *Nat. Photonics* **2009**, 3, 297.

[3] Garcia, L.; Lazzaretti, M.; Diguët, A.; Mussi, F.; Bisceglie, F.; Xie, J.; Pelosi, G.; Buschini, A.; Baigl, D.; Policar, C. *New J. Chem.* **2013**, 37, 3030.

Ação do Glicerol em filmes de gelatina: reticulante ou plastificante?

Angelita R. Krama (IC), Ana M. G. Campuzano (PG), Marcia M. Meier (PQ) *

angelitakrama@gmail.com; marcia.meier@udesc.br

Programa de Pós-Graduação em Química – Mestrado em Química Aplicada, UDESC.

Palavras Chave: Gelatina, Glicerol, Plastificante, Absorção de água, Formaldeído

Highlights

Glycerol effect in gelatin films: crosslinker or plasticizer?

Glycerol reduced the water sorption of gelatin films in the same level of gelatin crosslinked films.

Resumo/Abstract

Em função da sua biocompatibilidade, a gelatina é amplamente estudada em sistemas de liberação controlada de fármacos, como material para regeneração tecidual guiada, etc. No entanto, devido sua elevada solubilidade em meio aquoso, sua reticulação é necessária e o uso de plastificantes, como glicerol, modulam suas características mecânicas. Com isto, o objetivo deste trabalho é analisar o efeito do glicerol na absorção de água de filmes de gelatina reticulada. Os filmes foram produzidos modificando o método proposto por Carvalho e Grosso (2004)¹, gelatina (G), formaldeído (F) (0,0; 0,5; 1,5 e 2 mmol em 2,1g de gelatina) e Glicerol (G) (1,33g em 2,1g de gelatina) foram dissolvidos em água e secos em estufa a 50°C. As amostras foram nomeados seguindo a sequência gelatina/formaldeído/glicerol (GFG) – seguido do teor de formaldeído. Os testes de absorção de água (ABS) foram realizados em tampão PBS (n=3).

A Figura 1 mostra que os filmes (G0G-0,0), (GFG-0,5), (GFG-1,5) e (GFG-2,0) atingem a máxima absorção de água aos 60 min e a gelatina pura (G00-0,0) aos 180 min. A gelatina pura (G00-0,0) absorve em torno de 700% de água. No entanto, a presença do glicerol, sem reticulante (G0G-0,0), reduz a absorção de água de forma semelhante aos grupos reticulados com 0,5 ou 2,0 mmol de formaldeído (GFG-0,5) e (GFG-2,0), atingindo entre 200% a 250% de ABS. Os resultados indicam o significativo efeito do glicerol na redução da absorção de água, associado possivelmente à formação de interações intermoleculares entre grupamentos da gelatina e as hidroxilas do glicerol. Dessa forma, glicerol pode apresentar efeito de reduzir a absorção de água similar ao reticulante em baixas concentrações.

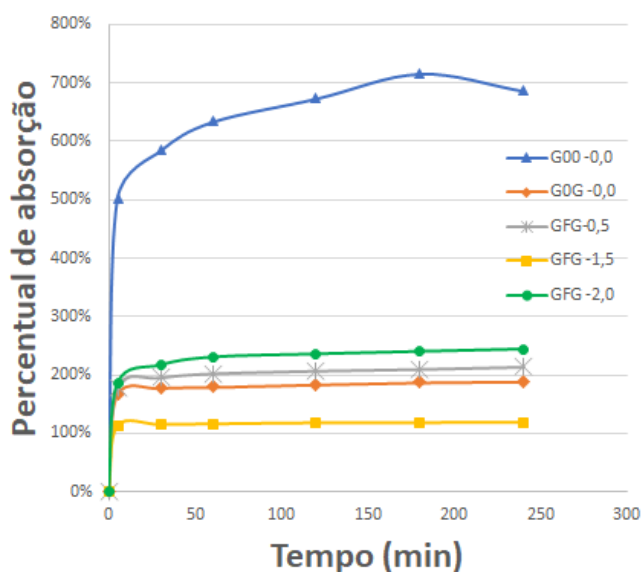


Figura 1: Absorção de água de filmes contendo gelatina (G), formaldeído (F: 0,0; 0,5; 1,5 e 2,0 mmol) e na presença e ausência de glicerol (G), a 25°C e tampão PBS (n=3).

Agradecimentos/Acknowledgments

Agradecemos à UDESC, FAPESC, CNPQ. O presente trabalho foi realizado com apoio da Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior - Brasil (CAPES) - Código de Financiamento 001.

¹ DE CARVALHO, R. A.; GROSSO, C. R. F. Characterization of gelatin based films modified with transglutaminase, glyoxal and formaldehyde. Food hydrocolloids, v. 18, n. 5, p. 717-726, 2004.

Área: _____ **Nº de Inscrição:** _____
(Inserir a sigla da seção científica para qual o resumo será submetido. Ex: ORG, BEA, CAT) (Inserir o número de inscrição do autor que fez a submissão)

Dual drug delivery system based on m-PEG-co-PCL nanoparticles and gelatin hydrogel

Rodolfo D. Piazza* (PQ)¹, João Victor Brandt (PG)¹, , Rodrigo F. C. Marques (PQ)¹, Miguel Jafelicci Jr (PQ)¹

rodolfo.piazza@unesp.br

¹Laboratory of Magnetic Materials and Colloids, Department of Physical-Chemistry, São Paulo State University- UNESP

Key wods: Diels-Alder click chemistry. pH responsive hydrogels. Swelling behavior.

Highlights

Dual drug delivery system based on m-PEG-co-PCL nanoparticles and gelatin hydrogel

Key Words: Sensitive-hydrogels; Hydrogels, Dual drug release,

Resumo/Abstract

Recently, the combination of therapies using drugs with different therapeutic action has become an effective alternative for the treatment of diseases and tissue regeneration. These strategies have been used mainly in the treatment of cancer, in which different drugs can attack malignant cells at different stages of their growth cycle. The development of novel controlled release systems allows for the combination of therapies in which drugs with distinct physicochemical properties, such as solubility, may be present in the same delivery system, increasing the effectiveness of the treatment. The objective of this work is to study the simultaneous release of diclofenac potassium by the gelatin hydrogel matrix cross-linked by Diels-Alder reactions containing methotrexate encapsulated mPEG-co-PCL nanoparticles. The rheological property of the hydrogels was evaluated as a function of the percentage of mPEG-co-PCL nanoparticles added. The increase in the percentage of nanoparticles dispersed in the hydrogel results in an elastic modulus of approximately 3, 10 and 18 times greater for samples containing 1, 10 and 5%, respectively. The presence of the nanoparticles stiffen the hydrogel and this behavior can be attributed to the interactions between the chains of the hydrogel and the PEG present on the surface of the nanoparticles, increasing the elastic properties of the system. The release of DFK showed the same behavior for the three samples evaluated, resulting in a rapid release, reaching 100% of the hydrophilic drug in only five hours. MTX presented sustained release behavior, in which, after 8 hours, no increase in its release was observed. It was observed that DFK showed a rapid release of the gelatin hydrogel matrix, whereas the release of MTX is controlled by the degradation of the hydrophobic segment of the copolymer, presenting a sustained behavior.

Agradecimentos/Acknowledgments

The authors thank the financial support of the Brazilian agencies São Paulo State Research Foundation (FAPESP), Coordination for Higher Education Personnel Improvement (CAPES), Financing Studies and Projects (FINEP), and National Council of Technological and Scientific Development (CNPq).

Área: AMB

(Inserir a sigla da seção científica para qual o resumo será submetido. Ex: ORG, BEA, CAT)

Nº de Inscrição: 01477

(Inserir o número de inscrição do autor que fez a submissão)

Removal of Environmental Pharmaceutical Pollutants by an Ureasil-siloxane-PEO Hybrid.

Gabriele P. Andrade (IC), Marina D. Araujo (IC), Álvaro H. O. Marinho (IC), Natana A. M. Jesus (PG), Eduardo F. Molina (PQ).

pedrozagabriele@gmail.com; eduardo.molina@unifran.edu.br

Universidade de Franca - UNIFRAN

Palavras Chave: (Removal, Adsorption, Ureasil, Pharmaceuticals).

Highlights

Ureasil efficiently removes sodium diclofenac from water.

A faster and greater adsorption capacity for sodium diclofenac by ureasil matrix.

Ureasil hybrid shows high applicable potentiality as an adsorbent in the aqueous phase.

Resumo/Abstract

Pharmaceutical and personal care products are a class of emerging contaminants worldwide, including groundwater, surface water and drinking water, threatening water safety and public health.[1] These contaminants are capable of altering the endocrine system of humans and animals and are resistant to decomposition.[2] Adsorption-based processes represent one of the most efficient routes for the removal of toxic substances and energy storage. In this context, the use of ureasil hybrid materials as efficient adsorbents may be a great alternative for the treatment of industrial effluents containing pharmaceutical and personal products. This study aims to investigate the performance of a hydrophilic PEO ureasil hybrid for adsorption of sodium diclofenac. The adsorption properties were correlated to the swelling degree of the matrix. The adsorption kinetics of diclofenac on the ureasil matrix were found to be accelerated by the increase of mass from 50 to 150 mg of the material. The removal efficiency using 150 mg of the xerogel was found 50% after 90 min of assay. Due to the flexibility, insoluble and facile adsorption recovery method of ureasil from aqueous solution, this material has a great potential for its real field application.

References:

- [1] Rebekah L. Oulton, Tamar Kohn, David M. Cwierny. J. Environ. Monit., 2010, 12, 1956–1978.
[2] Samira Bagheri, Amin TermehYousefi, Trong-On Do. Catal. Sci. Technol., 2017, 7, 4548-4569

Agradecimentos/Acknowledgments

This study was financed in part by the Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior – Brasil (CAPES) – Finance Code 001.

São Paulo Research Foundation- FAPESP (grant 2013/20455-2)

Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (grant 306271/2017-6)

In-line photochemical conversion for determination of hydrochlorothiazide in pharmaceuticals and fast stability studies

Vivian Maringolo* (PG), **Alexandre Z. Carvalho** (PQ), **Diogo L. Rocha** (PQ),
Federal University of ABC, Center for Natural Sciences and Humanities, Santo André, São Paulo, Brasil,
CEP 09210-580

*e-mail: vivian.maringolo@ufabc.edu.br

Keywords: *flow analysis, capillary electrophoresis, forced degradation, hydrochlorothiazide.*

Highlights

Reagentless determination of hydrochlorothiazide. Batch stability studies are time consuming. Fast in-line photochemical conversion for degradation studies. Procedures faster than the batch ones.

Abstract

The rigorous quality control of pharmaceuticals ensures effectiveness on treatments¹. Hydrochlorothiazide (HCT) is largely consumed for controlling hypertension. Stability studies bring information on the yield of degradation products during storage, making forced degradation studies (FDS) important to identify those species. For HCT, alkaline hydrolysis under heating (60 °C) for 6 h is necessary for FDS². In this work, flow-based systems were proposed for spectrophotometric determination of HCT, and fast FDS using in-line photochemical conversions. The flow injection system used for HCT determination is shown in Figure 1A. The optimized parameters were sample volume (15- 675 μL), flow rate (1.0 –3.0 mL min^{-1}), and photoreactor volume (250 - 1500 μL), being selected the values 300 μL , 2.0 mL min^{-1} and 1500 μL , respectively. Linear response was observed between 50 and 500 mg L^{-1} . Detection limit, coefficient of variation and determination rate were estimated at 3.0 mg L^{-1} , 2.8 % and 24 h^{-1} , respectively. Interference studies were carried out with common excipients such as mannitol, titanium dioxide, and lactose. Signal variations were < 5.0% in the presence of concomitants. Six samples of HCT formulations were analyzed by the proposed and reference³ procedures and it was not observed significant differences at 95% confidence level.

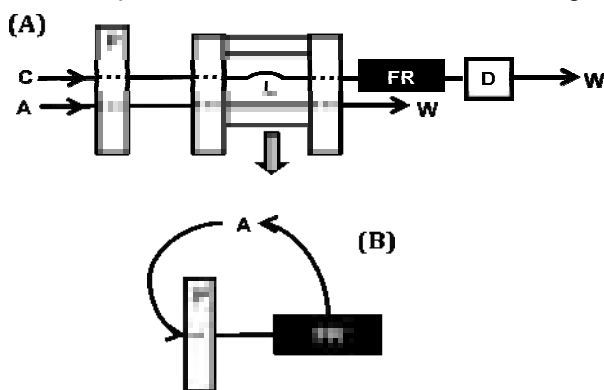


Figure 1: Flow-based systems for HCT determination (A) and for stability studies (B). A: Sample, C: 50 mmol L^{-1} NaOH, P: peristaltic pump, FR: photoreactor (1.5 mL), L: sampling loop, D: detection system ($\lambda=414$ nm), W: waste.

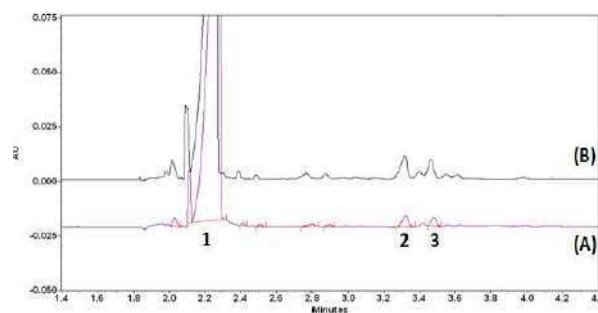


Figure 2: Electropherograms for 10 g L^{-1} HCT solution after a 6 h batch (A) and a 5 min flow-based (B) forced degradations.

The recirculation system showed in Figure 1B was used for in-line FDS. After recirculation for 5 min of a 10 g L^{-1} alkaline HCT solution through the photoreactor, analytical separation was carried out by capillary electrophoresis. The batch reference procedure for FDS was also carried out for 6 h for comparison. Figures 2A and 2B show the electropherograms obtained with flow-based and batch wise experiments, respectively. Similar separation profiles were observed. HCT conversion was estimated at 15.6 % and 13.7 % for flow-based and batch FDS, respectively, indicating that the proposed strategy is faster and slightly more efficient for FDS. Optimization of separation conditions and flow-based FDS are the main perspectives of this work.

1 BRASIL. Ministério da Saúde. ANVISA. Resolução da Diretoria Colegiada RDC 53 de 04 de dezembro de 2015.

2 de DIEGO, Marta; *et al.* Current Pharmaceutical analysis. 2011, 7, 248 – 252.

3 United State Pharmacopoeia, 39° ed., USA, 2016.

Acknowledgments

FAPESP (grant numbers 2015/12172-6 and 2018/05559-0), and CAPES (Finance code 001).

Ru-cymene complexes containing PNP ligands: an electrochemistry and biological interaction study

Ana Cláudia Silva Gondin (PQ),² Otávio Fuganti (PQ),¹ Maria Gabriela Kramer (PQ),³ Gianella Facchin (PQ),³ Karen Wohnrath (PQ),⁴ Davi Fernando Back (PQ),⁵ Márcio Peres de Araujo (PQ),¹ Eduardo Henrique Silva de Souza (PQ),² Juliana Paula da Silva (PQ),^{1*}

jpsilva.qui@gmail.com

¹Departamento de Química, Universidade Federal do Paraná; ²Departamento de Química, Universidade Federal do Ceará; ³Departamento de Desarrollo Biotecnológico, Universidad de la Republica, Uruguay; ⁴Departamento de Química, Universidade Estadual de Ponta Grossa; ⁵ Departamento de Química, Universidade Federal de Santa Maria.

Keywords: Ruthenium, Bis(diphenylphosphino)amine, Anticancer, Electrochemistry, DNA

Highlights

Ruthenium-cymene complexes with PNP ligands have shown promising anti-*Mycobacterium* and antiproliferative activities and these results encouraged us to study their electrochemical properties and mechanism of action.

Abstract

In 2017 our group reported the synthesis, characterization and anti-*Mycobacterium Tuberculosis* activity of four new ruthenium organometallic complexes with general formula $[\text{RuCl}(\rho\text{-cym})(\text{P-N}^{\text{R}}\text{-P})]^+$ [R = 2-CH₂py (1a), CH₂Ph (1b), Ph (1c) and *p*-PhCH₃ (1d)] [1]. Complexes 1a and 1b have shown the best activity with MIC90 lower than observed for the reference drug ethambutol. Complex 1a (MIC90 = 3.6 $\mu\text{g}\cdot\text{mL}^{-1}$) is the most promising as anti-MTB metallodrug, with very low cytotoxicity against healthy cells MCR-5 leading to a selective index >10. The good performance of these compounds as antiMTB agents prompted us to study their *in vitro* antiproliferative activity against two cancer cell lines (HeLa and MDA-MB 231). All complexes are active in the range of concentrations tested (up to 100 $\mu\text{mol}\cdot\text{L}^{-1}$) and showed IC₅₀ ($\mu\text{mol}\cdot\text{L}^{-1}$) lower than cisplatin. The activities were up to 6-fold higher than cisplatin for HeLa and 15-fold for MDA-MB 231 cancer cells, as reported recently [2]. At this stage, our focus is on the understanding the electrochemical properties (cyclic voltammetry) and the possible mechanism of action by interaction with biomolecules such as BSA and DNA.

| Complexes | IC ₅₀ $\mu\text{mol}\cdot\text{L}^{-1}$ (HeLa) | IC ₅₀ $\mu\text{mol}\cdot\text{L}^{-1}$ (MDA-MB 231) |
|--|--|--|
| $[\text{RuCl}_2(\eta^6\text{-p-cym})]_2$ | >> 100 | >>100 |
| Cisplatin | 55.79 | 96.35 |
| 1a.BF ₄ | 14.64 | 14.16 |
| 1a.PF ₆ | 15.94 | 15.8 |
| 1b.BF₄ | 11.38 | 6.36 |
| 1b.PF₆ | 8.79 | 6.54 |
| 1c.BF ₄ | 1.71 | 10.83 |
| 1c.PF ₆ | 14.64 | 13.43 |
| 1d.BF ₄ | 15.40 | 6.98 |
| 1d.PF ₆ | 13.46 | 10.23 |

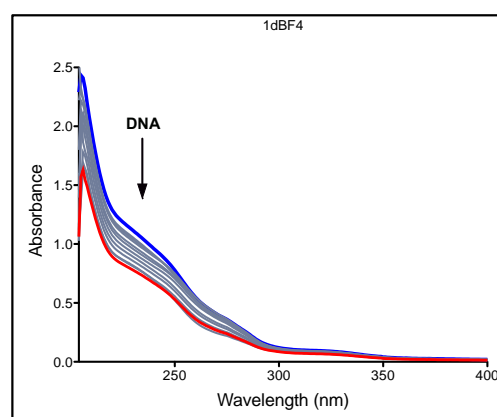


Figure 1. UV-Vis spectra for 1d.BF₄ with DNA additions.

1. da Silva, J.P., et al., *Bis(diphenylphosphino)amines-containing ruthenium cymene complexes as potential anti-Myco bacterium tuberculosis agents*. Journal of Inorganic Biochemistry, 2017. **173**: p. 134-140.

2. J Biol Inorg Chem (2017) 22(Suppl 1): 1. <https://doi.org/10.1007/s00775-017-1475-y>

Acknowledgments

CNPq, CAPES, Fundação Araucária, Departamento de Química da UFPR e UFC.

42ª Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química: Eixos Mobilizadores em Química

Ab Initio Investigation of Nano-interfaces formed by Fe_n and (ZrO₂)₁₃ Nanoclusters

Larissa Zibordi-Besse (PG)¹ and Juarez L. F. Da Silva (PQ)¹

larissa.zibordi@gmail.com; juarez_dasilva@iqsc.usp.br

¹ Quantum Theory of Nanomaterials Group, São Carlos Institute of Chemistry, University of São Paulo

Key words: Density Functional Theory; Nano-interface; Transition-metal cluster; Oxide cluster; Zirconia.

Highlights

Fe_n clusters bind to the oxygen atoms, with the charge transfer Fe→O smaller than the expectations. The adsorption energy increases with *n*, while the Fe *d*-states lie within the HOMO-LUMO (ZrO₂)₁₃ gap.

Abstract

Currently, the search for new energy sources constitute a relevant research guideline due to increased energy demand by society allied to the growing concern with the environment preservation. Thus, industrial reactions require the presence of catalysts, which are mainly constituted by transition metals supported on oxides, TM/MO₂. Besides, the miniaturization process have induced the creation of catalysts in nanoscale, however, the understanding of the formation of interfaces of TM/MO₂ in nanometric level is far from satisfactory. Hence, to understand the role of the particle size in the constitution of the nano-interfaces Fe_n/(ZrO₂)₁₃, *n* = 1, 4, and 8, we performed *ab initio* calculations based on density functional theory, where the Kohn–Sham (KS) equations were solved using the PBE exchange-correlation functional, as implemented in the FHI-aims code. The adsorbed trial configurations were generated using random adsorbed Fe_n cluster on (ZrO₂)₁₃ and the Euclidean similarity distance to remove the similar set structures,[1,2] yielding a set of representative configurations for Fe_n/(ZrO₂)₁₃, that was optimized using DFT-PBE. We found that the systems containing 1 and 4 Fe atoms prefer to adsorb at the border of the zirconia structure, wherein its HOMO is located. On the other hand, the Fe₈ cluster adsorbs at the larger area of (ZrO₂)₁₃, which allows a larger number of interactions Fe–O. In addition, the Fe₈ changes the configuration from the gas-phase to that supported one, which is similar to a known higher energy isomer. To understand the bond strength between Fe_n and (ZrO₂)₁₃, the adsorption energy (*E_{ad}*) was obtained by the difference of the total energy of the adsorbed and the gas-phase systems, and we found there is an increase in |*E_{ad}*| that follows an increase in *n*. The electronegativity difference between Fe and O guarantees a charge transfer Fe → O, however, the increase of *n* causes a reduction of the charge transferred to oxygen atoms, and the magnitude of the Hirshfeld charges are very low for all analyzed cases, pointing to an almost negligible electrostatic stabilization between Fe–O. Beyond that, as expected, an increase of atoms in Fe_n decreases the HOMO-LUMO gap of (ZrO₂)₁₃, since the Fe *d*-states lie in the oxide gap.

References:

- [1] Zibordi-Besse, L.; Seminovski, Y.; Rosalino, I.; Guedes-Sobrinho, D.; Da Silva, J. L. F. *J. Phys. Chem. C* **2018**, 122, 27702–27712.
[2] Chaves, A. S.; Piotrowski, M. J.; Da Silva, J. L. F. *Phys. Chem. Chem. Phys.* **2017**, 19, 15484–15502.

Acknowledgments

This study was financed in part by the Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior - Brasil (CAPES) - Finance Code 001.

Área: **EDU**Nº de Inscrição: **01484**

Interest in science learning and scientific career for high school students

Ana Carolina Koentopp* (PQ)¹, Larissa Barroso da Silva (FM)² and Nicole Glock Maceno (PQ)³.

anacarolk175@gmail.com.

¹Chemistry Department, UDESC.

Key-words: *Science teaching, scientific career, scientific education, surveys, PISA, high school.*

Highlights

Questions were selected from the PISA 2015 socioeconomic questionnaire and sent to high school students, who are interested in learning science, but have no interest in pursuing a scientific career.

Abstract

International education surveys allow the validation of large-scale instruments, with results that help to identify the interests and motivations of students in Science. Among them, we highlight PISA (OECD, 2019), one of the most used polls at present, with the production of data about students from different countries every three years. In this study, eight questions were selected from the PISA 2015 socioeconomic questionnaire, specific to the interest in science learning and to enter the scientific career, which were made available on the Survey Monkey® platform and sent to high school students in Joinville (SC) for through social networks. The main objective was to understand to what extent the interlocutors at the end of basic schooling are interested in learning the natural sciences and follow related careers, with information that can also aid scientific education decisions and policies, as well as teaching practices. From 25 respondents, it was found that 68.0% of the respondents are 17 years old, 60.0% of them girls. Students agree that the most frequent activities in teaching science are the exposition of ideas and debates, as well as explanations by the teacher of concepts relevant to life, being rare the planning of experiments by the students and research activities to test ideas. Regarding the level of information about environmental problems, students indicate that they are more informed and can explain water scarcity (56.0%), the consequences of devastating forests and land use (40.0%), extinction of plants and animals (32.0%), while they never heard of the use of genetically modified organisms (28.0%) and despite their hearing, they have difficulties explaining nuclear waste (52.0%) and increasing of the greenhouse effect in the atmosphere (40.0%). Students agree that problems associated with environmental issues will worsen in the next 20 years, such as forest devastation (84.0%), air pollution (80.0%), greenhouse effect (71.0%), plant and animal extinction (60.0%), nuclear waste (56.0%), water scarcity (52.0%). They also agree or totally agree to learn science (83.0%), which is fun (80.0%), like to do the related reading (72.0%), are happy to work on the issues (72.0%), with pleasure in acquiring new knowledge (92.0%). Regarding science learning for the future, the answers have been divergent: they agree or fully agree that it is worth the effort in the science disciplines to help in the future profession that wants to follow (64.0%), what is learned is accurate to the future for what they want to do (48.0%) and to improve career prospects (76.0%), however, 60.0% disagree or totally disagree that they will learn many things that will help them find a job. On the ease of performing tasks alone, they would explain earthquakes (37.5%) and predict changes in the environment (33.0%), but with great difficulty explaining the formation of acid rain (50.0%) and the possibility of life on Mars (46.0%). The results found agree with the results of SANTOS *et al.* (2011) who, when conducting a research with 216 elementary students in Criciúma (SC), also found that they like to learn science, but they lack experimentation.

References

OECD. Socioeconomic questionnaire of Program for International Student Achievement 2015. Available in <<http://www.oecd.org/>>. Access in 07 Feb 2019.

SANTOS, Alice Coêlho dos, et al. A importância do Ensino de Ciências na percepção de alunos de escolas da rede pública municipal de Criciúma-SC. *Revista Univap, São José dos Campos-SP*, v. 17, n. 30, p. 68-80, dez.2011. ISSN 2237-1753.

Electrochemical study of hydrogen peroxide sensors from crumpled graphene/manganese ferrite composites

¹Larissa H. Nonaka (IC), ¹Victor H.R. Souza (PQ)

larissaharumi123@hotmail.com; victorsouza@ufgd.edu.br

¹Laboratório de Materiais Cerâmicos Avançados (LMCA), Faculdade de Ciências Exatas e Tecnologia (FACET), Universidade Federal da Grande Dourados (UFGD)

Keywords: crumpled graphene; manganese ferrite; electrochemical sensors; hydrogen peroxide.

Highlights

- Crumpled graphene (CG) decorated with manganese ferrite (MnFe_2O_4) nanoparticles synthesized in one single step;
- Electroactivity of the composites strictly related to crumpled graphene/manganese ferrite ratio.

Abstract

The development of new materials with high sensitivity for low concentration hydrogen peroxide (H_2O_2) detection in aqueous media is becoming attractive for researchers. Such interest raises once that H_2O_2 is widely applied as oxidizing agent in the industry and its a co-product of enzymatic reactions.^[1] Among the several nonenzymatic sensors studied for this goal, graphene-based composites are being extremely exploited due to the remarkable properties of graphene, like high electronic conductivity. Despite the desirable properties of graphene, its restacking is a drawback which might compromise further application of this 2D material. Changing the 2D structure of graphene into a paper ball-like structure proven to be a way to avoid such restacking of this carbon nanostructure.^[2] Here, we explored the electrochemical sensing properties for hydrogen peroxide detection using crumpled graphene/manganese ferrite composites as electroactive materials. The composites were synthesized from graphene oxide/ $\text{Mn}^{2+}/\text{Fe}^{3+}$ dispersions nebulized into a tubular furnace. The electrochemical measurements were carried out in a three-electrode cell, using films of crumpled graphene/manganese ferrite drop-casted over fluorine-doped tin oxide substrates as working electrode. Figure 1 depicts the cyclic voltammetric curves of the CG/ MnFe_2O_4 composites where is possible to observe the electroactivity of all materials through a reversible redox pair around -0.4/-1.0V. An improvement in the current was dependent on the quantities of the metal precursor, indicating a higher amount of manganese ferrite decorating the crumpled graphene in CG/ MnFe_2O_4 1:5:5 composite. This information is in agreement with the scanning electron microscopy results. Further chronoamperometric measurements will be provided to confirm the CG/ MnFe_2O_4 composites applicability as hydrogen peroxide sensors.

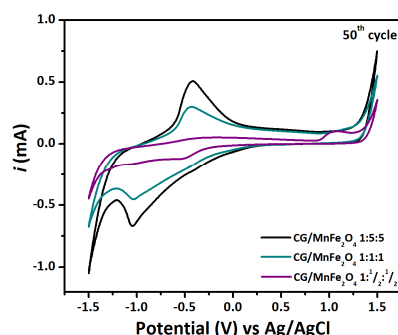


Figure 1 - Cyclic voltammograms of CG/ MnFe_2O_4 composites in three different ratios.

[1] Husmann, S.; Nossol, E.; Zarbin, A. J. G. Carbon nanotube/Prussian blue paste electrodes: Characterization and study of key parameters for application as sensors for determination of low concentration of hydrogen peroxide. *Sensors and Actuators B: Chemical* **2014**, *192*, 782-790.

[2] Luo, J.; Jang, H. D.; Sun, T.; Xiao, L.; He, Z.; Katsoulidis, A. P.; Kanatzidis, M. G.; Gibson, J. M.; Huang, J., Compression and Aggregation-Resistant Particles of Crumpled Soft Sheets. *ACS Nano* **2011**, *5* (11), 8943-8949.

Acknowledgments

Larissa H. Nonaka thanks *Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq)* and *Universidade Federal da Grande Dourados (UFGD)* for the scholarship.

Área: EDU

Nº de Inscrição: 01486

DESCOBRINDO A CIÊNCIA: ENSINANDO QUÍMICA ATRAVÉS DE ASSUNTOS COTIDIANOS

Durval Reis Mariano Júnior (PG),¹ **Gabriela Xavier Rocha** (TM),² **Lidiane Cristina Lázaro da Silva** (IC),³ **Sarah Hessing Louzada** (IC),³ **Rhayra da Costa Almeida** (IC),³ **Adriele de Oliveira Batista** (IC),³ **Monik de Souza Azeredo** (IC),⁴ **Paulo Ricardo Souza Faria** (IC),⁵ **Anderson Pontes Carreiro** (TM),³ **Vanessa Gomes Kelly Almeida** (PQ),⁶ **Mário Geraldo de Carvalho** (PQ),² **Andressa Esteves-Souza** (PQ).^{2*}

durvalmariano@gmail.com; andressaesteves@ufrrj.br

¹Departamento de Bioquímica, IQ, UFRRJ; ²Departamento de Química Orgânica IQ, UFRRJ; ³Instituto de Química UFRRJ; ⁴ Departamento de Ciências Farmacêuticas, ICBS, UFRRJ; ⁵Ciências Biológicas, Pólo Piraí, CEDERJ-UFRRJ; ⁶Departamento de Química Analítica, IQ, UFRRJ

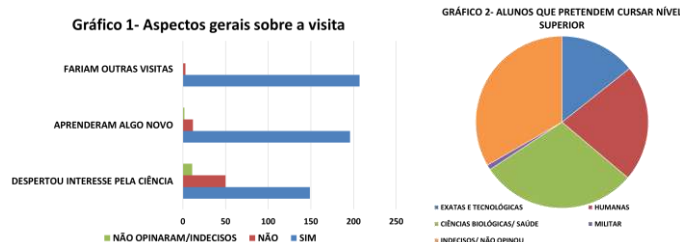
Palavras Chave: Ensino de Química, Ensino de Ciências, Lúdico, Cotidiano, Divulgação da Ciência

Highlights

DISCOVERING SCIENCE: TEACHING CHEMISTRY THROUGH DAILY AFFAIRS. Chemistry is present in our lives, but names and formulas discourage interest in this universe. In this project, children and adolescents are encouraged to interpret and use everyday chemical concepts.

Resumo/Abstract

Sabe-se que a Química está presente em nossa vida de variadas formas, mas nem sempre entendemos bem como funciona. Tantos nomes e fórmulas estranhas nos desestimulam a tentar desvendar este universo que apesar de parecer distante, está presente no nosso dia a dia. Assim, somos levados a acreditar que a Química é para poucos e que compreendê-la é difícil. Pensando nisso, o projeto “DESCOBRINDO A CIÊNCIA: ENSINANDO QUÍMICA ATRAVÉS DE ASSUNTOS DO COTIDIANO” tem como finalidade difundir o pensamento científico em crianças e adolescentes, estimulando-os a interpretar e utilizar conceitos Químicos do cotidiano, de modo a desmistificar a Química como algo maléfico e difícil, e assim diminuir a distância entre o dia a dia e o pensamento científico. O projeto Descobrir a Ciência baseia-se na recepção de crianças a partir de 4 anos e adolescentes para a realização de experiências lúdicas de 2-3 horas no laboratório 38 do Pavilhão de Química da UFRRJ. Tais atividades são elaboradas de acordo com a faixa etária e coordenada por técnicos e docentes que fazem parte do projeto. De agosto de 2016 a junho de 2018, o projeto teve a divulgação realizada através de uma carta convite veiculada por mídias digitais. Foram disponibilizadas 10 visitas por semestre, acontecendo uma vez por semana, em grupos de até 30 alunos do ensino fundamental I e II e de até 40 para alunos do 9º ano do Fundamental e do Ensino Médio. Com isso, foram atendidos 210 participantes do 9º ano e Ensino Médio de 9 escolas públicas e particulares de diversas regiões do estado do Rio de Janeiro. Ao final das visitas foi realizada uma pesquisa simplificada que está apresentada resumidamente nos gráficos 1 e 2, que mostraram, em números absolutos, os aspectos gerais do projeto na visão dos participantes.



Sendo assim, com este trabalho foi possível concluir a importância da divulgação científica em todas as esferas de ensino, de modo a elevar o pensamento crítico e irrestrito de nossos alunos que poderão no futuro trabalhar para a melhoria da compreensão e do desenvolvimento da Ciência.

Agradecimentos/Acknowledgments

Instituto de Química-UFRRJ
Faperj

Determination of chloride ion in water supplies

Mateus G. Ribeiro*(IC),¹ José Iglésio Sousa Filho (IC),¹ Ricardo R. Bandeira (TM),¹ Gláucia T. Corrêa (PQ),¹ Luis Paulo S. Costa (PQ),¹ Jakelyne V. Coelho (PQ)¹

***mateusgr123@gmail.com**

¹ Instituto Federal do Maranhão/IFMA, Campus São Raimundo das Mangabeiras-MA

Keywords: Potability; Residual chlorine; public health

Highlights

Potable water;
Disinfection;
Chemical analysis;
Chlorine in water.

Abstract

The disinfection stage of the water is of paramount importance to confer potability to water for human consumption. Its basic function is the inactivation of pathogenic microorganisms, carried out by means of physical and/or chemical agents. Chlorine-based products, such as disinfectants, are most commonly used in water supply systems around the world. Chemical disinfectants such as chlorine have as main mechanisms of action the inactivation of pathogenic organisms through the destruction or structural disarrangement of the cellular organization, causing interference and developmental impairment. In order to ensure the disinfection of drinking water, a residual free chlorine must be maintained, since in the water distribution stages contact with pathogenic microorganisms may occur and cause health problems. According to Consolidation Ordinance No. 5, dated September 28, 2017, by the Ministry of Health a minimum residual free chlorine content must be of 0.2 mgL⁻¹. The aim of this work was to determination of chlorides in the water supply of the city of São Raimundo das Mangabeiras. Samples were collected during periods of low precipitation (October) and high precipitation (March). For each period, the measurements were made in triplicates, the samples analyzed were from raw water (untreated) and after treatment at the Environmental Sanitation Company of Maranhão (CAEMA). The determination of the chloride ions was based on the Mohr method, the values found are in Table 1. Note that the obtained data affirm that the free residual chlorine content is within the allowed standards. It is noticed that in the different collection periods of the samples the residual free chlorine content did not change for the treated samples. The determination of residual free chlorine content is important to infer how efficient the disinfection process is and whether the concentration causes human health risks.

Table 1: Determination of chloride ions in water

| Precipitation Level | Sample | |
|---------------------|-----------------|---------------------------|
| | Raw water/ mean | Water pos- treatment/mean |
| High precipitation | 6.11 | 16.57 |
| Low precipitation | 9.60 | 16.57 |

Acknowledgments

Instituto Federal do Maranhão-IFMA, Campus São Raimundo das Mangabeiras
Companhia de Saneamento Ambiental do Maranhão – CAEMA
Pró-Reitoria de Pesquisa, Pós-Graduação e Inovação – PRPGI
Fundação de Amparo à Pesquisa e ao Desenvolvimento Científico e Tecnológico do Maranhão – FAPEMA

Área: CAT

(Inserir a sigla da seção científica para qual o resumo será submetido. Ex: ORG, BEA, CAT)

Nº de Inscrição: 01490

(Inserir o número de inscrição do autor que fez a submissão)

Magnetic nanocatalysts in a green route for short peptides production**Vitor A. Ungaro (PG)¹, João P.A. Fairbanks (IC)¹, Liane M. Rossi (PQ)² and M. Teresa Machini (PQ)^{1*}****vitoraugaro@gmail.com; *mtmachini@iq.usp.br**¹Departamento de Bioquímica; ²Departamento de Química; Instituto de Química, USP, São Paulo.

Palavras Chave: Biocatalyst, Peptide Chemistry, Nanoparticles, Enzyme Immobilization, Protease.

Highlights

- Proteases immobilized on superparamagnetic nanoparticles
- Biocatalysis in peptide chemistry
- Catalytic hydrogenation using magnetite/Pd nanoparticles

Abstract

Peptides are biopolymers composed by 2 to 50 amino acid residues and, therefore, with molar mass maximum limit set in 6000 Da. Owing to their physicochemical properties and bioactivities, they have important roles in science and industry varying from therapeutic drugs to materials. Peptides can be synthesized by three main methods: chemical, enzymatic and recombinant DNA, which in reality do not compete but are complementary¹. The enzymatic method is cheaper, cleaner, chemo-, regio- and enantioselective as it employs enzymes to catalyze the chemical reactions. This work aimed to expand the advantages of the enzymatic method for the production of *Ultra-Short Peptides (USPs)* production). Thus, two nanobiocatalysts and a magnetite/Pd nanocatalyst (NP/Pd) were prepared, characterized and employed to produce Ala-Phe, Asp-Phe-OME (*USPs* used as a bitterer² and a sweetener³, respectively), Phe-Phe and Fmoc-Phe-Phe (*USPs* used as materials⁴). Immobilization of the enzymes on magnetite coated with silica (Fe₃O₄@silica) improved some of their properties, facilitated their recovery from the reaction media and made possible their recycling^{2,5}. The common synthetic route to obtain the target *USPs* comprised three steps². The first was the peptide bond formation catalyzed by Fe₃O₄@silica-thermolysin using Z-Ala, Z-Asp, Z-Phe or Fmoc-Phe as acyl donor and Phe-OME as acyl acceptor. The second step was the ester hydrolysis catalyzed by Fe₃O₄@silica-bovine αchymotrypsin starting from Z-Ala-Phe-OME, Z-Phe-Phe-OME or Fmoc-Phe-Phe-OME. The last step was the Z-group removal by hydrogenation catalyzed by NP/Pd starting from Z-Ala-Phe, Z-Asp-Phe-OME and Z-Phe-Phe. All steps were monitored by HPLC and LC/MS to assure that they furnished the desired products; most of them showed to be highly effective; all were clean and safe. **Table 1** describes the yield of each step.

Table 1:

| Target Product | 1 st step yield (%) | 2 nd step yield (%) | 3 rd step yield (%) |
|----------------|--------------------------------|--------------------------------|--------------------------------|
| Ala-Phe | 52 | 87 | 99* |
| Asp-Phe-OME | 16 | Unnecessary | 70 |
| Phe-Phe | 49 | 91 | 81 |
| Fmoc-Phe-Phe | 72 | 74 | Unnecessary |

*Estimated by HPLC.

Both magnetic nanobiocatalysts showed to be more thermostable than the free enzymes, easily recoverable and reusable. Besides efficient, the magnetic nanocatalyst NP/Pd was also recoverable and reused at least 4 times.

(1) Guzman, F. et al., A. Electron. J. Biotechnol., 10 (2), (2007).

(2) Ungaro, V. A. et al., RSC Adv. 5 (46), 36449–36455 (2015).

(3) Magnuson, B. A. et al., Crit. Rev. Toxicol., 37 (8), 629–727 (2007).

(4) Conte, M. P. et al., ACS Appl. Mater. Interfaces, 10 (3), 3069–3075 (2018).

(5) Liria, C. W. et al., J. Nanoparticle Res., 16 (11), 2612 (2014).

Acknowledgments

VAU acknowledges CNPq (Doctoral fellowship 142079/2014-6). MTM is grateful to FAPESP (2015/36143-2) and CNPq (308658/2015-9), LMR acknowledges FAPESP (2016/167387) and CNPq. The authors also thank Dr. Nathalia J. S. Costa and Dr. Cleber W. Liria for nanoparticles synthesis and analytical work, respectively.

Mass spectrometry as a tool for the dereplication of saponins from *Ampelozizyphus amazonicus* Ducke bark and wood.

Simony C. Mendonça (PG)^{1*}, Rosineide C. Simas (PQ)², Daniel L. R. Simas (PQ)³, Suzana G. Leitão (PQ)², Gilda G. Leitão (PQ)¹.

ggleitao@correio.nppn.ufrj.br; sy2802@gmail.com

¹Instituto de Pesquisas de Produtos Naturais - IPPN, UFRJ; ²Departamento de Produtos Naturais e Alimentos - DPNA, Faculdade de Farmácia, UFRJ; ³Bio Bureau Biotecnologia, Fundação Bio-Rio, RJ.

Keywords: *Saracura-mirá*, Mass identification, Dammarane-type triterpene saponins.

Highlights

- The methodology proved to be effective for an initial fingerprint of such complex plant extracts.
- 96 saponins were identified including 71 new ones not yet described in the literature for this species.

Resumo/Abstract

Mass spectrometry has been used in natural products as a first step to identify possible structures and to guide further studies on the isolation of novel compounds. This identification is one of the key elements to drug discovery researches. Preparations of *Ampelozizyphus amazonicus* Ducke (AA) are known for their high content on saponins, especially those of dammarane-type triterpenoid aglycones. In the Amazon region, roots and barks of this plant are widely used in the treatment and prevention of malaria, while the wood is discarded by *quilombolas* in the preparation of the beverage. The extract prepared from the woods is also saponin-rich, but nothing is known about its chemical composition. In this work, we aimed at the dereplication of the bark and wood extracts of *A. amazonicus* (ethanol and aqueous), focusing on the saponins, by the use of LC-MS/MS, HRMS and MZmine software to compare and identify their major compounds. The strategy used to identify the same compounds present in all samples was the analysis of fragmentation patterns, precise mass measurements and the retention time alignments. The extracts showed chemical similarity and, in total, 96 saponins were identified within wood and bark, including 71 new ones, not yet described in the literature for this species. This research proved that the developed method was useful to rapidly and simultaneously identify major saponins in AA and demonstrates the importance of the qualitative dereplication process, allowing the identification of compounds, without time consuming, and as the first step of isolation phytochemical studies.

Agradecimentos/Acknowledgments

Authors are grateful to FAPERJ and CNPQ for financial support to the project, and CAPES for the Ph.D scholarship. We also wish to thank ARQMO (Associação de Comunidades Remanescentes de Quilombolas do Município de Oriximiná), Oriximiná-PA, Brazil, for supervising plant collection and for providing housing during the field trips.

Physical-chemical analysis of water pre- and post-treatment in Water Treatment Station

¹José Iglésio Sousa Filho (IC),¹Mateus G. Ribeiro*(IC),¹Ricardo R. Bandeira (TM),¹Gláucia T. Corrêa (PQ),¹Luis Paulo S. Costa (PQ) ,¹Jakelyne V. Coelho (PQ)¹

*jake.vcoelho@gmail.com

¹ Instituto Federal do Maranhão/IFMA, Campus São Raimundo das Mangabeiras-MA

Keywords: Water quality; potability; human consumption

Highlights

Determination of physical-chemical parameters of water supply in the city of São Raimundo das Mangabeiras, Maranhão.

Precariousness of the water and wastewater system.

Resumo/Abstract

In the state of Maranhão, the concern with the quality of water for human consumption is increasing, due to the precariousness of wastewater treatment systems, trash without sanitary treatment, being able to result in the contamination of the water and consequent spread of pathogens to the population. Thus, due to the lack of knowledge about the water quality index in the city of São Raimundo das Mangabeiras-Maranhão, physical-chemical analyzes of the water supply were carried out. The aim of this work was to characterize the physico-chemical parameters of the water captured in the river used for water supply. Sampling points were taken from the Companhia de Saneamento Ambiental do Maranhão (CAEMA), during a period of low rainfall. Were collected three samples of raw water (untreated) and three samples of the post-treatment water by CAEMA. The physico-chemical parameters obtained were compared with the Consolidation Ordinance No. 5, dated September 28, 2017. The analyzed variables are in the table below and the results obtained, in the majority, are in compliance with the parameters established by the current ordinance. The mean values of pH and iron concentration even though values that exceed the parameters do not compromise the health of the population. The results showed that the treatment adopted by CAEMA, in the city of São Raimundo das Mangabeiras, for the analyzed parameters are satisfactory. Sampling tests collected during periods of high rainfall are in progress.

Table 1: Physico-chemical parameters of water pre- and post-treatment

| Evaluated Parameter | VMP ⁽¹⁾ | Raw water/ mean | Water post-treatment/mean |
|------------------------|--------------------|-----------------|---------------------------|
| Hydrogen potential | 6.0 - 9.5 | 6.5667 | 4.4 |
| Dissolved oxygen | | 8.1667 | 9.1 |
| Phosphor | 0.01 a 0.05 | 0.054 | 0.045 |
| Electric conductivity | 10 a 100 | 11.333 | 70.467 |
| Total dissolved solids | 1000 | 5.5667 | 34.967 |
| Salinity | | 0.01 | 0.03 |
| Iron | 0.3 | 1.3 | 0.42 |
| Alkalinity | | 0.0733 | 0.0467 |
| Calcitic hardness | | 1.8685 | 0.9343 |
| Total hardness | 500 | 13.013 | * |
| Color | | Amarela | Incolor |
| Flavor | | Inodora | Inodora |
| Turbidity | 5 | 9.28 | 2.93 |
| Temperature | | 25.8 | 26.2 |

Agradecimentos/Acknowledgments

Instituto Federal do Maranhão-IFMA, campus São Raimundo das Mangabeiras

Pró-Reitoria de Pesquisa, Pós-Graduação e Inovação-PRPGI

Fundação de Amparo à Pesquisa e ao Desenvolvimento Científico e Tecnológico do Maranhão-FAPEMA

Triterpenes isolated from *Miconia sellowiana* (*Melastomataceae*) fruits

José Guilherme de Souza Corrêa (PG)*¹, Mirelli Bianchin (PG)¹, Armando Mateus Pomini (PQ)¹, Silvana Maria de Oliveira (PQ)¹

smoliveira@uem.br; jguilhermedesouza22@gmail.com

¹Departamento de Química, UEM

Palavras Chave: *Miconia*, triterpenes, Phytochemical

Highlights

The chemical study of the hexane fraction of *M. sellowiana* fruits allowed the isolation of the ursolic and corosolic acid triterpenes.

Resumo/Abstract

Miconia sellowiana (*Melastomataceae*) conhecida popularmente como pixirica é uma espécie endêmica do Brasil de ocorrência relevante para o bioma do Cerrado, pois seus frutos propiciam alimentação para aves em períodos de escassez hídrica. Os estudos químicos realizados com o gênero *Miconia* evidenciam a presença de metabólitos secundários pertencentes às classes dos triterpenos, majoritariamente de esqueletos ursano e oleanano, e flavonoides.

Os frutos secos e moídos (760 g) foram submetidos à extração exaustiva com metanol e posteriormente fracionados por partição líquido-líquido. O fracionamento da fração hexânica por meio de cromatografia em coluna em gel de sílica permitiu o isolamento dos triterpenos pentacíclicos de esqueletos ursano, nos quais foram caracterizados pelos espectros de RMN ¹H e ¹³C como o ácido ursólico (**1**) e ácido corosólico (**2**).

Pelos espectros de RMN de ¹H de **1** e **2** observou-se a presença do tripleto em δ_H 5,13 (*t*; H-12), o qual correlacionou-se com o carbono δ_C 124,5 (C-12), que juntamente com o sinal em 138,2 (C-13) indicaram a presença do esqueleto do tipo ursano para ambas as estruturas. Para a substância **1** observou-se o sinal típico do hidrogênio carbinólico em δ_H 3,0 (*m*), no qual foi atribuído ao hidrogênio H-3 da estrutura, apresentando correlação com o carbono δ_C 76,9 (C-3). Para a substância **2** foram observados os sinais em 3,41 (*m*) e 2,73 (*dd*; *J* = 9,0 e 4,0 Hz) que correlacionaram com os carbonos carbinólicos δ_C 67,1 (C-3) e δ_C 82,3 (C-2), respectivamente. Observou-se ainda a presença dos substituintes ácido carboxílico em δ_C 178,3 (C-28) para ambas as estruturas. Os principais deslocamentos químicos de ¹³C encontram-se na **tabela 1**.

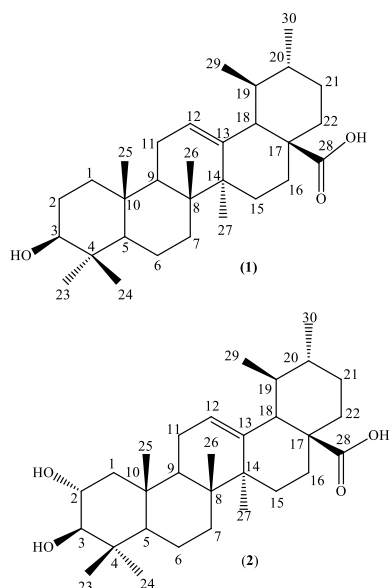


Tabela 1: Principais deslocamentos químicos de ¹³C para as substâncias **1** e **2**

| Posição | 1 | 2 |
|---------|-------|-------|
| 2 | 28,2 | 82,3 |
| 3 | 76,8 | 67,1 |
| 5 | 54,8 | 54,7 |
| 8 | 39,1 | 38,5 |
| 9 | 47,0 | 46,8 |
| 10 | 36,5 | 37,6 |
| 14 | 41,6 | 41,7 |
| 17 | - | 47,0 |
| 18 | 52,4 | 52,4 |
| 12 | 124,5 | 124,5 |
| 13 | 138,2 | 138,2 |
| 23 | 29,0 | 28,8 |
| 24 | 16,9 | 16,4 |
| 25 | 16,1 | 16,9 |
| 26 | 15,2 | 17,0 |
| 27 | 23,3 | 23,2 |
| 28 | 178,3 | 178,3 |
| 29 | 17,0 | 17,1 |
| 30 | 21,1 | 21,1 |

Agradecimentos/Acknowledgments

CAPES, CNPq e UEM

Área: ANA*(Inserir a sigla da seção científica para qual o resumo será submetido. Ex: ORG, BEA, CAT)*Nº de Inscrição: 01494*(Inserir o número de inscrição do autor que fez a submissão)*

A low-cost method for carbamazepine determination in pharmaceuticals formulations using image-based method

Rafaela S. Lamarca (PG),¹ Flávia T. O. Silva (IC),¹ Marcelo Nalin (PQ),² Paulo C. F. Lima Gomes (PQ).¹paulo.clairmont@unesp.br; rafalamarca_uba@yahoo.com.br*¹Departamento de Química Analítica, Instituto de Química, Universidade Estadual Paulista Júlio de Mesquita Filho-Unesp / Araraquara-SP, Brasil.²Departamento de Química Geral e Inorgânica, Instituto de Química, Universidade Estadual Paulista Júlio de Mesquita Filho-Unesp / Araraquara-SP, Brasil.

Palavras Chave: Smartphone, digital images, carbamazepine

Highlights

Determination of carbamazepine in pharmaceutical formulations by digital images. This method provides a fast analysis with low-reagent consuming and generation of chemical residues.

Resumo/Abstract

Carbamazepine is an antiepileptic, widely prescribed for epilepsy treatment, trigeminal nerve pain and some psychiatric disorders^{1,2}.

In pharmaceutical formulations quality control techniques such as spectrophotometric, spectrofluorometric, liquid chromatography and capillary electrophoresis are applied. The latter two techniques are considered high-cost. Thus, there is a great demand for the development of new analytical techniques with fast response, low-cost, easy handling, and reduced consumption of solvents and samples. In order to achieve those requirements, this study demonstrates a method development to determine carbamazepine in pharmaceutical formulations using a digital image-based method using a smartphone. The carbamazepine determination followed the Brazilian Pharmacopeia directive, obtaining limit of detection and quantification of 3.0 and 5.0 mg L⁻¹, respectively. Carbamazepine aliquots were added to a solution of methyl orange and potassium biphthalate buffer 0.20 mol L⁻¹ and pH = 4 in the ratio 5: 2 (v/v) respectively. An orange product formed was captured by the Motorola Moto G5 smartphone and treated in the Image J software. The analytical curve was in the range of 5.00 to 60.0 mg L⁻¹ with r = 0.9960. Intra-day and inter-day precision were evaluated in the concentration range of 5.00 – 60.0 mg L⁻¹ and presented a relative standard deviation (RSD %) of 0.54 to 9.34 % and 6.12 to 7.42 %, respectively. The method developed was compared to a reference method using spectrophotometry. In all analyzed samples did not present statistical difference between both methods. The analyzes were rapid, consuming low volumes of reagent and sample, and being a low-cost. In addition, the method can be applied to determine carbamazepine in other available matrices, requiring simple steps of sample preparation.

Agradecimentos/Acknowledgments

Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de São Paulo (Fapesp, Processo 16/03369-3 and 18/22393-8); Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível superior (Capes); IQ-Unesp-Araraquara.

References

¹ Elmowafy, M. et al., Multifunctional carbamazepine loaded nanostructured lipid carrier (NLC) formulation, International Journal of Pharmaceutics 550 (2018) 359-371.

² Ali, F. et al., Carbamazepine degradation by UV and UV-assisted AOPs: Kinetics, mechanism and toxicity investigations, Process Safety and Environmental Protection 117 (2018) 307-314.

Evaluation of the potential of Erythrosine B for protein determination in commercial vaccines

Francisca das C. S. Silva (PQ)*^{1,2}, Daniel V. R. e Silva (TM)², Anderson B. Matos (TC)², Andrea M. Salgado (PQ)¹, Maria C. Queiroz (PQ)¹

franciskasobral@gmail.com

¹Escola de Química, Departamento de Engenharia Química, UFRJ; ²Laboratório de Extratos Alergênicos LTDA.

Palavras Chave: Eritrosina B; Teor de proteína; Vacinas comerciais

Highlights

Vaccines containing proteins are widely used in immunotherapies. However, a determination of the protein load on the finished product is necessary. Classical methods, like the Lowry method, have limitations for this purpose. Thus, this study uses Erythrosine B as a reagent to determine the protein content at low concentrations of proteins and in different matrices.

Resumo/Abstract

Métodos como Bradford, Lowry, Biureto são bem estabelecidos para determinação de proteínas, porém existem limitações quanto à faixa de detecção abaixo de $0,5 \mu\text{g mL}^{-1}$ e interferentes. Um método alternativo para determinação do teor de proteína e o uso de Eritrosina B com reagente devido sua alta sensibilidade ^[1]

Objetivo: O presente estudo visa à investigação e aplicação da Eritrosina B para determinação de baixo teor proteico em soluções contendo fenol, glicerol e cloreto de sódio, tendo em vista que esses compostos são matrizes para muitas vacinas. **Metodologia:** Uma solução de Eritrosina B 30 mg mL^{-1} , foi preparada e diluída em tampão citrato de sódio $0,25 \text{ mmol L}^{-1}$, pH 3,0 até $60 \mu\text{g mL}^{-1}$. Foram adicionados em um tubo de ensaio 1,0 mL de BSA (diluída em cada matriz) e 1,0 mL de Eritrosina-B. Os tubos de ensaio foram aquecidos em banho-maria até $\sim 94 \text{ }^\circ\text{C}$ por 3 min e logo após resfriados até $25 \text{ }^\circ\text{C}$. As medidas de absorbância foram determinadas em espectrofotômetro UV-Visível em 545 nm. Foram preparadas curvas analíticas de BSA ($2,0$ a $14,0 \mu\text{g mL}^{-1}$) a fim de se avaliar o comportamento do método em água ultrapura Milli-Q®, fenol 0.3 % (m/v); glicerol 30% (v/v); glicerol 30%/NaCl 0.9 % (m/v), e NaCl 0.9 % (m/v). Os parâmetros estatístico para as curvas analíticas em água ultrapura (método Padrão) foram obtidos usando o *software Action Stat 3*. **Resultados:** O método apresentou linearidade na faixa de $4,0 \mu\text{g mL}^{-1}$ a $14,0 \mu\text{g mL}^{-1}$ para curvas construída contendo fenol/ NaCl, e de $2,0$ a $14 \mu\text{g mL}^{-1}$ para as demais matrizes. O método em água ultrapura mostrou-se específico e seletivo uma vez que o valor dos ensaios de recuperação foi de 98,53 %. Para precisão intermediária o método apresentou coeficiente de variação abaixo de 10%. O limite de detecção foi de $0,86 \mu\text{g mL}^{-1}$ e de quantificação de $2,60 \mu\text{g mL}^{-1}$. A robustez do método foi avaliada e obtido melhor resultado em pH 8,0. As amostras comerciais foram analisadas e obtido os seguintes resultados: para a vacina 1 (1ª Série) contendo glicreina 30%/NaCl 0,9%, o teor proteico foi de $6,9 \mu\text{g mL}^{-1}$ de proteína e o valor teórico apresentado pelo fabricante de $5,0 \mu\text{g mL}^{-1}$. Para vacina 2 (2ª Série) e vacina 3 (3ª Série) foram obtido respectivamente os valores de $62,01 \mu\text{g mL}^{-1}$ e $620 \mu\text{g mL}^{-1}$ com os respectivos valores teórico de $50,0 \mu\text{g mL}^{-1}$ e $500 \mu\text{g mL}^{-1}$. Já para a matriz contendo Fenol 0,3 % / NaCl 0,9 % os valores foram $10,3 \mu\text{g mL}^{-1}$, $95,4 \mu\text{g mL}^{-1}$ e $954,2 \mu\text{g mL}^{-1}$, respectivamente para 1ª, 2ª e 3ª série, com os respectivos valores teóricos $5 \mu\text{g mL}^{-1}$, $50 \mu\text{g mL}^{-1}$ e $500 \mu\text{g mL}^{-1}$. Para as matrizes estudadas, a determinação de proteína em água ultrapura apresentou erro relativo percentual de 10%. Porém para vacinas contendo fenol e glicerol em meio salino os erros das medida tornaram os valores não confiáveis, para o método proposto. **Conclusão:** O método usando Eritrosina B é útil quando se deseja determinar baixos teores de proteínas em meio aquoso, porém sofre interferência nos valores de concentração proteica nas matrizes estudadas, aplicando o método instrumental UV-visível.

Referências: [1] Pharmacopeial Forum – USP 32. Proposed USP General Chapter <507> Protein Determination Procedures. U.S. Pharma. 2015. 5 p.

Agradecimentos:



Área: ORG N° de Inscrição: 01498**SYNTHESIS AND ANTIMICROBIAL ACTIVITY OF THIOSEMICARBAZIDE DERIVATIVES**

Maria Aline F. Silva (IC)¹, Rayssa K. M. Gomes (IC)¹, Alessandra R. Souza (IC)¹, Rafael Matos Ximenes (PQ)¹, Kêsia X. F. R. Sena (PQ)¹, Julianna F.C de Albuquerque (PQ)*¹

julianna@ufpe.br

¹Departamento de Antibióticos, UFPE; Recife-Pernambuco

Palavras Chave: Thiosemicarbazide, Antimicrobial Activity, *Candida albicans*, Gram-positive, Gram-negative, Microorganisms.

Highlights

Two new compounds derived from thiosemicarbazide were tested for antimicrobial activity. Two compounds showed yields above 75%. The antimicrobial test showed activity for all compounds mainly for *Bacillus subtilis* and *Candida albicans*.

Resumo/Abstract

Thiosemicarbazide are studied for their important biological properties as antitumor, antibacterial, antiviral, antiprotozoal¹, etc. Compounds (Fig.1) were synthesized with equimolecular amounts of the reagents and accompanied by thin layer chromatography. Compound Ju-705 presented MP=201-202 °C, yield 73%. Rf=0.49 (CH₂Cl₂/MeOH 9.7:0.3) during 0,30 h. at room temperature. Ju-755, MP=210-212°C, yield 80%, Rf=0.43 (CH₂Cl₂/MeOH 9.8:0.2), Rf=0.43 (Hex/AcOEt 4:6) during 1:18 h. at room temperature. The high bacterial resistance to antibiotics particularly in hospital environment, has driven research to find new and more effective drugs. In this study, two new compounds were synthesized and assessed for their antimicrobial activity against bacteria and yeast. Thiosemicarbazide derivatives have proven to be active against Gram-positive and Gram-negative bacteria; Mycobacterium and yeast. The compound Ju-705 was active for two species of Gram-positive bacteria, (*Micrococcus luteus* with halo 14 mm and *Enterococcus faecalis* with halo of 10 mm) and for two Gram-negative bacteria (*Escherichia coli* 9,0 mm and *Serratia marcescens* 9,0 mm) and for a Yeast *Candida albicans* 11 mm). Compound Ju-755 presented activity for three Gram-positive bacteria (*Staphylococcus aureus* 14 mm, *M. luteus* 16.5 and *B. subtilis* 14 mm), and *M. smegmatis* 14 mm), and for a yeast (*Candida albicans* 20 mm). The two compounds presented activity for yeast and Gram-positive bacteria. Only the compound Ju-705 presented activity against Gram-negative bacteria.

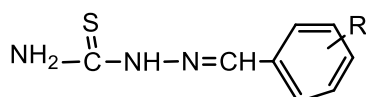


Fig.1 Ju-705 R=4-OCH₃
Ju-755 R=4-Heptil

Reference:

1. BAUTISTA, J.L, FLORES-ALAMO, M., TIBURCIO, J., VIETO, R., TORRENS, H. Synthesis and Structural Characterization of Fluorinated Thiosemicarbazones. **Molecules**, 18: 13111-13123, 2013.
2. BERALDO, H. Semicarbazonas e tiosemicarbazonas: o amplo perfil farmacológico e usos clínicos. **Química Nova**, 27 (3): 461-471, 2004.
3. BHARTI, S.K., NATH, G., TILAK, R., SINGH, S.K. Synthesis, anti-bacterial and anti-fungal activities of some novel Schiff bases containing 2, 4-disubstituted thiazole ring. **European Journal of Medicinal Chemistry**, 45: 651-660, 2010.

Agradecimentos/Acknowledgments

National Research Council of Sciences and Technology (CNPq) for the financing of this research.

Área: QPNNº de Inscrição: 01499

(Inserir o número de inscrição do autor que fez a submissão)

Production of Pigments with Commercial Interest Obtained from *Arthrospira platensis* grown in two different LEDS

Laura P. de A. N. Cavalcanti (PG)^{1,2}, Isabella T. R. de Oliveira (IC)^{2,3}, Cláudia M. L. L. Teixeira (PQ)², Roberto C. C. Martins (PQ)¹

¹ LAPEMESP, Instituto de Pesquisas de Produtos Naturais, UFRJ, Av. Carlos Chagas Filho, 373, Prédio do CCS, Bloco H, Subsolo, Lab 18 SS, Ilha do Fundão, Cidade Universitária, Rio de Janeiro, RJ - CEP: 21944-97; ² Laboratório de Biotecnologia de Microalgas, Instituto Nacional de Tecnologia, Av. Venezuela, 82 - Saúde, Rio de Janeiro - RJ, 20081-312; ³ Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia do Rio de Janeiro, R. Cel. Délio Menezes Porto, 1045 - Centro, Nilópolis - RJ, 26530-060

Palavras Chave: *Arthrospira platensis*, Microalga, Phycobiliproteins, Carotenoids, light intensity, natural pigments production

Highlights

A. platensis produces phycobiliproteins and carotenoids which have pharmacological properties. This work evaluated the production of these products cultivated in different LEDS and light intensity.

Resumo/Abstract

Introduction: Phycobiliproteins and carotenoids are pigments reported in the literature for their broad spectrum of biological activities such as antioxidant, anti-inflammatory and antiparasitic activity. *A. platensis* is a very rich source of phycocyanin and presents very reasonable content of carotenoids, besides it is recognized as a superfood. It is known that the type of light as well as its intensity interferes on the production of these pigments and that it is a species-specific response.^{1,2} For our knowledge, a study about the production of these pigments regarding low light intensities and different types of LED in this strain was still not carried out. **Objective:** to evaluate the production of pigments in two different LED types and light intensities. **Methodology:** *A. platensis* was cultivated in Zarrouk medium modified by George, in bottles (4 L), at $25 \pm 1^\circ\text{C}$ and constant aeration. The light intensities of 60 and 100 $\mu\text{Em}^{-2}\text{s}^{-1}$ were used for each LED: a commonly used for vegetable cultivation (18w: 12 red/ 6 blue) (VCL) and a white LED (WL). Carotenoids were extracted according to the method described by Strickland & Parsons (1972) quantified according to Lichtenthaler (1987). The phycobiliproteins were extracted by the freezing / thawing method³ and quantified using the equation defined by Bennett and Bogorad (1973).^{2,3} **Results and Discussion:** Table 1: Pigment concentration in *A. platensis* cultivated in different LEDS and different light intensities.

| LED Type - Light Intensity ($\mu\text{Em}^{-2}\text{s}^{-1}$) | Total Carotenoids (mg/g) | Phycocyanin (mg/g) |
|---|--------------------------|--------------------|
| WL -60 | 4,41, \pm 0,33 | 204,56 \pm 21,13 |
| WL -100 | 1,33 \pm 0,14 | 142,31 \pm 15,54 |
| VCL - 60 | 4,72 \pm 0,02 | 415,92 \pm 14,63 |
| VCL - 100 | 3,88 \pm 0,75 | 224,30 \pm 0,26 |

Based on the results, the VCL used to enhance the production of pigments in *A. platensis* was the most promising for this purpose, mainly phycocyanin, biomolecules of commercial interest, in the *A. platensis* biomass. This result can be explained as the red light is a major component in the VCL, which was reported to increase the production of phycobiliproteins in this strain (range from 620nm-750nm which capture the light components closer to the red region). In addition, the presence of photons in the range from 440 to 450nm from blue light, is important to produce carotenoids.² The light intensity conditions affect directly the photosynthesis of *A. platensis*. The low light intensity stimulates the pigments biosynthesis, converting the photosynthetic active radiation more than high light intensity, according to Perrine *et al.*, the rate of photon capture exceeds the rate of linear photosynthetic electron transfer and promotes a dissipation of a considerable amount of the captured light energy as heat or fluorescence by non-photochemical quenching processes^{4,5}.

References: ¹Cavalcanti *et al.*, Produção e Controle de Produtos Naturais, Ed. Atena, cap. 6, 2018 ²Lima *et al.*, *Algal Research*, n.31, p. 157-166, 2018. ³Cavalcanti *et al.*, 41ª Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química, 2018. ⁴Vuppaladadiyam *et al.* *Biofuels, Bioprod. Bioref.* n. 12, p.304–324, 2018. ⁵Perrine *et al.* *Algal Research* n.1, p.134–142, 2012.

Effect of morphology in the solution of amyloidogenic model peptides as asymmetric catalysts for aldol reactions

Juliane N. B. D. Pelin¹ (PG), Bruna M. Soares³ (PQ), Barbara B. Gerbelli¹ (PQ), Andrea M. Aguiar² (PQ), Wendel A. Alves^{1*} (PQ).

wendel.alves@ufabc.edu.br

¹ Centro de Ciências Naturais e Humanas, Universidade Federal do ABC, 09210-580, Santo André, Brazil.

² Instituto de Ciências Ambientais, Químicas e Farmacêuticas, Universidade Federal de São Paulo, Diadema, 09972-270, Brazil.

³ Instituto de Química, Universidade Estadual de Campinas, 13083-861, Campinas, Brazil.

Keywords: self-assembled peptides, amyloid-like structures, supramolecular catalysis, aldol reactions.

Highlights

Study of the self-assembly of β -sheet-like peptide structures based on L-phenylalanine (F), L-arginine (R) and L-proline (P) amino acids, as a potential catalyst in asymmetric reactions.

Resumo/Abstract

One of the most critical areas in synthetic organic chemistry is the preparation of chiral organic compounds through various asymmetric syntheses. In this work, the self-assembly and aggregation process in an aqueous medium of the (RF)₄ and P(RF)₄ (derived from A β peptide, where: R= arginine; F= phenylalanine; P= proline) were studied, using spectroscopy, microscopy and scattering techniques. The peptides presented similar critical aggregation concentration (CAC) considering the same medium conditions (~0.35 mmol·L⁻¹ at 25 °C). The stability of the systems was analyzed by zeta potential, which showed that at acid and neutral conditions the colloidal particles remained stable, and for basic solutions strongly interacting colloids and supramolecular aggregates in solution occurs, destabilizing the solution. CD data confirmed the changes in the conformation of the secondary structures by changing the pH. By SAXS, the curves were fitted by using fractal structure function, and we have observed that the size of the monomers that compose the fractal aggregate formation of (RF)₄ is twice bigger than P(RF)₄. Regarding form factor, we have observed a spherical A β form for both systems by using the $\rho(r)$ function. In this way, the (RF)₄ samples showed a ratio maximum of 9.5 nm, while the P(RF)₄ particles were more elongated with ratio maximum around 7.5 nm. These compounds showed potential as a catalyst in aldol reactions, using cyclohexanone and *p*-nitrobenzaldehyde. In this case, under optimized reaction conditions, (RF)₄ water solutions presented 78% of conversion, while the P(RF)₄ had only 51%. Our results show, for the first time, a dependence of the morphology on the stereoselective aldol reactions – the nanospheres provide a higher reaction rate constant than elongated beads or cylindric structures. In the nanosphere structure, the neighboring functional groups have some spaces for the reactants to access. While in the elongated structures, the neighboring aromatic rings packet so tightly that the reactants are difficult to access. Thus, the conformation of (RF)₄ favors a higher conversion, because this one is bigger and its fractal aggregates are less compact when compared to P(RF)₄.

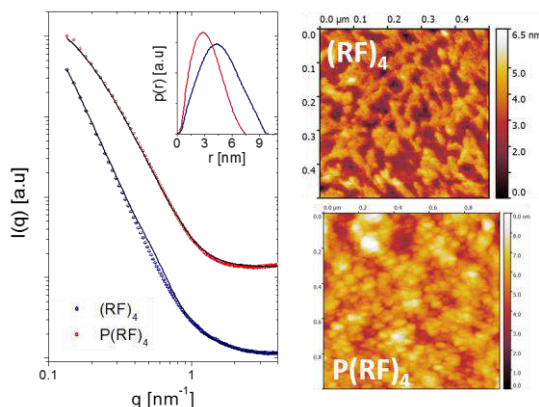


Figure 1. SAXS profiles and AFM images of (RF)₄ and P(RF)₄ in water solution above CAC.

Área: MAT Nº de Inscrição: 01502

Red Downconversion Luminescence and Rare Earth Concentration Dependence on Pr³⁺ Doped Layered Perovskite Phosphor KCa₂Nb₃O₁₀.

Victor Vendruscolo (IC),^{1*} Lucas C. V. Rodrigues (PQ),¹ Vera Regina L. Constantino (PQ)¹.

victor.vendruscolo@usp.br

¹Departamento de Química Fundamental, Instituto de Química, USP

Keywords: Red emission, Dion-Jacobson, Rare earth, Layered niobium perovskite, Phosphor.

Highlights

Host material low-phonon energy grant the phosphor high efficiency.
Pr³⁺ ions occupy the low-symmetry calcium sites.
Pr³⁺ doped materials show intense red luminescence.
Optimal composition with long lifetime is determined.

Abstract

Layered Perovskites are an interesting class of materials due to the composition and properties high versatility. As any material that belongs to the perovskite class, the existence of octahedral and dodecahedral sites favor the embedment of ions other ions of interest, such as rare earths. In this way, the Dion-Jacobson niobium perovskite KCa₂Nb₃O₁₀ can provide a good host matrix for lanthanide ions. In particular, the Pr³⁺ ion is of major interesting because of its red or green emission, dependent of the chemical environment. In the present work, was synthesized the phosphor material KCa₂Nb₃O₁₀:xPr³⁺ via ceramic method, where the Pr³⁺ concentration was variated from 1-0.001 mol %. The synthesis of the material was proceeded by adding the compositional oxides or carbonates (in the case of K⁺ and Ca²⁺) in a porcelain mortar for maceration. The maceration was carried out by using small amount of acetone during 15 min. Then the solid mixture was heated for 5h in a temperature of 1200 °C in a Pt-crucible. The product then was washed with water and leave to dry in closed desiccator.

The XRD analysis for the obtained materials show a homogeneity of phase showing that was able to synthesize the pure host matrix and with Pr³⁺ embedded in layered perovskite, as well. Excitation PL spectra (Figure 1) show a wide matrix absorption for the KCa₂Nb₃O₁₀:1%Pr³⁺ material and relative low intensity f-f transitions of the lanthanide ion. Emission PL spectra (Figure 1) show strong and wide band whit maximum in the red region, which is assigned to ¹D₄, ³P₀ → ³H_J transitions.

These results indicate one is able to synthesise this new phosphor. With respect of the host matrix, Raman spectra show that this material has a low maximum vibration (>1000 cm⁻¹), which is very important to avoid thermal energy loss. Also, Pr³⁺ suits well in the perovskite sites, which possess low-symmetry, therefore can flexibilizate f-f forbident transitions.

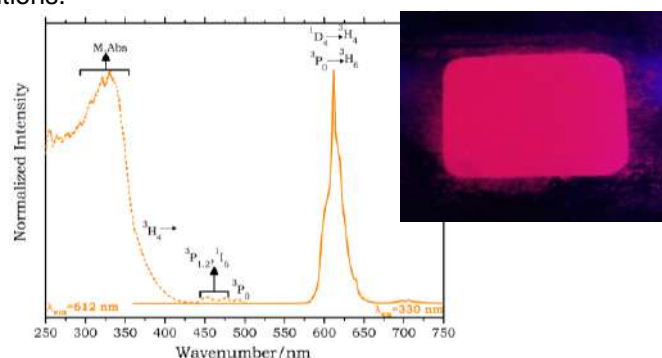


Figure 1: Emission and excitation PL spectra with the photograph of the samples doped with 1% (mol) of Pr³⁺ under UV light.

Acknowledgments

FAPESP, CNPq and CBMM

Área: MAT

Nº de Inscrição: 335321

Avaliação do Desempenho de Isoladores Elétricos de Porcelana através do Uso de Recobrimentos Poliméricos Hidrofóbicos

Giovanni H. Quaresma (PG),^{1*} Claudinei R. Calado(PQ).¹

giovanni.quaresma@yahoo.com.br

¹Departamento de Química do Centro Federal de Educação Tecnológica de Minas Gerais

Palavras Chave: Isoladores, Porcelana, Polímeros, Hidrofobicidade, EPS, Solventes orgânicos.

Highlights

Evaluation of the Performance of Porcelain Electric Insulators through the Use of Hydrophobic Polymeric Sheaths.

Ceramic porcelain insulators are fundamental to electrical system reliability. High wettability causes phenomenon known as flashover. Proposal uses polymers with solvents via drip and airbrush techniques.

Resumo/Abstract

The dielectric properties and mechanical strength of ceramic porcelain insulators are fundamental to guarantee to the electrical system, acceptable rates of continuity in the supply of energy through transmission lines and electric distribution networks. However, atmospheric conditions and the amount of pollutants present therein can severely compromise the efficiency of the operation of said insulators. This situation is due to the fact that they have surfaces composed of metallic oxides that have high wettability, especially when exposed to humid conditions such as mist, dew and rain. This characteristic can cause the formation of water film which, if continuous throughout the surface of the insulator, is capable of conducting electric current and closing an arc (a phenomenon known as flashover). In the present work, in order to improve the hydrophobicity of the surface of such insulators, the deposition of polymers with solvents was carried out on porcelain substrates used as electrical insulators through the use of drip and airbrush techniques. Measurements of contact angle between surfaces and water were performed using a goniometer to characterize the behavior of the used coatings. In order to evaluate the performance of the various coatings, specimens with ceramic enamel coating were included for comparison purposes only. The three coatings that presented the most promising results in terms of hydrophobicity were EPS (Expanded Polystyrene) + THF, EPS + Toluene and EPS + Chloroform applied through an airbrush. The EPS + Chloroform coating had a mean contact angle of 109.63 °, 3.6% higher than EPS + THF and 14.5% higher than EPS + Toluene. The ceramic enamel coating, as expected, presented hydrophilic behavior. In this way, the data obtained experimentally reveal that the EPS presents a great potential of application as an alternative to the materials already used in the market, because it is a reuse material, totally recyclable and economically viable.

Agradecimentos/Acknowledgments

CEFET-MG, SENAI-CIT / MG and Professor Claudinei Calado for the availability of laboratory and equipment infrastructure, which made it possible to carry out the tests and analyzes necessary for my research topic.

Área: ANA

Nº de Inscrição: 01504

Desenvolvimento de método espectrofotométrico para a determinação de hormônio em água de reuso.

Maria Lucia O. Machado (PG)¹, Naomi Akiba (PG)¹, Mauro Coelho dos Santos (PQ)², Ivanise Gaubeur (PQ)^{1*}.

lucia.machado@ufabc.edu.br

¹Laboratório de Espectroanalítica Molecular e Atômica (LEMA), Centro de Ciências Naturais e Humanas, UFABC – Universidade Federal do ABC, Santo André, São Paulo, Brasil.

²Laboratório de Eletroquímica e Materiais Nanoestruturados (LEMN)., Centro de Ciências Naturais e Humanas, UFABC – Universidade Federal do ABC, Santo André, São Paulo, Brasil.

Palavras Chave: *Preparo de amostra, poluentes emergentes, água de reuso, método espectrofotométrico.*

Highlights

Hormones in reuse water. Separation and pre-concentration by liquid phase microextraction (LPME). Spectrophotometric method.

Resumo

A água é um recurso natural cada vez mais escasso, não somente pela sua quantidade, sua qualidade está comprometida com o crescimento populacional e avanço tecnológico, que quando não usado de forma consciente e sustentável, resulta em resíduos difíceis de serem caracterizados e tratados. Dentre estes resíduos destacam-se os poluentes emergentes que podem estar presentes em baixas concentrações no meio aquático. Entre outros poluentes emergentes tem-se o 17 α -etinilestradiol, que é um hormônio sintético utilizado em pílulas anticoncepcionais. É eliminado pela urina e fezes e pode atingir fontes de água potável e subterrâneas se não tratado de forma adequada. Não existe uma legislação brasileira específica para esse tipo de poluente e os métodos analíticos mais utilizados para a determinação de hormônios consiste em técnicas cromatográficas combinadas com detecção UV-Vis. Uma das grandes dificuldades na determinação desses poluentes é que muitos geralmente estão presentes em baixas concentrações. Este trabalho propõe um método espectrofotométrico combinado com a microextração líquido líquido dispersiva (DLLME) para a pré-concentração e determinação do hormônio 17 α -etinilestradiol em água de reuso¹. As variáveis que influenciam na microextração em fase líquida: solvente extrator, dispersão do solvente extrator, influência do pH e adição do eletrólito foram avaliadas utilizando o modelo univariado. Já as variáveis volume do solvente extrator, tempo de agitação em vortex e centrifugação foram avaliadas e otimizadas utilizando um planejamento multivariado. Os experimentos foram conduzidos utilizando uma solução 50 mg L⁻¹ do hormônio preparada, diariamente, em meio de 20% de acetonitrila e as leituras foram realizadas utilizando espectrofotômetro UV-Vis (Agilent, Cary 8454) e NanoDrop 2000 (Thermo Fisher). As melhores condições de extração foram: 200 μ L de 1-undecanol, tempo de agitação por vortex e centrifugação de 15 s e 1 minuto, respectivamente. As variáveis, valor de pH e adição de eletrólito no processo de extração não apresentaram influência significativa. Foram obtidas curvas analíticas de calibração com faixa linear de 1.50 a 50.0 mg L⁻¹ (sem a pré-concentração) e de 0.10 a 2.50 mg L⁻¹ (após a pré-concentração). Os limites de detecção e de determinação foram estimados em 0.030 mg L⁻¹ e 0.10 mg L⁻¹ e um fator de pré-concentração estimado em 35, muito próximo ao valor esperado 40.

1. LIMA, Diana LD et al. Low cost methodology for estrogens monitoring in water samples using dispersive liquid-liquid microextraction and HPLC with fluorescence detection. *Talanta*, v. 115, p. 980-985, 2013.

Agradecimentos

FAPESP projeto 2016/23878-0 e CNPq 309881/2015-3

CEETEPS - Centro Estadual de Educação Tecnológica Paula Souza

Me. Thays de Souza Lima - Doutoranda em Ciências e Tecnologia da Sustentabilidade - UNIFESP

Área: MD Inscrição: 01505

Optimization of a protocol for the virtual screening of a series of small-molecules ligands of the tubulin colchicine binding site

David L. Palomino-Salcedo (PG),¹ Luma G. Magalhães (PG),¹ Glaucius Oliva (PQ),¹ Adriano D. Andricopulo (PQ).^{1*}

palomino@ifsc.usp.br; aandrico@ifsc.usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos, USP

Palavras Chave: *Molecular Dynamics, Molecular Docking, Binding energy, Tubulin, Microtubule.*

Highlights

We have developed an optimized protocol using virtual screening of small molecules to identify new compounds with anticancer properties targeting the colchicine binding site of α/β -tubulin heterodimers.

Resumo/Abstract

Microtubules, filaments formed by the polymerization of α and β -tubulin, are essential for all eukaryotic cells in different cellular processes since they are the basic components of the cytoskeleton. [1] Due to their crucial role in the mitotic spindle formation in cell division, microtubules are considered an attractive target for the development of candidates for new anticancer drugs. Compounds that bind to the microtubules destabilize their dynamics by inducing apoptosis, leading to cell death. Previously we developed a protocol based on cluster analysis to find average conformations of the α/β -tubulin heterodimer from several molecular dynamics simulations performed over the crystallographic structure with PDB-ID 5JCB. Then, we used the resulting optimized structures to execute molecular docking simulations in a library of small-molecule ligands (acridone derivatives) with known IC_{50} values [2]. The results of this protocol allow us to discard molecules with low inhibition power, having a percentage of false positives around 30%, and zero false negatives. Now, in this work, we have measured the binding energy between this series of molecules and the colchicine binding site of α/β -tubulin heterodimers using direct and indirect methods. Our results allow us to discard 50% of the false positives by removing molecules that would have poor binding energy. This protocol succeeds in predicting new candidate molecules with high binding affinity to the α/β -tubulin colchicine binding site.

References

[1] Parker, Amelia L., et al. "An emerging role for tubulin isotypes in modulating cancer biology and chemotherapy resistance." *International journal of molecular sciences* 18.7 (2017): 1434.

[2] Magalhaes, L. G. et al. Discovery of a series of acridinones as mechanism-based tubulin assembly inhibitors with anticancer activity. *PLoS ONE*, v. 11, n. 8, p. e0160842, 2016.

Agradecimentos/Acknowledgments

We thank the development agencies Capes, CNPq and FAPESP.

Synthesis of piperidine and pyrrolidine alkaloid scaffolds through cascade reaction involving transaminases and Aza-Michael addition

Katherine L. Romero Orejón* (PG), ¹Fábio D. Nasário (PQ), ¹Anita J. Marsaioli (PQ) ¹

katherine.romero019@gmail.com; anita@unicamp.br

¹LabBioChem, Departamento de Química orgânica, Instituto de Química, UNICAMP, Campinas, SP, Brasil

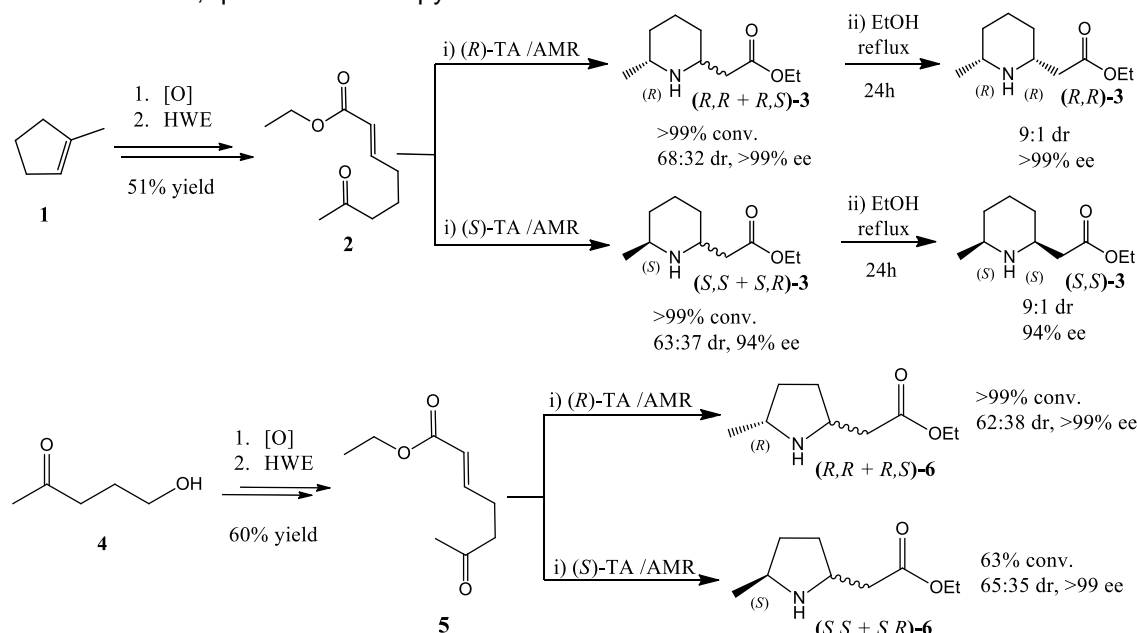
Keyword: Alkaloids, Cascade reactions, Intramolecular Aza-Michael additon, Transaminases.

Highlights

Process in accordance with principles of green chemistry. Enantioselective reductive amination catalyzed by transaminases. Cascade reaction with high conversion and high enantiomeric excess.

Abstract

Alkaloids are natural products with a wide spectrum of biological activities, and new drugs are constantly designed based on these. However, their asymmetric synthesis is a challenge, driving the search to efficient routes. Therefore, we proposed an enzymatic cascade reaction involving transaminases (TA), followed by a spontaneous intramolecular Aza-Michael reaction (AMR)¹ to produce enantiopure disubstituted piperidine and pyrrolidine scaffolds. (Scheme 1) The α,β -unsaturated keto esters (**2** and **5**) were synthesized by oxidation of **1** and **4**, followed by Horner–Wadsworth–Emmons reaction (HWE) respectively. Commercial transaminases were used to perform a reductive amination of the ketones, obtaining enantiopure amines. Subsequently, AMR occurred providing diastereomeric mixtures of piperidine **3** and pyrrolidine **6**. Finally, the epimerization of piperidine **3** led to the formation of *cis*-(2*R*, 6*R*)-**3** and *cis*-(2*S*, 6*S*)-**3** diastereomers up to >99% ee. These encouraging results are the first step of a multi-enzymatic cascade reaction involving TA, reductive aminases to produce indolizidine, quinolizidine and pyrrolizidine alkaloids scaffolds.



Scheme 1. Synthesis of piperidine and pyrrolidine scaffold by transamination/AMR.

1. Ryan, J.; Šiaučiulis, M.; Gomm, A.; Maciá, B.; O'Reilly, E.; Caprio, V. *J. Am. Chem. Soc.*, **2016**, *138*, 15798.

Acknowledgments

Authors acknowledge the financial support provided by: FAPESP grants 2018/07978-0 and 2014/50249-8, and CNPq grants 140774/2018-1, 307885/2013-5 and 153680/2018-0.

42ª Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química: Eixos Mobilizadores em Química

Área: ANA

Nº de Inscrição: 01507

Additivity of optical emissions applied to neodymium and praseodymium quantification in metallic didymium and (Nd,Pr)-Fe-B alloy samples by low-resolution atomic emission spectrometry

Rodrigo Papai¹ (PQ), Milena Aparecida de Sousa¹ (IC), Karina Torre da Fonseca¹ (IC), Gilmar Alves de Almeida¹ (PG), João Ricardo Filipini da Silveira¹ (PG), André Luis Nunis da Silva¹ (PG), João Batista Ferreira Neto¹ (PQ), Célia Aparecida Lino dos Santos¹ (PQ), Fernando José Gomes Landgraf^{1,2} and Maciel Santos Luz¹ (PQ)*.

rodrigopapai@ipt.br; macielluz@ipt.br

¹Centro de Tecnologia em Metalurgia e Materiais, IPT - Instituto de Pesquisas Tecnológicas, São Paulo, Brasil.

²Escola Politécnica da Universidade de São Paulo - EPUSP, São Paulo, Brasil.

Palavras Chave: *Additive Emissions; Neodymium; Praseodymium; Mathematical Approach; Spectral Interferences; Atomic Emission Spectrometry*

Highlights

Evaluation of optical emission additivity. Spectral interference corrected by simple mathematical approach. Determination of Neodymium and Praseodymium in metal alloys by Low Resolution Atomic Spectrometer.

Abstract

In this work, the effectiveness of a mathematical approach to solve the spectral interferences involved in the optical emission of two chemical species (neodymium and praseodymium) when using monochromators with low-resolution in atomic spectrometry is evaluated. Although recent technological advances have promoted spectrometers equipped with high-resolution monochromators, which have a great instrumental capability in the separation of nearby lines and consequently avoid spectral interferences, many laboratories still have old spectrometers installed with insufficient resolution to overcome such interferences. In order to evaluate a mathematical approach based on Lambert-Beer's Law, the optical emissions of neodymium and praseodymium were monitored on a low-resolution (200 pm) flame atomic emission spectrometry (F AES). These two elements were strategically chosen as an application model because they exhibit similar physicochemical properties, joint occurrence in nature and because they are increasingly used in the manufacture of super-magnets, a material increasingly required by the high technology industry. The effectiveness of the mathematical approach was evaluated in three different ways: (i) by recovery of the analytes in synthetic mixtures containing known quantities of the species; (ii) by spike and recovery trials on a representative blend of dissolved samples and (iii) by comparing the results obtained with another analytical method (inductively coupled plasma optical emission spectrometry - ICP OES) with a higher spectral resolution. The results indicate the effectiveness of this simple mathematical approach, allow the "survival" of instruments equipped with low-resolution monochromators and demonstrate the applicability of this approach to spectral correction. In addition, this work contributes an analytical method for the quantification of neodymium and praseodymium in metallic alloy samples involved in the production of super-magnets, aiding in the strict quality control of these materials.

Acknowledgments

The authors are grateful to the *funding sources*: (i) Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico - CNPq 465719-2014-7; (ii) Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior - CAPES 23038000776/2017-54; (iii) Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de São Paulo - FAPESP 2014/50887-4 and the *fellowship* granted to Rodrigo Papai (CNPq DTI-A 380490/2018-8).

We also thanks Bruno Menezes Siqueira (Application Scientist) for initial training in ICP OES and Nova Analítica company for kindly granting ICP OES (iCap 7400) for use in our laboratory.

Área: ANA

Nº de Inscrição: 01509-1

Avaliação da aplicabilidade da estratégia de diluição de aerossol (HMI) em determinações por MP AES

Anderson A. Rocha (PQ),^{1,2} Christiane Duyck (PQ),² Luiz Gabriel B. A. da Costa (IC),² * Rodolfo Lorençatto (PQ)³

lgabriel@id.uff.br; araujo20002000@yahoo.com.br

¹ Núcleo Estudo em Biomassa e Gerenciamento de Água (NAB), UFF, Edmundo March, Niterói, RJ, 24210-310, Brasil.

² Instituto de Química, UFF, Outeiro de São João Batista, s/n, Centro, Niterói, RJ, 24020-141, Brasil.

³ Agilent Technologies Brasil, Alameda Araguaia, 1142, Barueri, SP, 06455-940, Brasil.

Palavras Chave: *Diluição de Aerossol, Otimização Experimental, MPAES*

Highlights

Evaluation of the applicability of the aerosol dilution strategy (HMI) in determinations by MP AES

Determination of metals by MPAES.

Evaluation of the effect of the aerosol dilution on the signal in matrices of different salinities.

Multimode Sample Input System (MSIS).

Resumo/Abstract

Dentre os desafios nas determinações analíticas tem-se o pré-tratamento de amostra e a interferência de matriz. Com relação à primeira, desde uma simples diluição até a decomposição ácida da amostra assistida por microondas, invariavelmente, haverá demanda de tempo e será necessário o uso de reagentes ultrapuros. Por outro lado, a interferência de matriz é um dos fatores limitantes para determinação de elementos por uma técnica instrumental. Especificamente, técnicas que envolvem processo de nebulização e tem plasma como fonte de ionização apresentam relativa restrição com relação à salinidade da amostra, seja pelo risco de obstrução de capilar no sistema de injeção, ou pela redução do potencial de ionização do plasma. Neste contexto, o presente estudo tem como objetivo avaliar um procedimento de diluição do aerossol (HMI)^{1,2} com vista à introdução direta de amostra no MP AES. Cabe destacar uma importante vantagem desta técnica que é o baixo custo operacional, por utilizar N₂ no lugar de argônio. A metodologia consistiu em utilizar um sistema multimodo de introdução de amostra (MSIS), no qual foi acoplado um nebulizador OneNeb[®] e um fornecimento auxiliar de gás nitrogênio (N₂ Aux) controlado por um AGM¹ e usado para diluir o aerossol da amostra nebulizada. A vazão de N₂ Aux variou de 0.086 a 0.767 L min⁻¹, mantendo seu somatório com a vazão de nebulização, em 1 L min⁻¹. As linhas iônica (280,271 nm) e atômica (285,213 nm) do magnésio foram analisadas em uma solução contendo este elemento, para cada vazão de N₂ Aux. A figura 1 apresenta a razão de sinal de Mg (iônica / atômica) em função da salinidade e do processo de diluição do aerossol (Neb 0,5 L min⁻¹ + Dil 0,5 L min⁻¹). Como esperado, a salinidade compromete o sinal analítico, mas há um aumento na resposta do sinal iônico, indicando maior potencial de ionização no plasma quando é usado o procedimento de diluição do aerossol. Curvas analíticas (1.0 a 5.0 mg L⁻¹) de cobre foram preparadas em diferentes níveis de salinidade (NaCl, 0.1 a 2.0%) e o sinal analítico foi avaliado quanto ao processo de diluição do aerossol, implicando em variação nas sensibilidades. Um planejamento experimental está em andamento para avaliar o efeito da altura de leitura no plasma. Apesar da redução do sinal analítico pela diluição com N₂, a introdução de menor carga de matriz ao plasma fez com que sua temperatura seja pouco modificada, garantindo mais robustez nas análises. A estratégia de diluição do aerossol (HMI) é promissora para a determinação de elementos em amostras salinas pela técnica de MP AES.

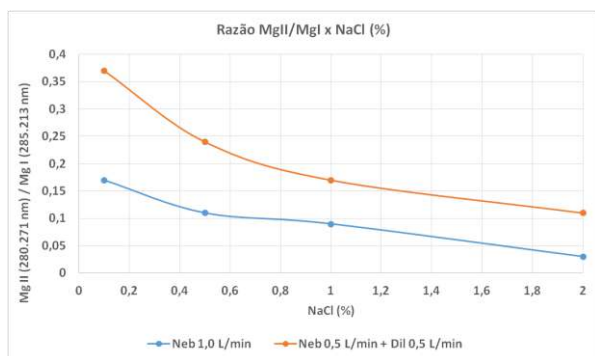


Figura 1: Razão entre linha iônica e atômica de Mg com variação do teor de NaCl com e sem diluição de aerossol.

Referências: ¹ Doker, Serhat, Anal. Methods, 2017, 9, 1710

² Nobrega, J. A. et. al., Talanta 178 (2018) 805–810

Agradecimentos/Acknowledgments

Agilent Technologies

42ª Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química: Eixos Mobilizadores em Química

Chemical and biological evaluation of *Penicillium purpurogenum* extracts

¹Paulo A.L. Santiago (PG), ²Genésio P.B. Junior (IC), ¹Luana Q. de S. Leão (PG), ¹Elzalina R. Soares (PG), ¹Richardson A. Almeida (PQ), ¹Rita de C.S. Nunomura (PQ), ²Priscila F. de Aquino (PQ)*

santiago_fro@hotmail.com; priscila.aquino@fiocruz.br

¹Universidade Federal do Amazonas - UFAM; ²Fundação Oswaldo Cruz – Instituto Leônidas e Maria Deane

Palavras-Chave: *Penicillium purpurogenum*, Metabólitos secundários; Antimicrobiano.

Highlights

P. purpurogenum chemical compounds present antimicrobial activity and changes in the growth medium modify secondary metabolites profiles.

Resumo

Os fungos do gênero *Penicillium* destacam-se devido à produção de metabólitos secundários com atividade biológica como a penicilina, penicillipirona, terretriona D e penicibrocazina B. A produção desses compostos é regulada por vias metabólicas, que podem ser estimulados pela luz, temperatura, substâncias resistentes a degradação e nutrientes disponíveis. A indução dessas vias, em diferentes condições pode levar a uma maior produção ou até mesmo a descoberta de novos compostos bioativos. Sendo assim, o presente estudo teve como objetivo avaliar alterações no metabolismo do *P. purpurogenum* cultivado em diferentes meios e a atividade antimicrobiana dos obtidos extratos. Para isso, a linhagem depositada na Coleção de Fungos da Amazônia (CFAM) do Instituto Leônidas e Maria Deane (ILMD) foi reativada em BDA por sete dias. Em seguida, elaborou-se uma solução de esporos na concentração de 1×10^6 UFC/mL. Desta solução, foram inoculados 50 μ L em diferentes erlenmeyers contendo os meios BDL, SB, YES e ISP₂. O experimento foi realizado em triplicata, incubado à 28 °C por 15 dias. Após este tempo, o caldo foi extraído com acetato de etila. Os extratos foram submetidos à análise por LC-MS e avaliação do potencial antimicrobiano contra *Candida albicans*. Verificaram-se grandes alterações no perfil dos metabólitos secundários do *P. purpurogenum* devido à mudança das condições de cultivo (Figura 1). Tal fato revela o potencial deste fungo em produzir compostos bioativos de diversas classes como alcalóides, dicetopiperazinas e terpenóides a partir do estímulo de genes ou vias metabólicas não ativadas.

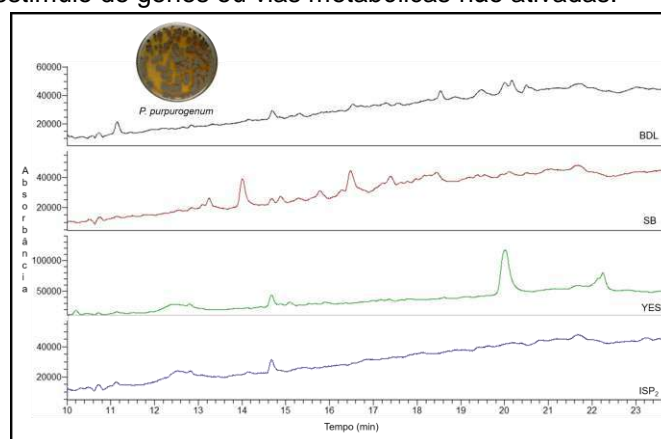


Figura 1: Cromatograma do cultivo de *P. purpurogenum* em diferentes meios de cultura.

Em estudo realizado por Coelho et al.(2011) sobre a atividade antimicrobiana de extratos obtidos a partir do cultivo do *Penicillium* spp contra *C. albicans*, revelaram a sensibilidade da cepa aos seus compostos químicos. De maneira semelhante, os extratos obtidos a partir do cultivo em SB, YES e ISP₂ apresentaram atividade na concentração de 1 mg/mL. Portanto, os desvios metabólicos mais acentuados são observados nos meios de cultivo SB, devido à variedade de substâncias produzidas e YES pela superprodução de uma substância majoritária, em detrimento de outras. Adicionalmente, a atividade antimicrobiana não foi observada apenas para o extrato obtido a partir do meio BDL.

Agradecimentos

CAPES, CNPq, FIOCRUZ, ILMD, FAPEAM e UFAM

Área: MED

(Inserir a sigla da seção científica para qual o resumo será submetido. Ex: ORG, BEA, CAT)

Nº de Inscrição: 01511

(Inserir o número de inscrição do autor que fez a submissão)

Quantitative structure-activity relationship models applied to structurally diverse chemotypes having anti-*Trypanosoma cruzi* activity

Anacleto S. de Souza (PG),¹ Leonardo L. G. Ferreira (PQ),¹ Adriano D. Andricopulo (PQ),¹

leonardo@ifsc.usp.br; aandrico@ifsc.usp.br

¹Laboratory of Medicinal and Computational Chemistry (LQMC), Physics Institute of São Carlos (IFSC), University of São Paulo (USP), Avenida João Dagnone 1100, São Carlos, SP 13563-120, Brazil.

Keywords: Chagas Disease, QSAR, Kernel-Based PLS, Trypanocidal Agents, Artificial Neural Networks, Molecular Modeling

Highlights

Chagas disease is a neglected tropical disease and a major global health problem, especially in Latin America

Artificial neural networks (ANNs) and Kernel-Based Partial Least Squares (KPLS) are worthwhile approaches to generate knowledge from complex datasets

ANNs and KPLS were used to investigate structural and physicochemical properties that are pivotal for *in vitro* trypanocidal activity

Abstract

Chagas disease, a neglected tropical disease caused by the protozoan *Trypanosoma cruzi*, has emerged as a serious health problem worldwide, and is an endemic condition in Latin America. Frequently, small-molecule compounds with promising activity against *Trypanosoma cruzi* macromolecular targets fail in *in vitro* phenotypic assays. These unsuccessful outcomes can be associated with inadequate physicochemical properties that result in poor membrane permeation of the compounds and, consequently, poor cell uptake. Thus, investigation of these features through quantitative structure-activity relationship (QSAR) modeling is a worthwhile approach to investigate physicochemical profiles, improve permeability through biological membranes, and optimize biological activity. Herein, a back-propagation artificial neural network (ANN, $r^2 = 0.81$ and $r^2_{\text{pred}} = 0.81$) and a kernel-based partial least squares model (KPLS, $r^2 = 0.81$ and $r^2_{\text{pred}} = 0.85$) were developed to correlate structural and molecular properties of 363 structurally diverse compounds having *in vitro* activity against *T. cruzi*. The characterization of the chemical and biological space covered by the dataset compounds was performed by using a principal component analysis (PCA), which was subsequently used to select the training and test sets to construct the models. The molecular descriptors used to build the QSAR models were the following: molecular weight, lipophilicity, H-bond donors and H-bond acceptors, number of rotatable bonds, polar surface area, electro-topological state (Estate), molar refractivity, polarization, heavy atom count and ring count. The models highlighted the most relevant scaffolds for biological activity against *T. cruzi*. The generated models consist of a useful resource to be used in the design of novel trypanocidal agents having optimized properties.

Acknowledgments

We gratefully acknowledge the Sao Paulo Research Foundation (Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de São Paulo – FAPESP), grant 2013/07600-3, and the National Council for Scientific and Technological Development (Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico – CNPq).

A novel and simple square wave voltammetric method for atorvastatin determination based on a lead probe signal suppression on a glass carbon electrode.

Leonardo G. de Almeida^{*} (PG)¹, Wanderson A. da Silva^{1,2} (PG), Ricardo Q. Aucélio (PQ)³, Fábio G Lepri (PQ)¹, Felipe S. Semaan (PQ)¹, Rafael M. Dornellas (PQ)¹, Wagner F. Pacheco (PQ)¹.

lgalmeida@id.uff.br

¹Universidade Federal Fluminense, Instituto de Química, Programa de Pós Graduação em Química. ²Centro Federal de Educação Tecnológica Celso Suckow da Fonseca (CEFET-RJ), Campus Petrópolis. ³Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro (PUC-Rio).

Palavras Chave: atorvastatin, voltammetry, electrochemical probe, lead, pharmaceutical formulation

Highlights

- A novel approach for voltammetric determination of atorvastatin.
- Quantification by the suppression of the voltammetric signal of a lead probe on a glass carbon electrode.
- There was no complex formation and the suppression is due to the competition by the surface of the electrode.
- Method was successfully applied to pharmaceutical formulation.

Resumo/Abstract

The statins are a class of widely used substances in the treatment of cardiovascular diseases due to their ability to reduce LDL cholesterol, increasing the levels of HDL cholesterol, being rosuvastatin and atorvastatin the most widely consumed statins worldwide. With regard to the voltammetric analysis, when the analyte is not present in the sample in a concentration range high enough to allowed its direct determination, it is usual to perform a modification on the electrode surface, or the complexation of the analyte, or a sample preparation to pre concentrate the specie. In the approach here show for the first time, the analytical signal of an organic specie was monitored by its capacity to suppress the analytical signal of a Pb^{2+} probe (Pb^{2+} 50 $mmol L^{-1}$, $E_p = -0.4 V$, 250 $\mu mol L^{-1}$) on a glass carbon electrode, resulting in an increase of 20 times on the sensibility of the technique, with no lost of accuracy and precision. The organic specie used in this work as model was atorvastatin. The mechanism of signal suppression was studied by absorption spectrophotometry in the UV-Vis region and square wave voltammetry, and it was found that the signal attenuation of the probe occurs only under specified conditions of electrochemical measurements, with the adsorption of atorvastatin on the surface of the working electrode. The influence of some parameters on this suppression was studied, as the presence of other metals and statins. It was found that Fe and simvastatin interfered in the method. The optimized method provided a detection limit of 0.2 $\mu mol L^{-1}$ and a quantification limit of 0.6 $\mu mol L^{-1}$. The repeatability of 2.95% ($n = 10$) was compared to other statins. The method was applied in a sample of pharmaceutical formulation, resulting in $100.3 \pm 3.2\%$ of accuracy.

Agradecimentos/Acknowledgments

The authors thanks to FAPERJ, CAPES and CNPQ, for the financial support

Building of a low-cost flow photoreactor and investigation of the influence of sand granulometry on water flow through the reactor.

Wenderson A.S. Lira (IC),^{1*} Geize C.C.A. Oliveira (PQ),¹ and Adriano C. Rabelo (PQ).²

andreyllira@gmail.com; adrianorabelo.quimica@gmail.com

¹Instituto de Engenharia e Geociências (IEG), Universidade Federal do Oeste do Pará (UFOPA); ²Instituto de Ciências da Educação (ICED), Universidade Federal do Oeste do Pará (UFOPA)

Keywords: *Photocatalysis, Titanium oxide, Catalysis.*

Highlights

Obtaining the ideal point of the sand as a substrate for photocatalysts in flow of TiO₂, ZnO, Fe₂O₃.

Abstract

In this research, was evaluated the influence of sand granulometry in the flow water from Alter do Chão Village, Santarém, PA, using a low-cost photocatalytic reactor (Figure 1). Four granulometric range and sand mix were evaluated. As the sand particle size decreases the resistance to the flow increases. Thus, mix sand presents more water flow. The main contribution of this research is find an ideal point in the relationship between the smaller particle size and the higher flow, and evaluate if this sand can be used as a substrate for photocatalysts blended with, for example, Iron Oxide (III), Zinc Oxide and Titanium Oxide (IV). A sigmoid behavior was found in this relationship between the grain size and the flow, indicating an optimum point in particle size between 180 and 250 micrometers, as show in figure 2. Since, will be possible to obtain the best relationship between resistance to the flow and the support surface area.

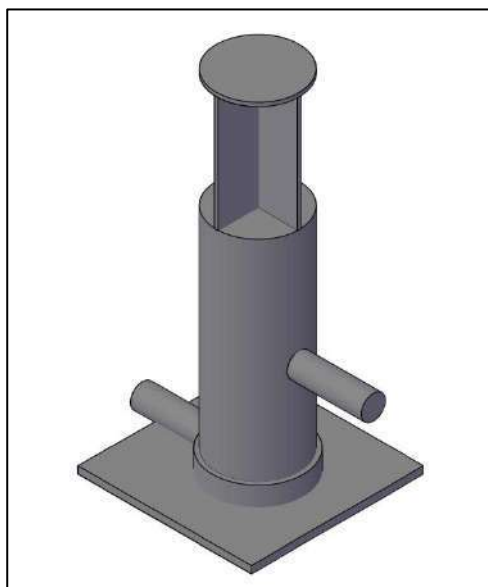


Figure 1. Photocatalyst in low-cost flow illustration. Artificially colored.

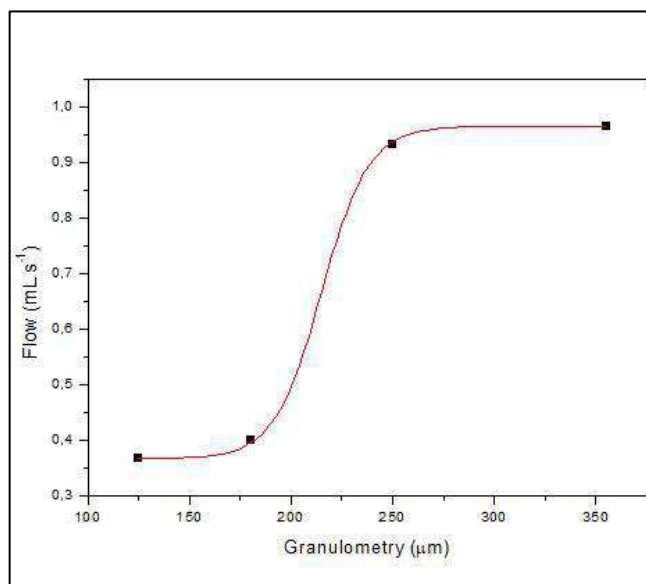


Figure 2. Relation between flow and sand granulometry.

Acknowledgments

The PIBIC/UFOPA and UFOPA

Área: MED

Nº de Inscrição: 01516

Novel scaffolds that bind to *Leishmania major* Pteridine reductase 1 identified by fragment screening

Suellen G. da Silva (PG),^{1*} Thamires Q. Froes (PG)², Catharina dos Santos Silva (PG)³, Marcelo Santos Castilho (PQ),^{1,2}

gssuellen@gmail.com; castilho@ufba.br

^{1,2}Faculdade de Farmácia da UFBA, Rua Barão de Jeremoabo, s/n, Ondina, 40170-115, Salvador, Brazil; ² Programa de Pós-Graduação em Biotecnologia da UEFS, Av. Transnordestina, s/n, Novo Horizonte, 44036-900, Feira de Santana, Brazil; ³Instituto de Ciências Biomédicas da USP, Av. Prof. Lineu Prestes, 1374, Butantã, 05508-900, São Paulo, Brazil.

Keywords: PTR1, Leishmaniasis, Thermo Shift Assays, Fragment screening.

Highlights

Novel scaffolds that bind to *Leishmania major* Pteridine reductase 1 identified by fragment screening: LmPTR1 hit-rate supports its high ligandability. The selected hits by TSA ($\Delta T_m > 4^\circ\text{C}$) have dissimilar scaffolds from the known inhibitors.

Resumo/Abstract

Leishmaniasis is a public health challenge in several parts of the world. However, the drugs available for the patients' treatment have several side-effects and low efficacy. Pteridine Reductase 1 (PTR1) has been pursued as a promising target for drug development. However, most inhibitors reported in the literature are substrate analogs (1-3) with low binding efficiency index (BEI= $(-\log\text{IC}_{50}/\text{MW}) \times 1000$) (Figure 1). Previous work from our lab identified a novel molecular scaffolded inhibitor (4) that binds to the cofactor binding site of *L. major* PTR1 (LmPTR1), however its BEI is far from the ideal value (ideal $\text{BEI} > 27$, for a compound with $\text{MW} = 330\text{Da}$).

In order to further explore the chemical space of putative LmPTR inhibitors, 600 fragments were screened using thermal shift assays (TSA). More than 70 compounds shifted the LmPTR melting temperature (ΔT_m) $> 1^\circ\text{C}$ (Figure 2). Principal Component Analysis, carried out in ChemGPS-NP server (<http://chemgps.bmc.uu.se/batchelor/queue/submit>), allowed the selection of 15 compounds that have high chemical diversity and do not overlap with known LmPTR1 inhibitors (Figure 3) for substrate and cofactor displacement studies and orthogonal assays, with Fluorescein isothiocyanate labeled LmPTR1.

Figure 2: Fragment screening by TSA. Median ΔT_m and quartiles are highlighted in red.

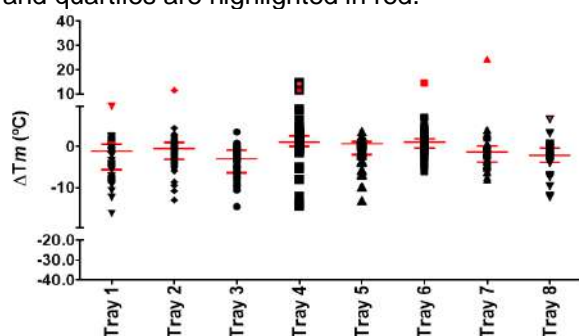


Figure 1: Known LmPTR1 inhibitors

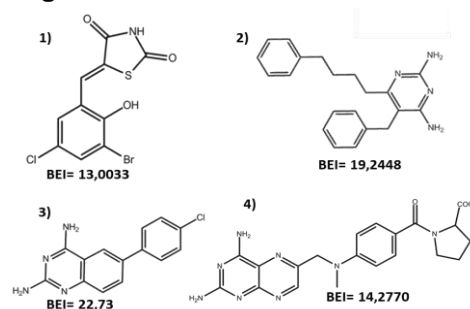
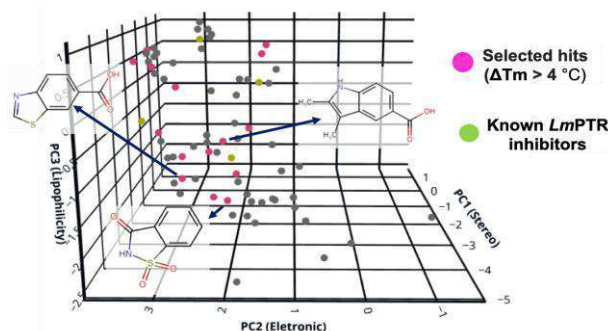


Figure 3: Chemical space covered by hits and known LmPTR1 inhibitors.



The fragment hit-rate (approx. 11%) achieved in this study suggests that LmPTR1 has high ligandability (see *J. Med. Chem.*, 2017, 60 (12), 4923–4931). Although this is not surprising, it is first time that LmPTR1 tractability as a target has been assessed. In conclusion, secondary assays, that are currently being performed, are required to pinpoint the most promising compounds for hit-to-lead optimization, that shall be guided by crystallography and enthalpy screening studies.

Agradecimentos/Acknowledgments

Ppgbiotec, CNPQ, FAPESB and Dr. Márcio Dias (ICB-USP) for providing access to the library of fragments (LBEA-USP).

Estratégia sintética para obtenção de redes metalorgânicas contendo neodímio e um ligante derivado carboxílico de oxima fenólica.

Raphael Capruni Andrade Vaz (PG),¹ Pedro Martins Santucci (IC), Wdeson Pereira Barros¹ (PQ).

raphaelcapruni@yahoo.com.br

¹Instituto de Química, Unicamp

Palavras Chave: Magnetismo molecular; Rede Metalorgânica; Lantanídeo.

Highlights

Synthetic strategy for obtaining Molecular Organic Frameworks containing neodymium(III) and a carboxylic phenolic oxime derivative as ligand. The synthesis of a Nd (III) compound from the 3-formyl-4-hydroxybenzoic acid oxime is presented. Since the ligand can act as a bridge between the lanthanide ions, is it possible to obtain a MOF.

Resumo

As redes metalorgânicas (MOFs – *Molecular Organic Frameworks*) são um conjunto de compostos cristalinos porosos que podem ser explorados para adsorção de gases, catálise, dispositivos emissores de luz, magnetismo molecular, dentre outras aplicações^{1,2}. Com o objetivo de se obter uma rede metalorgânica, a síntese de um composto contendo Nd(III) e a oxima do ácido 3-formil-4-hidrobencóico (**C1**) foi realizada em dimetilformamida em um reator solvotérmico a 80 °C durante 60 horas, seguida de um resfriamento de 10 °C por hora até atingir a temperatura ambiente. O composto obtido na reação foi caracterizado por espectroscopia vibracional na região do infravermelho (Figura 1a) e difração de raios X de policristais (Figura 1b), além da análise elementar de CHN que se encontra em andamento.

A partir da comparação dos espectros de absorção na região do infravermelho do ligante e do composto, observa-se o deslocamento do comprimento de onda 1683 cm⁻¹ para 1560 cm⁻¹ referente ao estiramento da ligação C=O, que sugere a coordenação do Nd(III) no ligante pelo grupo carboxilato, bem como o desaparecimento da banda em 3420 cm⁻¹ referente ao estiramento da ligação O-H, que indica a desprotonação da oxima podendo estar coordenada ao centro metálico. O desaparecimento banda em 948 cm⁻¹ referente ao estiramento da ligação N-O pode caracterizar uma coordenação forte do oxigênio no centro metálico, bem como o desaparecimento da banda em 1213 cm⁻¹ referente ao estiramento da ligação C-O de fenol que pode indicar a coordenação ao centro metálico pelo oxigênio fenólico.

A definição dos picos do difratograma do composto C1 corrobora com a existência de um material cristalino, e ao se comparar com os padrões de difração do ligante observa-se que são de compostos diferentes. Os cristais obtidos não foram apropriados para o experimento de difração de raios x de monocristal, e como perspectivas para este trabalho têm-se a realização estudos sistematizados de cristalização a partir de técnicas de evaporação lenta, difusão líquido-líquido, líquido-vapor, além do estudo de suas propriedades magnéticas e de adsorção de gases.

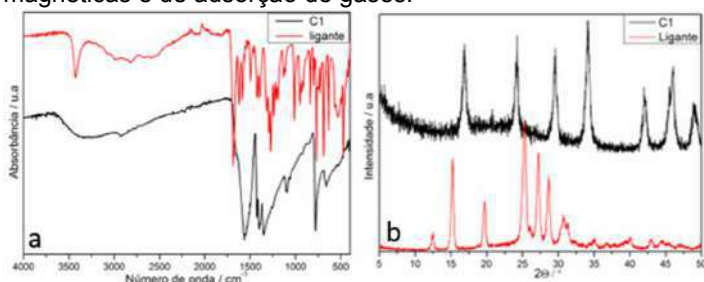


Figura 1: Espectro de absorção na região do infravermelho do composto C1 e do ligante (a) e difratogramas dos composto C1 e do ligante (b).

Referências:

- [1] R. Abdelhameed, M. et al. Designing near-infrared and visible light emitters by postsynthetic modification of Ln⁺³-IRMOF⁻³. *European Journal of Inorganic Chemistry*, n. 31, p. 5285-5295, **2014**. ISSN 1434-1948.
- [2] C. Benelli, D. Gatteschi, *Introduction to Molecular Magnetism: From Transition Metals to Lanthanides*, Wiley-VCH, Weinheim, **2015**.

Agradecimentos



Synthesis of benzo[*c*][2,6]naphthyridine-3,5-dione via cascade cyclization of enyneacrylamides towards carbamoyl radical

Bruce Alan Lobo Sacchelli (PG), Leandro Helgueira Andrade (PQ)*.

brucelobo@usp.br; *leandroh@iq.usp.br

Instituto de Química, Universidade de São Paulo, Av. Prof. Lineu Prestes 748, São Paulo-SP, 05508-000, Brasil;

Keywords: Benzo[*c*][2,6]naphthyridine-3,5-diones, Carbamoyl radical, Cascade Cyclization.

Highlights

New methodologies to construct valuable heterocycles is a very important tool in drug discovery. A new method to obtain benzo[*c*][2,6]naphthyridine-3,5-diones via cascade cyclization is described.

Abstract

The development of new atom- and step-economic reactions to construct valuable heterocyclic motifs is a very important field, especially in drug discovery.¹ Our research group reported the cyclization of *N*-methyl-*N*-acrylamides with carbamoyl radicals to yield oxindoles, key components for pyrroloindolines.² Herein, the main goal of this work is to employ carbamoyl radicals to produce benzo[*c*][2,6]naphthyridine-3,5-diones via cascade cyclization.

The retrosynthetic analysis for benzo[*c*][2,6]naphthyridine-3,5-diones revealed a key intermediate which could be a suitable substrate for reactions with carbamoyl radical, Figure 1.

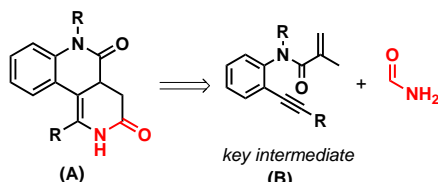


Figure 1. Retrosynthetic analysis for naphthyridine-3,5-diones.

Initially, we carried out the synthesis of our key intermediate **B**. A cross-coupling reaction of 2-iodoaniline with phenylacetylene gave the desired product. Then, after its acylation reaction with methacryloyl chloride followed by nitrogen methylation, the compound **1** was obtained in overall yield of 70%.

Having in hands the enyneacrylamide **1**, the next step was the evaluation of its reactivity towards carbamoyl radical generate by a Fenton process.²

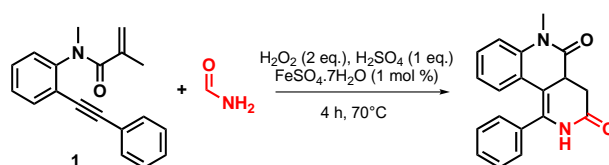


Figure 2. Carbamoylation reaction of compound **1**.

A mechanism proposal can be considered at this moment. Initially, iron catalyst can promote the formation of carbamoyl radical which can attack the substrate **1**, promoting a cascade cyclization reaction, involving Hydrogen Atom Transfer (HAT) and Single Electron Transfer (SET).

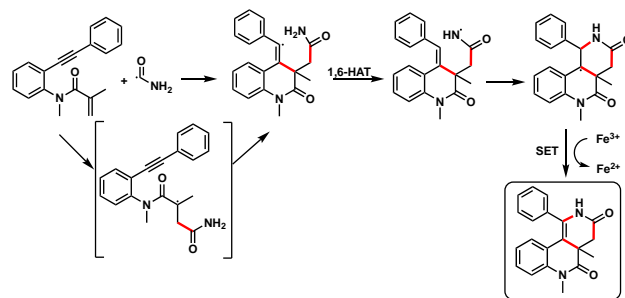


Figure 3. Possible mechanism. New bonds are in red.

In conclusion, we have observed a new method for the synthesis of benzo[*c*][2,6]naphthyridine-3,5-diones using carbamoyl radical.

[1] R. Dua, S. Shrivastava, S. K. Sonwane, S. K. Srivastava. *Adv. Biol. Res.* vol. 5, 3, p. 120-144, 2011.

[2] V. G. Correia, J. C. Abreu, C. A. E. Barata, L. H. Andrade. *Org. Lett.* vol. 19, 5, p. 1060-1063, 2017.

Acknowledgments

We thank CAPES, CNPQ and FAPESP for the financial support.

SYNTHESIS, CHARACTERIZATION AND *in vitro* ANTITUMORAL ACTIVITY OF TERNARY GALLIUM COMPLEX WITH ANTHRAQUINONE

Ívina P de Souza (PQ) (PQ),¹ Elene C. Pereira Maia (PQ).²

ivinapauladesouza@cefetmg.br; elene@qui.ufmg.br

¹Department of Chemistry, CEFET-MG; ²Department of Chemistry, UFMG

Keywords: (Metallo-antitumorals, Anthraquinone, Cytotoxicity, DNA interaction.).

Highlights

A fluorescent complex was synthesized and characterized by different techniques. The complex inhibits leukemia cells growth with the same IC₅₀ value of cisplatin.

Resumo/Abstract

One of the most important uses of metal compounds is in the treatment of cancer. In this work, one gallium complex, [Ga₂(phen)₂(L1)(NO₃)₂(H₂O)₂].4H₂O; in which phen = 1,10-phenanthroline and H₂L1 = 1,4-dihydroxyanthracene-9,10-dione, with anticancer potential was synthesized and characterized by elemental and conductivity analyses, FTIR, UV-Vis and fluorescence spectroscopies ($\lambda_{\text{excitation}} = 520 \text{ nm}$), ESI-MS and ¹H and ¹³C NMR. In the FTIR spectrum of complex the main absorptions are shifted in comparison to the free ligand spectra, evidencing the formation of a complex. In the UV-Vis spectrum, a bathochromic shift evidences the presence of the complex in solution. The complex is fluorescent, and the fluorescence intensity is affected by the nature of the solvent (Fig 1). The complex inhibits the growth of K562 cells with the IC₅₀ = 1.0 $\mu\text{mol L}^{-1}$ and interacts with DNA (Fig 2).

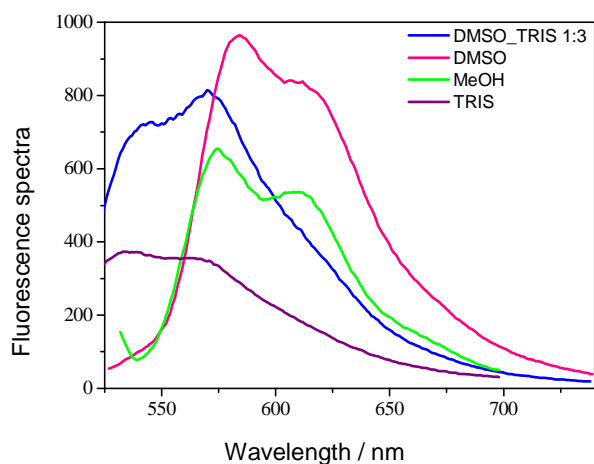


Fig 1: Fluorescence emission spectrum of the complex, at $6.0 \times 10^{-5} \text{ mol L}^{-1}$, in DMSO, $\lambda_{\text{excitation}} = 520 \text{ nm}$; MeOH, $\lambda_{\text{excitation}} = 520 \text{ nm}$; DMSO:TRIS 1:3, pH = 7.2, $\lambda_{\text{excitation}} = 490 \text{ nm}$; and TRIS, pH = 7.2, $\lambda_{\text{excitation}} = 470 \text{ nm}$.

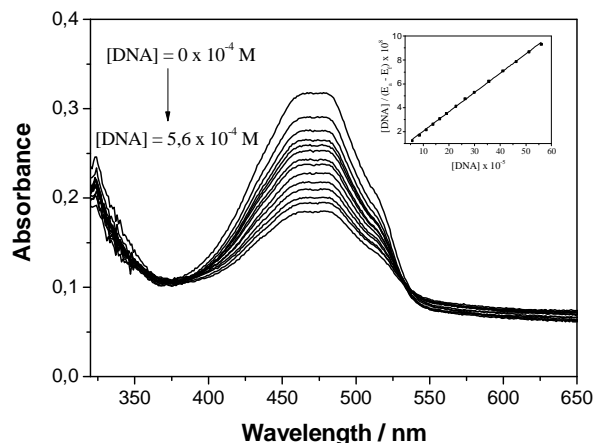


Fig 2: Spectra of solutions containing the complex ($1.0 \times 10^{-4} \text{ mol L}^{-1}$) and increasing concentrations of ct-DNA from 0 to $5.6 \times 10^{-4} \text{ mol L}^{-1}$ in TRIS-HCl buffer, pH 7.2, $l = 50 \text{ mmol L}^{-1}$ – insert $[\text{DNA}] / (\epsilon a - \epsilon f)$ versus $[\text{DNA}]$.

Agradecimentos/Acknowledgments

Acknowledgments: CAPES, CEFET MG, CNPq, FAPEMIG and INCT-Calálise

Influence of Convection in the Electro-oxidation of Sulfur Dioxide in Polycrystalline Gold Electrodes

Leonardo D. De Angelis¹ (IC), André H. B. Dourado¹ (PG), Hamilton Varela² (PQ), Susana I. Córdoba de Torresi^{1*} (PQ).

leonardo.deangelis@usp.br; storresi@iq.usp.br

¹Instituto de Química, Departamento de Química Fundamental, USP; ²Instituto de Química de São Carlos, USP;

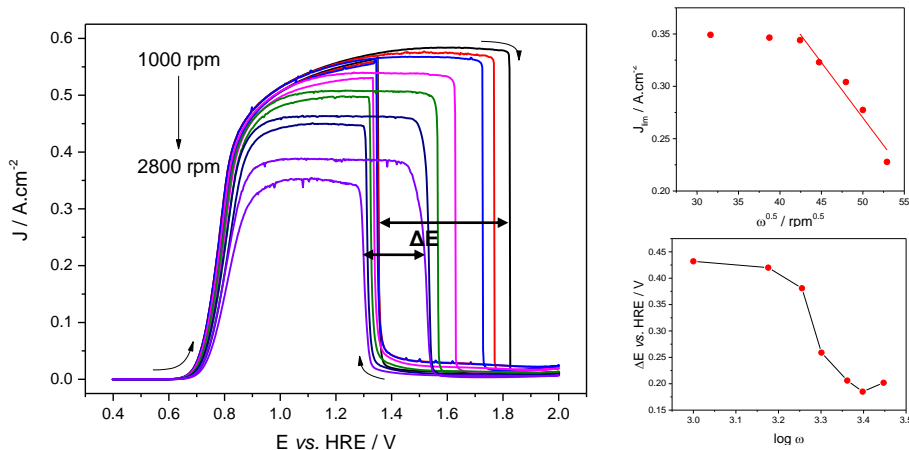
Key-words: SO₂ Oxidation, H₂ Generation, Bistability, Oscillatory Behavior, Mass Transport, Convection

Highlights

SO₂ oxidation current decreases due to forced convection regime
Bistability region controlled by mass transport

Abstract

SO₂ is an atmospheric pollutant, harmful to human health and to the environment. A possible mitigation of it is the SO₂ oxidation reaction (SO₂OR) to H₂SO₄, a process that produces H₂ as side product, a clean fuel of high energetic efficiency. Studies about SO₂OR on Au show that current and potential oscillations are observed, this non-linear phenomena are caused by the generation of two catalytic poisons that block the electrode surface, classifying the system as a Hidden Negative Differential Resistor (HNDR). Cyclic voltammetric experiments under forced convection technique, the rotator disk electrode (RDE), in acidic media, showed that the current density decreases with the rotation rate increase, indicating that the mass transport influences in the obstruction of the electroactive sites. The influence of the mass transport on the poisoning process also influence on the bistability region that presented a sigmoidal narrowing profile with the rotation rate increment.



Acknowledgments

FAPESP: #2015/26308-7
#2018/13944-0

Study of the oxidation of α,β -unsaturated aldehyde by oxone[®]

Ronielson S. de Oliveira (IC) and Irlon M. Ferreira (PQ)

irlon.ferreira@gmail.com

Grupo de Biocatálise e Síntese Orgânica Aplicada, Departamento de Ciências Exatas, Universidade Federal do Amapá, Rod. JK, KM 02, 68902-280, Macapá, Amapá, Brasil.

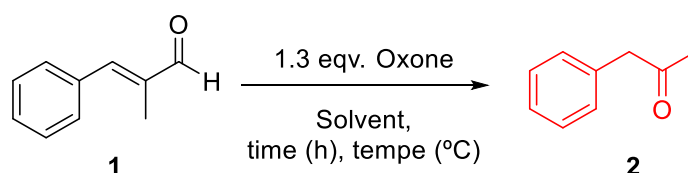
Keywords: oxidation; Baeyer-Villiger; (E)-2-methyl-3-phenylacrylaldehyde; oxone.

Highlights

Oxidation of (E)-2-methyl-3-phenylacrylaldehyde by oxone was investigated. The major product (81%) resulting from the oxidation was 1-phenylpropan-2-one, in THF at reflux for 24h.

Abstract

Unsaturated aldehydes are an important class of organic compounds and they are available by a variety of methods. Considered that their behavior under conditions of the type Baeyer-Villiger reaction deserves more detailed attention. This sense we tested the oxone sal as oxidant agent in this reaction. Initially the reaction was performed in a flask (25 mL) with 5 mmol (735 μ L) of aldehyde (1), 1.3 equiv of oxone and 15 mL of DMSO at 50 °C for 48 h and obtained ketone (2) in a trace yield (Table 1, entry 1). In an attempt to improve the obtained yield, we performed the same transformation using THF as solvent, in this case, the product of oxidation (2) was isolated in a yield of 40% (entry 2). Other solvents (H₂O and MeCN) were tested however showed low yield (entry 3 and 4). The best yield (81%) obtained for now was in presence of 5 mmol (735 μ L) of aldehyde (1), 1.3 equiv of oxone and 15 mL of THF at reflux for 24 h (entry 5). For all case, the reaction mixture was filtered off and washed with NaCl (saturated solution) and extracted with ethyl acetate (3 x 25 mL) and dried over Na₂SO₄. The solvent was evaporated in vacuum and the residue was purified on silica gel using a mixture of ethyl acetate:hexane (9:1) as eluent. The results are interesting and valuable for organic synthesis and might provide a better understanding of the oxidative properties of oxone in unsaturated aldehydes.



| Entry | Solvent | Temperature (°C) | Time (h) | Yield (%) |
|-------|------------------|------------------|----------|-----------|
| 1. | DMSO | 50°C | 48 | Traces |
| 2. | THF | 50°C | 48 | 40 |
| 3. | MeCN | 50°C | 48 | 9 |
| 4. | H ₂ O | 50°C | 24 | 5 |
| 5. | THF | reflux | 24 | 81 |

Acknowledgments

The authors would like to acknowledge Fundação de Amparo à pesquisa do Estado do Amapá (FAPEAP, grant no. 34568.515.22257.28052017) for their financial support and Group of Organic Synthesis and Molecular Modeling (Unifesp) in donate the oxone sal.

Área: AMB

(Inserir a sigla da seção científica para qual o resumo será submetido. Ex: ORG, BEA, CAT)

Nº de Inscrição: 01522

(Inserir o número de inscrição do autor que fez a submissão)

Interactions of benzene and toluene with other pollutants and influence of meteorological conditions in their concentrations

Dayana Yordy Sanchez (PG), Adalgiza Fornaro(PQ).

adalgiza.fornaro@gmail.com; dayana.yordy92@gmail.com

Departamento de Ciências Atmosféricas, IAG-USP

Palavras Chave: *benzene, toluene, air pollution, megacity, weather conditions.*

Highlights

Benzene and toluene are important pollutants due to direct negative effects in health and contributions to photochemical reactions, producing oxidants and ozone, being their main sources the fuel evaporation and burning by vehicles.

Resumo/Abstract

Monocyclic aromatic hydrocarbons (HCs), such as benzene and toluene, are among the volatile organic compounds (VOCs) of great interest for both atmospheric reactivity studies, due to their contribution to the formation of photochemical smog, and for direct harmful effects on human health. The evaporation and incomplete burning of fuels is the main source of benzene and toluene, as well as industrial activities and the use of solvents. The Metropolitan Region of São Paulo (RMSP) is one of the largest urban agglomerations in the world with 22 million inhabitants and more than 7 million vehicles. Air pollution, especially photochemical smog events with high concentrations of ozone, has been one of the major environmental problems for RMSP. Due to the importance of benzene and toluene, the Environmental Agency of São Paulo State (CETESB) began an hourly monitoring of these pollutants, among others, at Pinheiros Station. We evaluated the meteorological (temperature, relative humidity, rainfall and solar radiation) condition effects on the benzene and toluene temporal variability and their interactions with other pollutants (NO₂, O₃ and CO) measured at the Pinheiros Station, during 2017. The benzene and toluene average mixing ratios were 0.35 and 1.5 ppbv, respectively. The highest concentrations were observed during winter and early spring (July, August and September), due to the unfavorable conditions for dispersion of pollutants, with maximums of 2.8 and 14 ppbv for benzene and toluene, respectively. The maximum concentration values of benzene and toluene were obtained between 08 a.m. and 10 a.m. and after 8 p.m., due to the heaviest traffic, at that time, which increases fuel-burning emissions. The minimum values were obtained between 1 and 6 p.m., which was associated to the air mass dilution and transport caused by the mixture layer and/or the wind speed increase, as well as processes of removal by photochemical reactions. These compounds showed a significant positive correlation ($r > 0.8$) with CO, for samples from 6 a.m. to 9 a.m., reinforcing the influence of vehicular emissions. More detailed analyses for August 2017 showed the complexity of the meteorological conditions affecting the concentration of the studied compounds. For example, synoptic events such as the passage of cold fronts (FF) caused the decrease in the concentration of benzene and toluene, while benzene and toluene higher concentrations were associated with convective and stable layer conditions below 500 m.

Agradecimentos/Acknowledgments

CAPES-PROEX, Programa de Pós-Graduação em Meteorologia, IAG-USP e CETESB

The challenge of reactions with sterically hindered terpenes: metathesis of β -pinene with dimethyl maleate

Luciana Sarmiento Fernandes (PG),^{1,2*} Christian Bruneau (PQ),² Cédric Fischmeister (PQ),² Dalmo Mandelli (PQ),¹ Wagner A. Carvalho (PQ),¹ Eduardo N. dos Santos (PQ),³ Pierre H. Dixneuf (PQ),²
luciana.sarmiento@ufabc.edu.br

¹ Centro de Ciências Naturais e Humanas, Universidade Federal do ABC, Santo André, Brazil

² Université de Rennes 1, CNRS, ISCR (Institut des Sciences Chimiques de Rennes) - UMR6226, 35000 Rennes, France.

³ Departamento de Química – ICEX, Universidade Federal de Minas Gerais, Belo Horizonte, Brazil

Keywords: olefin metathesis, terpenes, beta-pinene, ruthenium

Highlights

Metathesis is an important reaction and it is not well explored with terpenes. We obtained good results using as substrates the hindered β -pinene and an electron-poor double bond, dimethyl maleate.

Abstract

The efficiency of olefin metathesis for the selective transformation of terpenes offers straightforward and green processes for the access to value-added products from bio-sourced substrates extracted from renewables. Cyclic terpenes are more sterically hindered than the acyclic ones, and the access to the reactive catalytic center might be difficult in some cases. In this work, the cross-metathesis reaction of β -pinene with dimethyl maleate (DM) was studied using homogeneous ruthenium catalysts of the 2nd generation of Grubbs and Hoveyda catalysts (Fig. 1), in order to evaluate the kinetics reaction (Fig. 2) as well the effect of variation of the experimental conditions which affect the conversion and yield of the reactions (Table 1).

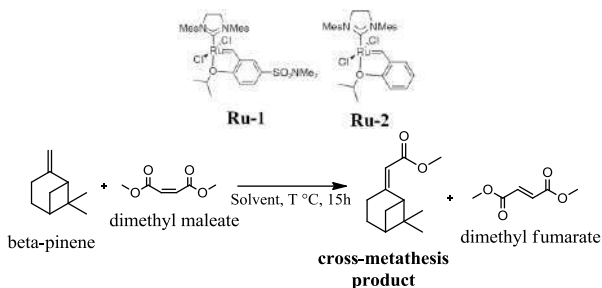


Fig. 1: Cross-metathesis reaction between β -pinene and DM

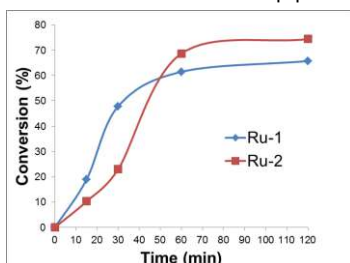


Fig. 2: Comparative analysis of β -pinene conversion.

It is possible to verify that both reactions reach equilibrium in the time of 60 min. Ru-1 catalyst is more active, but deactivates easily. With the Ru-1 catalyst the reaction

reaches a conversion of 48% in 30 min, against 23% using the Ru-2. However, the reaction with Ru-2 shows a slightly higher final conversion value (120 min, 74% against 66%), showing its highest robustness, supported by literature [2]. The effects of the variation of the experimental conditions were evaluated (table 1). It is verified that:

- Conversion increases from 51 to 61% when 4 eq. of DM were used (entries 1 and 2);
- The suitability of the substitution of toluene for the dimethyl carbonate (DMC, entry 4, conv. 67%), a solvent considered as ecologically appropriate [3];
- The increase or decrease in the substrate concentration

Table 1: Cross metathesis between β -pinene and dimethyl maleate^a

| Entry | DM (eq.) | Catalyst (mol%) | Temp. (°C) | Sub. Conc. [M] | Solvent | C/GC ^b /Y ^c |
|-------|----------|-----------------|------------|----------------|---------|-----------------------------------|
| 1 | 2 | 2.5 Ru-1 | 115 | 0.37 | Toluene | 51/49/n.d ^d |
| 2 | 4 | 2.5 Ru-1 | 115 | 0.37 | Toluene | 61/57/n.d |
| 3 | 2 | 2.5 Ru-1 | 115 | 0.74 | Toluene | 48/43/n.d |
| 4 | 4 | 2.5 Ru-1 | 100 | 0.37 | DMC | 67/66/n.d |
| 5 | 4 | 2.5 Ru-1 | 100 | 0.74 | DMC | 62/57/n.d |
| 6 | 4 | 2.5 Ru-1 | 100 | 0.07 | DMC | 69/48/n.d |
| 7 | 4 | 5 Ru-1 | 100 | 0.37 | DMC | 77/70/66 |
| 8 | 4 | 5 Ru-2 | 100 | 0.37 | DMC | 85/79/57 |

^a β -pinene (100 mg, 0.7 mmol, 1 eq.), DM 190 μ L, 1.4 mmol, 2 eq. or 380 μ L, 2.8 mmol, 4 eq.). Ru-1: 2.5 mol% (18 μ mol, 13.5 mg). Ru-2: 2.5 mol% (18 μ mol, 11.5 mg) or 5 mol% (36 μ mol, 23 mg). ^bGas chromatography yield (%). ^cIsolated yield (%). ^dn.d: not determined. Conversions and GC yields determined using hexadecane as internal standard (50 μ L).

does not change the conversion values (entries 5 and 6, 62% and 69% respectively);

-The increase in catalyst loading did not lead to complete conversion of the β -pinene (entries 7 and 8, 77% and 85%.

New experiments will be performed, also with other cross-metathesis substrates. The aim is try to achieve higher yields and also to study the correlate structure and activity.

References

- [1] Bruneau, C., Fischmeister, C., Mandelli, D., Carvalho, W. A., dos Santos, E. N., Dixneuf, P. H., Fernandes, L. S. *Catal. Sci. Technol.* 8, 3989–4004, 2018.
- [2] Miao, X., Fischmeister, C., Bruneau, C., Dixneuf, P. H. *ChemSusChem* 1, 813–816, 2008.
- [3] Grela, K., Harutyunyan, S., Michrowska, A. *Angew. Chem. Int. Ed.* 2002, 41, 4038–4040, 2002.

Acknowledgments

FAPESP (2015/26787-2), Capes/Cofecub (88887.144564/2017-00) e CNPq.

42^a Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química: Eixos Mobilizadores em Química

Área: AMB

(Inserir a sigla da seção científica para qual o resumo será submetido. Ex: ORG, BEA, CAT)

Nº de Inscrição: 01524

(Inserir o número de inscrição do autor que fez a submissão)

Ureasil–Polyether Hybrid for Anion Removal from Water.

Álvaro H. O. Marinho (IC), Gabriele P. Andrade (IC), Marina D. Araujo (IC), Natana A.M. Jesus (PG), Eduardo F. Molina (PQ)

alvarohenrique.ah554@gmail.com; eduardo.molina@unifran.edu.br

Universidade de Franca, UNIFRAN.

Palavras Chave: (Removal, Adsorption, Ureasil, Dyes).

Highlights

An ureasil membrane based on polyethylene oxide was investigated for dye removal.

The membrane mass affects the efficiency of dye extraction from aqueous solution.

Resumo/Abstract

The industrial demands in the control and treatment of water sources aiming at the removal of oils, organic solvents and dyes from water using low-cost and environmental friendly materials. In this sense, this work aim to use ureasil-polyether PEO hybrid as an effective and selective adsorbent for removal of anionic dyes from aqueous solution. The characteristics of the ureasil-PEO material are given according to the structure of the polymer (PEO 1900) generated during the synthesis in which can be modeluated to remove anionic species from water through specific binding groups. As results obtained by the kinetic experiments, the maximum adsorption capacity of the material was analyzed, comparing the efficiency of the polymer with the interaction of the two dyes used, which were methylene blue (cationic) and Orange II (anionic). The ureasil, presented selectivity for anionic species, in a mixture of cationic and anionic dyes. It is noted from the equilibrium assay that after 180 min of ureasil-PEO in contact with Oil dye solution, a removal of 55, 45 and 30 mg L⁻¹ of the initial concentration of the Oil dye (150 mg L⁻¹) was obtained using a mass of 150, 100 and 50 mg, respectively. Finally, swelling tests were performed to analyze the degree of swelling of the polymer sample, thus showing its hydrophilicity in which an efficient adsorptive capacity is present. In conclusion, the ureasil-PEO matrix is a great promise for the intelligent separation of dyes in aqueous media with potential applications in water treatment.

Agradecimentos/Acknowledgments

This study was financed in part by the Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior – Brasil (CAPES) – Finance Code 001.

São Paulo Reserach Fundation- FAPESP (grant 2018/07362-9 and 2013/20455-2)

Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (grant 306271/2017-6)

Área: MAT

(Inserir a sigla da seção científica para qual o resumo será submetido. Ex: ORG, BEA, CAT)

Nº de Inscrição: _____

(Inserir o número de inscrição do autor que fez a submissão)

Investigação das propriedades fotoluminescentes e estruturais dos fósforos $Ti_{1-x}Y_xO_2:Eu^{3+}$ preparados pelo método sol-gel

Luana da S. Oliveira (IC),¹ José C. da S. Filho (PG)², Acácio A. de Castro (PQ)², Helliomar P. Barbosa (PQ),¹ Jefferson L. Ferrari (PQ),^{1*}

luannaoliveira3007@gmail.com; jeffersonferrari@gmail.com

¹Desenvolvimento de Materiais Inorgânicos com Terras Raras (DeMITeR); Laboratório de Materiais Fotoluminescentes (LAMAF) – Instituto de Química, Universidade Federal de Uberlândia; Uberlândia-MG, Brasil

²Grupo de Propriedades Ópticas e Térmicas de Materiais (GPOTM), Instituto de Física, Universidade Federal de Uberlândia; Uberlândia-MG, Brasil

Palavras Chave: Fotoluminescência, Terras raras, TiO_2 , Sol-gel.

Highlights

Investigation of the photoluminescent and structural properties of the $Ti_{1-x}Y_xO_2:Eu^{3+}$ phosphors prepared by the sol-gel process. Effect the of Y^{3+} amount in the structural and photoluminescence properties of Eu^{3+} -doped TiO_2 host and yours potentiality applications in solar cells or biological markers.

Resumo/Abstract

Y_2O_3 matrices are widely used in ceramic, optical and laser materials [1]. It exhibits excellent heat resistance, corrosion resistance, low phonon energy and high photochemical stability. The TiO_2 matrix doped with rare earth ions (R^{3+}) exhibit excellent photocatalytic activity due to its special electronic structure. The incorporation of low amount of Y^{3+} in TiO_2 matrices increases the intensity of the photoluminescence of the Eu^{3+} ion presenting potential application of this material in solar cells [2]. In this sense, this work reports on the effect of Y^{3+} ions amounts on the photoluminescence properties of the Eu^{3+} -doped TiO_2 . The materials were prepared by the sol-gel process. The TiO_2 matrix doped with Eu^{3+} (3.0 mol%) was incorporated with Y^{3+} in the proportion of 10, 20, 30, 40 and 50 mol% in the nominal amount of Ti^{4+} . Subsequently, the samples were heat-treated at 700 °C during 4 hours in a static atmosphere. All the profile bands in the emission spectra are very similar (Fig. 1). Comparing with the earlier reports, it is concluded that Eu^{3+} ions are positioned in lattice site with non-centrosymmetric environment or on the surface of the particles. The emission lines at 578, 597, 613, 654 and 703 nm are assigned to the intraconfigurational 4f transitions of ${}^5D_0 \rightarrow {}^7F_J$ ($J: 0-4$) of Eu^{3+} ions. These results suggest that $Ti_{1-x}Y_xO_2:Eu^{3+}$ could act as a red emitting phosphor in solid state-lighting technology.

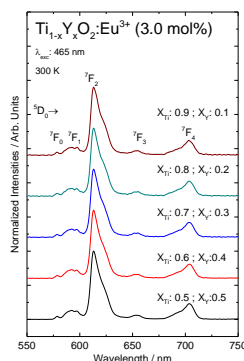


Fig. 1. Emission spectra of photoluminescent materials $Ti_{1-x}Y_xO_2:Eu^{3+}$ (3.0 mol%) heat-treated at 700 °C during 4 hours.

Agradecimentos/Acknowledgments

The authors would like to thank for CNPq, CAPES, FAU, REDE MINEIRA DE QUÍMICA and FAPEMIG.

1. Wu, J.; Xie, G.; Lin, J.; Lan, Z.; Huang, M.; Huang, Y. ;J. Power Sources 2010, 195, 6937.
2. Zhao, J.; Jia, C.; Duan, H.; Sun, Z.; Wang, X.; Xie, E. ;J. Alloys Compd. 2008, 455, 497.

Área: QPN

Nº de Inscrição: 01526

Bioprospecção de extratos de *Hyptis suaveolens* no estresse de plantas daninhas

Arielly Celestino Rodrigues dos Santos^{1*} (IC), Mariana de Souza Moura¹(IC), Miriane Celia Moura Sales¹(IC), Lucas Campos Curcino Vieira²(PQ), Olívia Moreira Sampaio¹ (PQ), Paulo Teixeira de Sousa Jr^{1*} (PQ).

ariellypaixao92@gmail.com

¹ Chemistry Department, Federal University of Mato Grosso, Cuiabá-MT, Brazil; ² Engineering Institute/Chemistry, Federal University of Mato Grosso, Várzea Grande-MT, Brazil.

Palavras Chave: Bioherbicida, Clorofila a, inibidores da fotossíntese, *hyptis suaveolens*

Highlights

Bioprospecting of *Hyptis suaveolens* extracts on weed stress.

Hexanic and ethanolic extracts of *H. suaveolens* were evaluated as photosynthesis inhibitors. Both showed activity, reducing PI_{abs}. Isolation of special metabolites was then initiated using HPLC-DAD.

Resumo/Abstract

A análise de extratos, frações e metabólitos isolados de plantas é visto como estratégia para o manejo de pragas na agricultura, até mesmo para o controle de plantas daninhas¹. Devido ao uso inadequado de herbicidas comerciais, o excesso de aplicações tem resultado na resistência de pragas, alta poluição ambiental, além de perigos para humanos e animais². A busca por herbicidas ecologicamente corretos (ampla faixa de ação, baixas concentrações, custos reduzidos), tem sido alvo de muitos trabalhos envolvendo aleloquímicos^{3,4,5,6}. Extratos, hexânico e etanólico, de *Hyptis suaveolens* L. (Lamiaceae), foram avaliados como inibidores da fotossíntese. O ensaio foi realizado através de medidas da fluorescência da clorofila a (*Chl a*) realizadas em discos foliares de espinafre⁷, e esses apresentaram uma inibição do fluxo de elétrons, o que causa um estresse nas plantas, tornando-os bioativos e possíveis bioherbicidas. Dentre os dois extratos avaliados, o hexânico se mostrou mais promissor em relação à atividade avaliada, reduzindo o parâmetro de identificação de estresse de planta (Índice de desempenho) PI_{abs} em 67,78 %, enquanto o etanólico inibiu 27,54%. O PI_{abs} mede com eficiência variações que a planta sente quando induzidas a estresse, neste caso pela presença de metabólitos especiais presentes no extrato⁸. Com essas informações, iniciou-se o isolamento de metabólitos especiais pelo extrato hexânico utilizando HPLC-DAD. Até o momento, 3 substâncias foram isoladas e encontram-se em fase de identificação estrutural.

Referências

- ¹ SILVA, R.M.G. *et al*, **Biosci J.** 2010
- ² DONKOR, A. *et al*, **Environ Sci Pollut Res.** 2016
- ³ ALVES, C.C.F. *et al*, **Floresta e Ambient.** 2003
- ⁴ MAULI, M.M. *et al*, **Semina: Ciências Agrárias.** 2009
- ⁵ TUR, C.M. *et al*, **Biotemas.** 2010
- ⁶ RODRIGUES, A.C. *et al*, **Rev Bras Plantas Med.** 2012
- ⁷ SAMPAIO, O. M. *et al*. **Pestic Biochem Physiol**, 2016
- ⁸ SAMPAIO, O. M. *et al*. **Molecules**, 2018.

Agradecimentos/Acknowledgments

FAPEMAT, CAPES e CNPq pelo suporte financeiro.

Sintering behavior of Y-doped ZrO₂ ceramics: the effect of the addition of Nb₂O₅ in monoclinic, orthorhombic and polymorphic phases.

Julio C. de Paiva (PG)¹, **Cátia Fredericci (PQ)**², **Luciano A. Bueno (PQ)**¹

julio.carvalho@ufabc.edu.br; catiaf@ipt.br; avallone.bueno@ufabc.edu.br

¹Centro de Engenharia e Ciências Sociais Aplicadas, UFABC; ²Centro de Tecnologia em Metalurgia e Materiais, IPT

Key words: Niobium Oxide, Zirconia, Ceramics, Polymorphism

Highlights

The current study has the goal to understand the effect of addition of different phases of Nb₂O₅ in order to comprehend chemical and physic properties of this ceramic material.

Resumo/Abstract

The effect of Nb₂O₅ addition as the source of +5 cation dopant in yttria-stabilized tetragonal zirconia polycrystals (Y-TZP) was examined. However, the existence of different phases in Nb₂O₅ can justify the discrepancy of result for previous studies. In order to understand the effect of different Nb₂O₅ phases, the ceramic material was sintered using monoclinic, orthorhombic and policlinic Nb₂O₅. The samples were made using 1%, 3%, 5%, 7%, and 10% w/w of each kind of Nb₂O₅. The samples were made using cylindrical format (approximately 0.5cm³) in uniaxial compression process and sintered until 1400C during 5 hours. Both powder and the sintered samples were analyzed by X-ray diffraction and scanning electron microscopy. The figure 01 shows the general synthesis method and the mechanism of analysis.

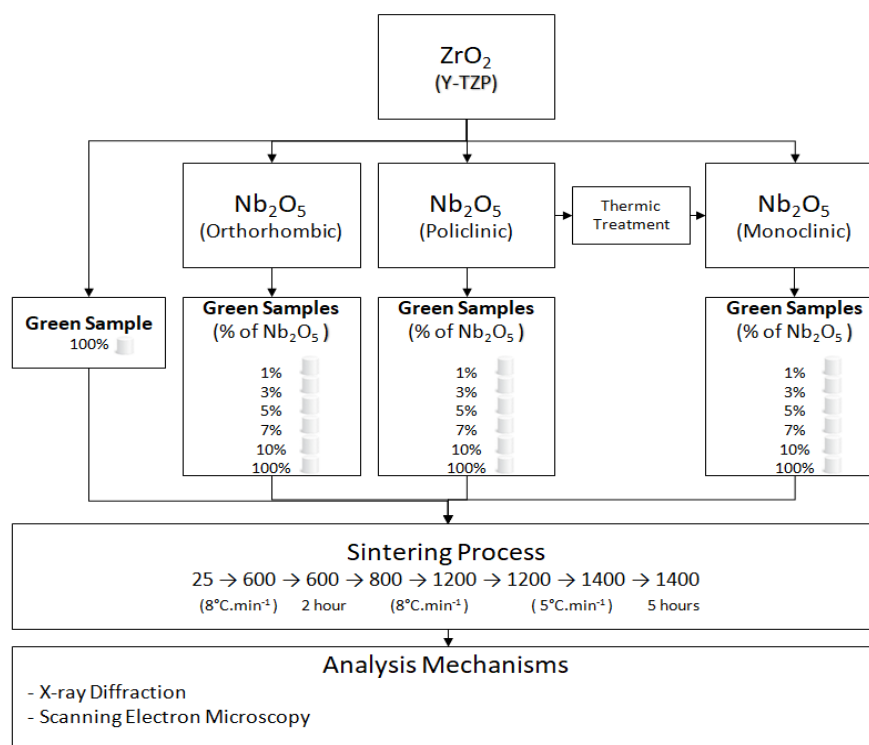


Figure 01: Flowchart that presents the synthesis method and the mechanisms of analysis.

References:

- PILAREK, B.; PELCZARSKA, A. J. SZEZYGIEL, I. Characterization of niobium(v) oxide received from different sources. J Therm Anal Calorim. DOI 10.1007/s10973-017-6300-x.
- Chevalier, j. What future for zirconia as a biomaterial? Biomaterials 27 (2006) 535–543.

Área: EDU

Nº de Inscrição: 01528

INOVAÇÃO: Utilização de materiais alternativos em práticas experimentais na formação de graduandos em Química.

Alisson de Lima Xavier (PG),¹Jonatas Mateus da Silva Rodrigues (PG),¹Priscila Farias de Oliveira (PG),¹Rita de Cássia S. Di Pace (PG),¹Diego Gomes de Souza (PG),¹Wellina N. Santana (PG),¹José Leonardo Ferreira (PG),¹Maria das Graças Negreiros de Medeiros (PQ).

**xdhamil13@gmail.com; jonatasdaniel007@gmail.com; priscilaf03@hotmail.com;
rita.pace@academico.ifpb.edu.br; diegogomees28@gmail.com; wellinasantana@gmail.com;
flaleo2012@gmail.com; mgnegreiros@gmail.com;**

¹Licenciatura em Química, IFPB;

Palavras Chave: (Experimentação, Materiais alternativos, Formação de professores, Reutilização, Prática profissional .

INNOVATION: Use of alternative materials in experimental practices in the training of graduates in Chemistry.

Keywords: (Experimentation, Alternative materials, Teacher training, Reuse, Professional practice.

The research was carried out through the methodologies experienced by 3 classes of the Degree in Chemistry, of the Federal Institute of Paraíba (IFPB), Campus - João Pessoa, in the discipline of Professional Practice II. It was proposed to the students that in their classes of Experimental Chemistry they would develop basic knowledge on the practical aspects in the use and reuse of alternative materials and reagents, with the objective of developing skills that will be frequent in their professional practice.

Resumo/Abstract

Para um ensino significativo da Química, deve existir uma relação entre os conteúdos e o mundo que nos cerca. A metodologia de ensino desenvolvida pelos docentes em sua grande maioria, torna a disciplina inacessível e de difícil compreensão. A experimentação é um método que deve ser e aplicado de forma que relacione os conteúdos teóricos ao dia a dia do aluno, sendo capaz de despertar o senso crítico e investigativo do educando. A formação do professor que utilizará a experimentação como ferramenta, proporciona ao mesmo a construção de uma inter-relação entre teoria e prática como facilitadora do processo ensino/aprendizagem. A pesquisa foi realizada através das metodologias vivenciadas por 3 turmas do Curso de Licenciatura em Química, do Instituto Federal da Paraíba (IFPB), Campus - João Pessoa, na disciplina de Prática Profissional II. Foi proposto aos graduandos, que em suas aulas de Química Experimental desenvolvessem conhecimentos básicos sobre os aspectos práticos na utilização e reutilização de materiais e reagentes alternativos, com o objetivo de desenvolver competências que serão frequentes em sua prática profissional. Os resultados foram significativos e mostraram que os graduandos produziram aulas em que os experimentos utilizando materiais alternativos, tornaram-se ferramentas metodológicas de favorecimento estabelecendo relações do ensino da Química com a prática cotidiana, motivando-nos a seguir a carreira docente.

Agradecimentos/Acknowledgments

Agradeço ao IFPB por todo incentivo à pesquisa, enquanto instituição. Assim como a professora Maria das Graças Negreiros de Medeiros pela atenção dada a pesquisa e todos os pesquisadores envolvidos.

Área: QPN

(Inserir a sigla da seção científica para qual o resumo será submetido. Ex: ORG, BEA, CAT)

Nº de Inscrição: 01529

(Inserir o número de inscrição do autor que fez a submissão)

Rapid characterization of triterpene saponins from *Zornia brasiliensis* by HPLC-ESI-MS/MS and NMR

Yuri M. Nascimento (PG),¹ Lucas S. Abreu (PG)¹, Ramon L. Lima (IC),¹ Vicente C. O. Costa (PQ),¹ José I. M. Melo (PQ),² Raimundo B. Filho (PQ),³ Marcelo S. Silva (PQ),¹ Josean Fechine Tavares (PQ)¹.

yurimanguera@lft.ufpb.br;

¹Graduate Program in Natural and Synthetic Bioactive Products, UFPB; ²Graduate Program in Ecology and Conservation, UEPB; Center of Sciences and Technologies, UENF.

Keywords: Triterpene saponins, Soyasaponins, *Zornia brasiliensis*, HPLC-DAD-ESI-MS/MS.

Highlights

- 35 metabolites were possible to identify or putatively from the aerial parts of *Zornia brasiliensis*.
- Two saponins were described for the first time.

Resumo/Abstract

Introduction: *Zornia brasiliensis* Vogel (Leguminosae) is a species popularly known in Brazil as “urinária”, “urinana” and “carrapicho” and is popularly used as a diuretic and in the treatment of venereal diseases.

Objective: To apply the hyphenated analytical techniques of liquid chromatography coupled with tandem mass spectrometry (LC-MS/MS) and ¹H and ¹³C nuclear magnetic resonance (NMR) for the identification of triterpene saponins in the aerial parts of *Z. brasiliensis*.

Methods: The aerial parts of *Z. brasiliensis* were collected in the municipality of Serra Branca (07° 29'46" S E 36° 44'36" W, altitude: 712 m) in the state of Paraíba, Brazil, in March 2016. The access registration in the National Management System of Genetic Patrimony and Associated Traditional Knowledge (SIGEN) was obtained under number ADD107E. The species was identified by botanist Dr. José Iranildo Miranda de Melo of the Paraíba State University (UEPB). An exsiccatae was deposited at Arruda Câmara Herbarium (ACAM), Campus I, UEPB, under code 1862. A specific methodology consisting of high-performance liquid chromatography coupled with diode array detection, ion trap mass spectrometry and TOF-MS (HPLC-DAD-ESI-MS/MS) was developed for the analysis of triterpene saponins. The transposition of the analytical parameters, applied on the preparative scale, resulted in the isolation of four saponins. The MS and MS/MS experiments were carried out by ionization in negative mode, and molecular mass and fragmentation data were used to support the structural characterization of the saponins.

Results: From the analysis of the NMR spectra of ¹H and ¹³C together with the MS and MS/MS data, four saponins were identified, two of which are reported as new natural products, named fechinósido and 21-acetoxi-fechinósido. Based on retention times, high-resolution mass determination, and fragmentation, 31 other oleanane-triterpene saponins were tentatively identified in *Z. brasiliensis*, 20 of which have not been previously reported in the literature.

Conclusion: The genus *Zornia* is a bioproducer of triterpene saponins. In addition, hyphenated techniques such as HPLC-DAD-ESI-MS/MS can be employed as a rapid and efficient method for the identification of saponins in *Z. brasiliensis*.

Agradecimentos/Acknowledgments

We thank the Graduate Program in Natural and Synthetic Bioactive Products for their support. This study was financed in part by the Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior - Brasil (CAPES) - Finance Code 001.

Enzymatic synthesis of unsaturated polymers based on panthenol for 3D printing applications

Daniel F. Minatelli (PG),*¹ Isabela L. A. Dourado (PG),¹ Luiz H. Catalani (PQ)¹

dfminatelli@usp.br; isabela.dourado@usp.br

¹Department of Fundamental Chemistry, IQ-USP.

Key-Words: Panthenol, 3D Printing, Unsaturated Polyesters, Biomaterials, Photocrosslinking

Highlights

Biopolyesters based on panthenol were synthesized by enzymatic catalysis. With photoinitiator, polymeric films were formed after UV exposure, proving their potential in 3D printing applications.

Abstract

Introduction Digital light processing (DLP), a high-resolution 3D printing technique, has stood out in the field of biomaterials since it allows the printing of scaffolds of complex and precise structures¹. However, novel resins are needed for this purpose². The base polymer must be biocompatible, biodegradable, photocurable, and it must have low molecular mass³. Here, we developed a photocurable system based on panthenol polyesters showing all these characteristics.

Results and Discussion Two types of unsaturated polyesters were made: with double bonds “endo” and “exo” relative to the backbone of the polymer. In the first case, Figure 1, copolymers were formed from polycondensation of panthenol (PA), saturated diesters (diethyl adipate, AD, or diethyl sebacate, SE) and unsaturated diesters (diethyl fumarate, FU, or glutaconate, GL).

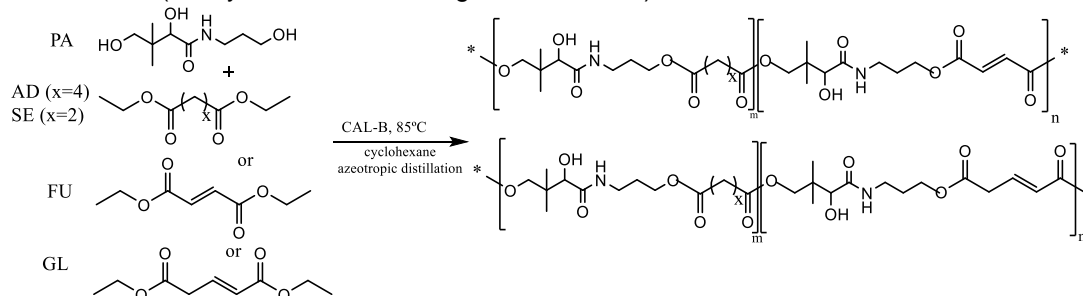


Figure 1: schematic representation of polycondensation reactions to make the “endo” unsaturated polyesters.

To provide “exo” double bonds to polymers, homopolymers were made by the reaction of panthenol and the previously saturated esters, producing the poly(panthenyl adipate), PPA, or poly(panthenyl sebacate), PPS, followed by acrylation insertion on the secondary, less reactive, hydroxyl group, as shown in Figure 2.

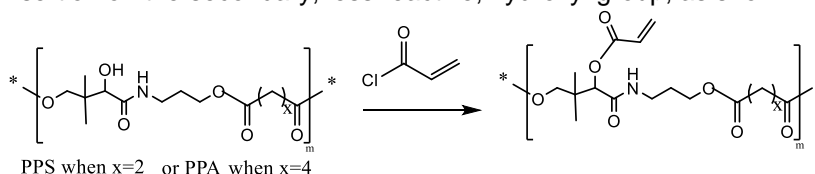


Figure 2: schematic representation of acrylation reaction to make the “exo” unsaturated polyesters.

Panthenol polyesters yielded unsaturated polymers with M_w values in the order of 2000-6000 Da. All structures were confirmed by ¹H NMR and ¹³C NMR. When mixed with photoinitiator and crosslinkers and submitted to UV exposure ($\lambda=254$ nm) over different periods, the polymers produced films with swelling range varied from 40 to 70% and the sol fraction varied from 40 to 60%. Photocrosslinking was confirmed by FT-IR.

¹ Mu, Q. *et al.*, *Addit. Manuf.*, 18, 74-83 (2017).

² Mondschein, R.J. *et al.*, *Biomaterials*, 140, 170-188 (2017).

³ Dean, D. *et al.*, *Virtual Phys. Prototyp.*, 7, 13-24 (2012).

Acknowledgments

To CAPES, FAPESP and University of São Paulo for funding this research.

Área: AMB Nº de Inscrição: 01532

Profile of volatile compounds from pyrolytic liquids of sea-almond fruits and licuri coconut shell

Pamella C. O. Oliveira (PG),^{1*} Gilberto A. Romeiro (PQ),^{1,2} Marcia C. C. Veloso (PQ).²

pamella_ortega@id.uff.br

¹Programa de Pós-Graduação em Química, Instituto de Química Orgânica, UFF; ²Departamento de Química Orgânica, UFF

Keywords: *Headspace, Pyrolytic liquid, Sea-almond fruit, Licuri coconut shell.*

Highlights

Slow pyrolysis of licuri coconut shell and sea-almond fruits.
Headspace-GC-MS analysis of volatile organic compounds (VOCs) from bio-oil and aqueous fractions.

Abstract

Pyrolysis is a thermochemical process that occurs in an inert atmosphere or under a low concentration of O₂. The most common feedstocks for this process include a series of agro-industrial and urban wastes, all these materials can be classified as lignocellulosic biomass residues. A lignocellulosic biomass has three main components: lignin, cellulose and hemicellulose. The licuri coconut shell is an agricultural residue while the sea-almond fruits are an urban residue. The slow pyrolysis of these feedstock produces: bio-char, non-condensable gas and condensable gas (bio-oil and aqueous fraction). The product's distribution of the process is showed in table 1.

Table 1. Slow pyrolysis yields

| | (%) | | | |
|------------|----------|--------------|-----------------------|--------|
| | Bio-char | Bio-oil (BO) | Aqueous fraction (AF) | Gas |
| Licuri | 36 ± 1 | 7 ± 6 | 33 ± 4 | 24 ± 5 |
| Sea-almond | 42 ± 6 | 9 ± 3 | 26 ± 1 | 24 ± 5 |

The VOCs represent one of the most notable applications of the pyrolytic liquids, as food flavoring. In this work the focus was to identify which substances were present in the volatile part of the bio-oil and aqueous fractions of sea-almond and licuri shell. For the analysis of headspace-GC-MS, 5 mL of BO and AF were disposed in vials, each sample was kept in 60°C for 30 minutes. The headspace analysis of the samples presented the following major chemical classes: furan derivatives, azo and sulfur compounds, aldehydes, ketones, organic acids (OA), esters and hydrocarbons (HC). All classes observed are illustrated in figure 1.

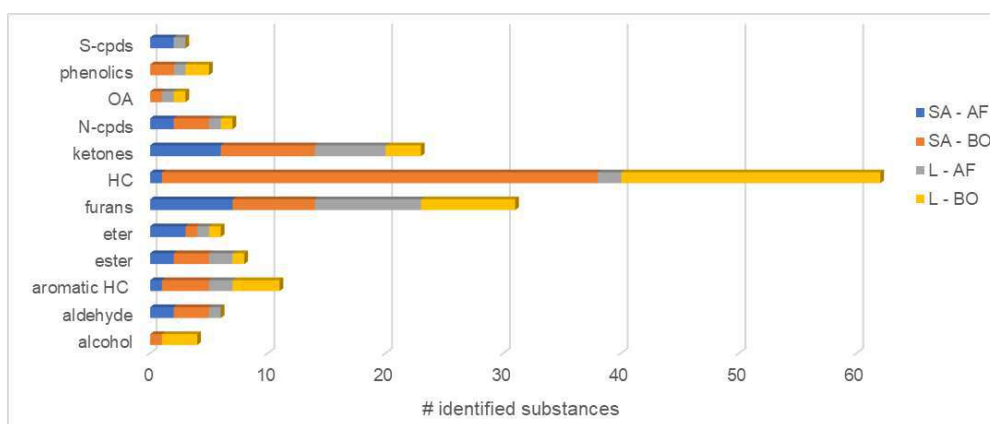


Figure 1. Chemical classes observed for sea-almond (SA) and licuri (L) samples.

Acknowledgments

Capes and PPGQ-UFF

Área: AMB Nº de Inscrição: 01533

Production of activated biochars from licuri coconut shell and their application as an adsorbent of isoniazid

Bruno S. Peixoto (PG)^{1*}, Larissa S. O. Mota (IC)², Márcia C. C. Veloso (PQ)³, Gilberto A. Romeiro (PQ)^{1, 3}, Marcela C. Moraes (PQ)^{1, 3}.

brunosalarini@id.uff.br

¹Programa de Pós-Graduação em Química, Instituto de Química, UFF; ²Faculdade de Farmácia, UFF; ³Departamento de Química Orgânica, Instituto de Química, UFF.

Keywords: Isoniazid, Adsorption, Activated carbon, Biochar, Licuri.

Highlights

Licuri biochar was obtained through slow pyrolysis.

Acid and basic activation improved the isoniazid adsorption.

KOH Activated Biochar adsorbed twice as much as the commercial activated carbon.

Abstract

The presence of bioactive substances in wastewater is a pressing issue because those are not eliminated by the traditional water and wastewater treatments and their longtime exposure can cause serious adverse effects such as endocrine disruption and pathogens resistance¹. Isoniazid (4-(hydrazinocarbonyl)pyridine) is the most common antibiotic used on the primary treatment of tuberculosis. It's mainly excreted by the urinary system in its unaltered form and its two major metabolites – acetylisoniazid and isonicotinic acid². Activated carbon is largely used to remediate the presence of bioactive substances in water and wastewater because of its efficiency and low-cost. The aim of this work is to use the licuri coconut shell to produce carbonaceous materials and study their use as an adsorbent for isoniazid. Licuri is a Brazilian native species and is one of the most abundant palm trees from the semiarid region and its coconuts are harvested by the communities of that region for multiple purposes including culinary and cosmetic. The coconut's shell was heated (400 °C) at a N₂ atmosphere (slow pyrolysis process) to produce biochar, bio-oil, and biogas, to promote the valorization of this agricultural waste. Two different activation processes were applied to the licuri biochar (**BC**) to increase its adsorption capacity and improve even more its intrinsic value. In the sulfuric acid activation, the biochar was mixed with H₂SO₄ (1:3 mass ratio) and heated to 200 °C for 1 h. The resulting biochar was washed continuously with ultrapure water using a Soxhlet apparatus until reaching neutrality, dried and denominated Acid Activated Biochar (**AAB**). Base Activated Biochar (**BAC**) was prepared by mixing the biochar with KOH using a mortar and pestle, then the mixture was placed in a closed stainless-steel cup and remained at a muffle furnace at 500 °C for 2 h. The mixture was washed with a 1 mol L⁻¹ HCl solution followed by ultrapure water until neutrality was reached. Batch adsorption experiments were done in triplicate using 10,0 mg of the adsorbent and 10 mL of isoniazid solution with the concentration ranging from 20 to 500 mg/L. Contact between the adsorbent and solution was promoted by a Dubnoff bath during 1h at 20 °C and 150 rpm. Afterward, the samples were filtered and analyzed at a UV-Vis Spectrophotometer at 262 nm. A Commercial Activated Carbon (**CAC**) was also studied by the same adsorption experiments and while its adsorption capacity was greater than both BC and **AAB**, the experiments of the **BAC** resulted in an adsorption capacity almost two times greater than that of **CAC**. The isoniazid adsorption results can be seen in figure 1. The Langmuir isotherm model fitted best to the isoniazid adsorption by the **CAC** while the three biochars adsorption fitted best on the Freundlich isotherm model.

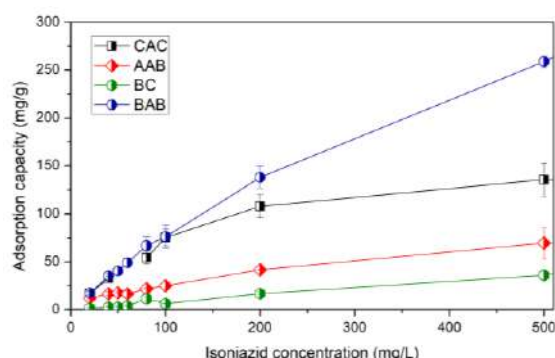


Figure 1: Isoniazid adsorption results.

References:

¹Rakić, V.; Rac, V.; Krmar, M.; Otman, O.; Auroux, A. *J. Hazard. Mater.* **2015**, *282*, 141.

²Arbex, M. A.; Varella, M. de C. L.; Siqueira, H. R. de; Mello, F. A. F. de *J. Bras. Pneumol.* **2010**, *36*, 626.

Acknowledgments

CAPES, CNPq and FAPERJ.

Impact of cellulose nanocrystals addition and different crosslinking processes on physical properties, biocompatibility and drug releasing performance of alginate/carboxymethyl cellulose blend.

Kláudia Neves Silva¹ (PG), Bruna da Costa² (PG), Lays Dourado² (PG), Rummenigge Silva² (PG), Armando Silva Cunha² (PQ), Gisele Goulart² (PQ), Paulo Faria¹ (PQ), Juan Campos Rubio¹ (PQ) and Priscila Silva-Caldeira^{3*} (PQ)

*priscila@cefetmg.br; kakaunevessilva@gmail.com

¹Department of Production Engineering and ² Faculty of Pharmacy, UFMG; ³Department of Chemistry, CEFET-MG

keywords: Alginate; Carboxymethyl Cellulose; Cellulose Nanocrystals, Biocompatibility, Drug Release.

Highlights

- No significant differences in physical properties and drug releasing profile were found between CNCs-reinforced hydrogel and covalently crosslinked hydrogel.
- All nanocomposite hydrogels are biocompatible and present appropriate features for drug delivery devices.

Abstract

In the present work, the effects of cellulose nanocrystals (CNCs) addition and three different crosslinking processes on physical properties, biocompatibility and drug releasing performance of six alginate (SA)/carboxymethyl cellulose (CMC) blends were investigated. All the prepared hydrogels were fully characterized by infrared spectroscopy, X-ray diffraction, thermal analyses and scanning electron microscopy (Fig. 1). X-ray analysis confirmed the maintenance of the CNCs crystallinity in the nanocomposite hydrogels. In general, the CNCs addition caused arrangement interlayers more compact, improving the thermal stability, swelling, degradation time, and drug releasing properties. The biocompatibility of all hydrogels was investigated by chick embryo chorioallantoic membrane (CAM) assays. We found that CNCs introduction confers to SA/CMC hydrogel similar physical properties and drug releasing behavior as those granted by a covalent crosslinking process. While the presence of CNCs in covalent reticulated blend did not result in significant changes in the physical properties and drug release profile. In addition, we have also shown that the hydrophobic surface modification on SA/CMC enhances the drug delivery pattern of the CNCs-reinforced and non-reinforced SA/CMC blends in the first 3 days. The kinetics drug delivery studies indicated that a combination of drug diffusion and polymer swelling takes place during the drug releasing process from the most hydrogels. Furthermore, the biological assays indicated that all nanocomposite samples are biocompatible according to CAM assay and histology analysis.

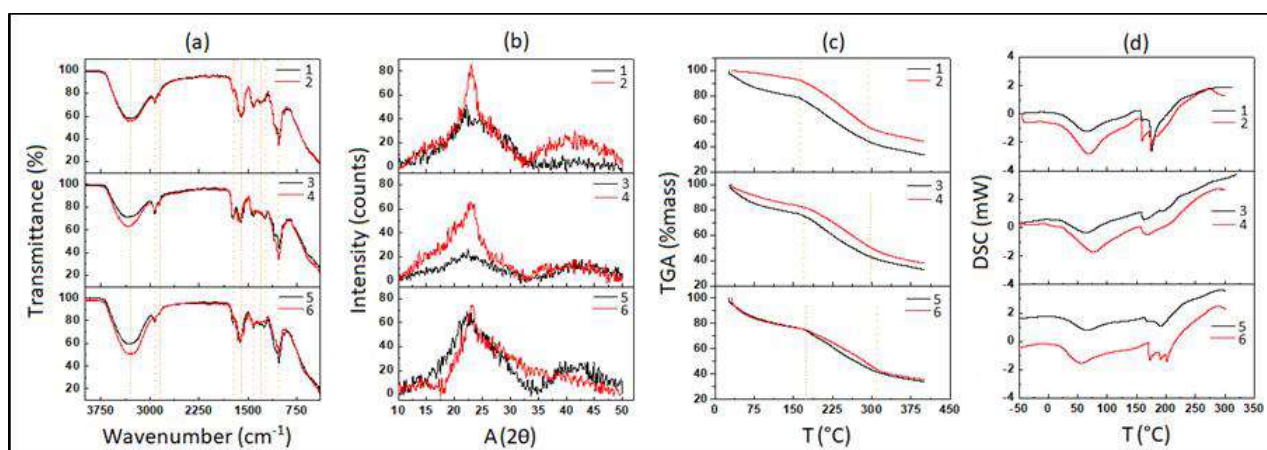


Fig. 1. FT-IR spectra (a); XRD pattern (b); TGA (c) and DSC thermograms (d) of the crosslinked hydrogels in the absence (in black) and presence (in red) of CNCs.

Acknowledgments

We acknowledge FAPEMIG, CNPq, CAPES, CDTN, and CEFET-MG for financial support and fellowships.

Área: CAT

Nº de Inscrição: 01535

Whole-Cell Biocatalysts approach for Enantioselective Oxidation by Ab ADH enzyme from Psychrotrophic *Arthrobacter* sp. 7749

Leidaiany P. Santos (PG),¹ Diego E. Sastre (PQ),² Edna Kagohara (TC),¹ Bruce A. Lobo (PG),¹ Marcos V. Navarro (PQ),² Leandro H. Andrade (PQ),¹ *

leidaianysantos@usp.br;

¹ Departamento de Química Fundamental, USP; ² Instituto de Física de São Carlos, USP

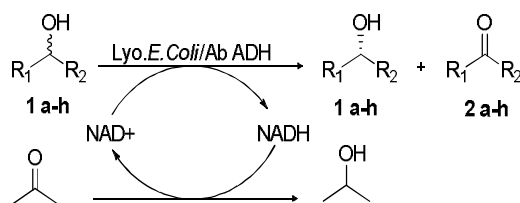
Keywords: (Enantioselective oxidation, Cold-adapted AbAdh, Whole-cell catalysis.).

Highlights

- ✓ Whole-cell can be used in enantioselective oxidations with biphasic system buffer- solvent;
- ✓ Racemic alcohols are resolved with higher ee% using this system;

Resumo/Abstract

Biocatalytic oxidations reactions performed by Alcohol dehydrogenase (*Adh*) enzymes constitute a useful tool to make selective oxidative reactions to obtain enantiomerically pure compounds, according to environmentally friendly methods. Particularly, cold-adapted enzymes have been studied because their high level of conformational flexibility and high specific activity at low temperatures^{1,2}.



1a, R₁=C₆H₅; **1b**, R₁=CH₃(C₆H₅-); **1c**, R₁=BrC₆H₅-; R₂=Me
1d, R₁=MeOC₆H₅-; **1e**, R₁=(C₆H₅)CH₂CH₂-; R₂= Me

1f, R₁=furanyl-; **1g**, R₁=thiophenyl-; **1h**, R₁=pyridinyl-; **1i**, R₁=CH₃(CH₂)₅-; R₂= Me

Scheme 1: Oxidation of alcohols catalyzed by Ab ADH in aqueous medium

In this study, we heterologously overexpressed an alcohol dehydrogenase enzyme (Ab Adh_7749) from psychrotrophic *Arthrobacter* sp. strain 7749 in *E. coli* BL21. Then, we performed studies about catalytic activity of this biocatalyst, a control oxidation reaction with their pure enzyme with rac-1b, which reached a V_{max} of 90.63 $\mu\text{mol}\cdot\text{L}^{-1}\cdot\text{min}^{-1}$, and K_{cat} of 302 min^{-1} , indicating high performance in alcohols oxidations. Thus, we employed a whole-cell approach which does not require neither NAD⁺/NADP addition nor protein purification (scheme 1). Consequently, eight racemic alcohols 1b-1i (aliphatic, with heterocycle ring and aryl secondary alcohols), also achieved desirable conversions (ee. 85- 99%). Interestingly, when higher amounts of lyophilized cells were used in the oxidative reactions, higher ee% were obtained, possibly due to more enzyme in the bacteria cell and NADPH oxidases. On the other hand, higher conversion rates were observed when the percentage of solvent used in the biphasic system: phosphate buffer-solvent (toluene, DMSO, tert-butyl methyl ether or glycerol) did not exceed of 80%v/v.

[1] LIU, J et al. *Curr Opin Chem Biol*, 2018, 43, 77-86

[2] PALMEIRA, D et al. *J. Mol Catal. B, Enzym.*, 110, 2014

Agradecimentos/Acknowledgments

CNPq, CAPES, FAPESP

Área: INO

Nº de Inscrição: 01537

Study of MIL-101(Cr) synthetic routes for posterior incorporation of metalloporphyrins and application in heterogeneous catalysis

Gabriela Bosa (IC),¹ Caroline Geovana da Silva (IC),¹ Shirley Nakagaki (PQ).^{1*}

gabriela.bosa@ufpr.br; caroline.geovana@ufpr.br; shirleyn@ufpr.br*

¹Departamento de Química, UFPR

Palavras Chave: Porphyrin, metal-organic framework, MIL-101(Cr), immobilization, heterogeneous catalysis.

Highlights

Confinement of metalloporphyrins in MIL-101 for heterogeneous catalysis. Synthetic routes for MIL-101(Cr).

Resumo/Abstract

A class of porous materials called metal-organic frameworks (MOFs) has attracted great attention of researchers recently, mostly because these compounds combine interesting characteristics such as crystallinity, high and permanent porosity, vast surface area and huge variety of compositions, which offer great potential for versatile applications. MOFs are extended frameworks self-assembled from the coordination of polydentate organic linkers to transition metal ions (or clusters).

The heterogeneous catalysis is a field of interest for the MOFs, mainly because of the large surface area and diversity (of functions and pore windows) that such materials can have, which may enable them with special selectivity and recyclability. Some MOFs are already used for catalytic purposes, either acting as the catalysts or serving as supports for the incorporation of catalytically active molecules. Considering this latter usage, the incorporation of the molecules can be done by immobilizing an already synthesized molecule, or by the ship-in-a-bottle method, used for big molecules that cannot pass through the pore.

MIL-101 solid ($[\text{Cr}_3\text{X}(\text{H}_2\text{O})_2\text{O}(\text{BDC})_3 \cdot \text{YH}_2\text{O}]$ where $\text{X}=\text{F}$, OH and $\text{BDC}=\text{benzene-1,4-dicarboxylate}$) is a metal-organic framework first reported by Férey and coworkers in 2005, which contains a high BET surface area of $4100 \text{ m}^2 \cdot \text{g}^{-1}$, large pores and windows, and high chemical and hydrothermal stability.¹ MIL-101 features allowed with its capability of being functionalized are good characteristics for its application in heterogeneous catalysis, serving as host for catalytically active structures, such as metalloporphyrins (MP). Synthetic MP have been described as excellent cytochrome P450 biomimetic catalysts to promote many selective and efficient oxidation reactions. Having these macrocycles attached into MIL-101's cages is a way to transform their homogeneous catalytic activity in a heterogeneous one, enabling them with recyclability.

This immobilization involving MIL-101 and MP for catalytic purposes has been reported by Tangestaninejad *et al.*², in which MP were incorporated in a modified MIL-101 with reduced surface area ($2800 \text{ m}^2 \cdot \text{g}^{-1}$), what resulted in an incomplete use of the material's catalytic ability.

Therefore, this work has the objective of studying the best route (or modifying route) for preparing MIL-101, aiming the achievement of an ideal MOF solid to perform the immobilization of MP for catalytic purposes, containing a big surface area ($S_{\text{BET}} > 3000 \text{ m}^2 \cdot \text{g}^{-1}$), pore volume and yield, a high thermal and chemical stability and ease of synthesis. The achievement of these characteristics are usually influenced by the procedure used to obtain the MIL-101, and that's why the study of its synthetic routes is necessary, since many variables (method, reagents, crystallization time and temperature, reaction stoichiometry, purification procedures, pH, additives, functionalization, etc.) can affect the final framework features and activity. The MOF solids were prepared using three modified methods, hydrothermal¹, mechanochemical³ and dry-gel conversion (DGC)⁴, different sources of metal ions, mineralizing agents, solvents, etc. The solids were characterized (XRD, chemical composition, textural and morphological properties, UVVIS and FTIR) in order to observe the influence of the different methodologies and conditions on the resulted MOF properties.

[1] G. Férey, C. Mellot-Draznieks, *et al.*, *Science*, 2005, 309, 2040–2042.

[2] F. Zadehahmadi, S. Tangestaninejad, *et al.*, *Appl. Catal., A*, 2014, 477, 34–41.

[3] Y. Sun, K. Leng, *et al.*, *Cryst. Growth Des.* 2016, 16, 1168–1171.

[4] W.S. Ahn, J. Kim, *et al.*, *Chem. Commun.*, 2013, 49, 7647–7649.

Agradecimentos/Acknowledgments



Área: ORG.

Nº de Inscrição: 01538.

Choline chloride/urea as a reaction medium for rapid synthesis of primary amines from ketones

João L. Z. Santos (IC),¹ Camila B. Francisco (TC),¹ Cleverton S. Fernandes (PG),¹ Ernani A. Basso (PQ).¹
 ra107114@uem.br; eabassouem@gmail.com.

¹Departamento de Química, UEM.

Palavras Chave: Síntese, Aminoação Redutiva, Solvente Eutético.

Highlights

The use of Choline chloride / urea as a reaction medium for reductive amination of ketones. Synthesis of primary amines, obtaining smaller reactional times and easy work-up.

Resumo

Introdução

As aminas são compostos de grande aplicação farmacológica e industrial, sendo uma classe de compostos amplamente encontradas na natureza. Hoje, a obtenção de aminas primárias a partir de cetonas pode ser realizada com emprego de enzimas alto custo ou catalisadores metálicos envolvendo um certo preparo. Estas metodologias vieram para substituir a de Borch *et al*¹ que envolve a reação do carbonílico com NH₄OAc na presença de NaBH₃CN em metanol por 48h. Algumas limitações da técnica estão no emprego de elevados volumes de solvente orgânico, alto tempo reacional e tedioso *work-up*. Uma alternativa aos solventes orgânicos empregadas na atualidade são os solventes eutéticos (SE), conhecidos por seu elevado poder de solubilidade, catálise, baixo custo e toxicidade.² Assim, o objetivo deste trabalho foi avaliar o efeito da aminoação redutiva de cetonas empregando-se o SE a base de cloreto de colina/ureia (ChCl-U).

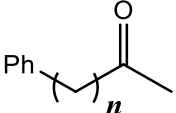
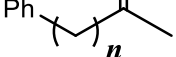
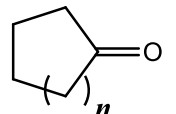
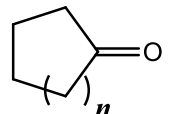
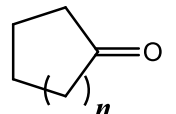
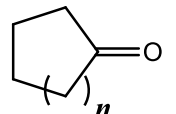
Metodologia

O SE foi preparado a 70°C aquecendo-se 1,00g de cloreto de colina e 1,01g de uréia até obtenção de mistura líquida homogênea. Então, 825mg de NH₄OAc e 70mg de NaBH₃CN foi adicionado para solubilizar por 5min. Por fim, 1mmol da cetona foi adicionado para reagir por 1h, mantendo-se a temperatura de preparação do SE. A mistura foi diluída em 5mL de HCl 1M e particionada com 2x15mL de DCM. A fase aquosa foi basificada com 10mL de NaOH 1M e a amina extraída com 3x15mL de DCM. A fase orgânica foi seca com Na₂SO₄ e rotaevaporada para obtenção da respectiva amina.

Resultados e Discussão

Os produtos das reações foram analisados por RMN de ¹H, estando os rendimentos obtidos apresentados na Tabela 1.

Tabela 1. Rendimentos obtidos na aminoação redutiva de cetonas no SE.

| Entrada | Cetona | | Rendimento |
|---------|--|------|------------|
| 1a |  | n= 0 | 54% |
| 1b |  | 1 | 47% |
| 2a |  | n= 1 | 21% |
| 2b |  | 2 | 29% |
| 2c |  | 3 | 48% |
| 2d |  | 4 | 47% |

A cetona **1a**, utilizada nos experimentos de otimização, foi obtida com o maior rendimento e similar à convencional de Borch (55%). O procedimento, porém, leva um tempo reacional muito menor (1h x 48h) com *work-up* facilitado pela troca por SE ao invés de metanol.

Analisando os dados de **1a-b**, é possível notar que a conjugação da carbonila com o anel aromático auxilia na obtenção da amina. Já ao comparar os dados das cetonas cíclicas **2a-d**, observa-se que os anéis de maior tensão (n=0,1) possuem a menor reatividade na condição utilizada, enquanto os anéis maiores (n=2,3) possuem reatividade similar à do sistema alifático (**1b**).

Conclusão

A metodologia desenvolvida apresentou resultado similar à convencional, sendo mais rápida e de simples *work-up*, sem uso de metanol. A carbonila aromática (**1a**) apresentou maior rendimento, seguido das com anéis de menor tensão (**1b** e **2c-d**).

Referências: ¹Borch et al. *J Am. Chem. Soc.*, **1971**, 2897. ²Zhang et al. *Chem. Soc. Rev.*, **2017**, 11493.

Agradecimentos

Os autores agradecem a CAPES, CNPq, Fundação Araucária, UEM-DQI e a comissão organizadora.

42ª Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química: Eixos Mobilizadores em Química

A Gold Nanoparticles and PEDOT-PLLA Composite

Gabrielle Cerqueira (PG),^{1*} Igor Rocha (PD),¹ Aruã C. da Silva (PG),¹ Susana I. C. de Torresi (PQ),¹

gabrielle.cerqueira.silva@usp.br

¹ Instituto de Química, USP.

Key words: PEDOT, Gold, Nanoparticles, Conductive Polymers.

Highlights

Oxidation of a conductive, biodegradable and nocyctotoxic macromonomer, EDOT-PLLA^{1,2} by the reduction of gold, with formation of gold nanoparticles. The composite could be applied in tissue regeneration.

Abstract

Conductive polymers are being highly studied for biomedical applications, because the possibility of electrical stimuli therapy. Gold nanoparticles are another great option of tissue regeneration with near-infrared radiation stimuli.³

The AuNPs/PEDOT-PLLA composite is formed by catalytic oxidation of EDOT-PLLA with Au³⁺ reduction, Fig. 1-A shows the resultant solution, and Fig. 1-B presents the UV-Vis spectrum of the reaction indicating the change of Au³⁺ band going to AuNPs, 540 nm.⁴

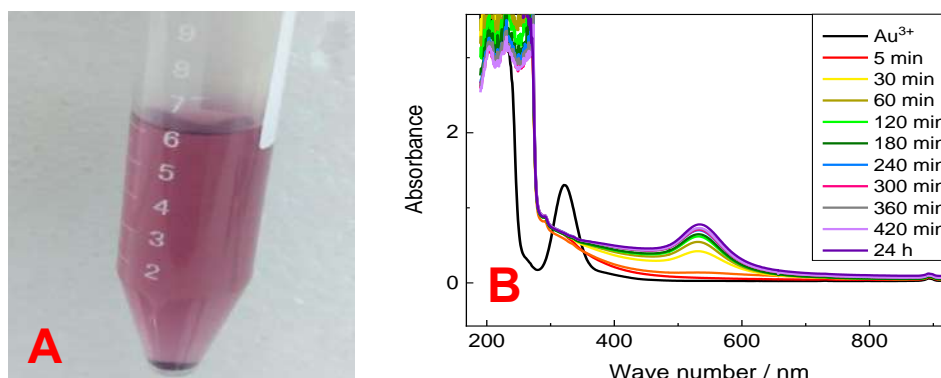


Figure 1 - a) AuNPs/PEDOT-PLLA composite b) UV- Vis absorbance spectrum of AuNPs/PEDOT-PLLA of composite formation.

The application of this composite in tissue regeneration is promising, because the possibility of electrical and NIR stimuli.

References:

1. Da Silva, A. C., *et al.*, *ACS Omega*, (2018). DOI:10.1021/acsomega.8b00510
2. Da Silva, A.C., *et al.*, *Mater. Sci. Eng. C*, (2018). DOI:10.1016/j.msec.2017.09.007
3. Marino, A., *et al.*, *ACS Nano*, (2017). DOI:10.1021/acsnano.6b08202
4. Rocha, I., *et al.*, *J. Phys. Chem. C*, (2014). DOI:dx.doi.org/10.1021/jp508326j

Acknowledgments

Acknowledgments to FAPESP, 2018/11162-5, and CNPq, 133326/2018-7, for financial support.

Área: QVE

Nº de Inscrição: **01540**

(Inserir o número de inscrição do autor que fez a submissão)

New methodology for the synthesis of Sirtuin 2 inhibitor analogues in *Trypanosoma cruzi* parasites.

Evelin Fornari (PG),^{1*} Renan A. Gomes (PG),¹ Hélio H. Stefani (PQ),¹ Gustavo H. G. Trossini (PQ),¹
evelin.fornari@usp.br

¹School of Pharmaceutical Sciences, University of São Paulo

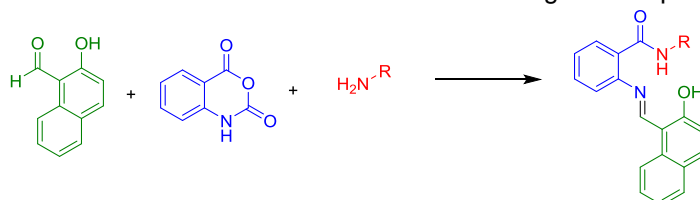
Keywords: Sirtuin 2, Inhibitor, Chaga's Disease, *Trypanosoma cruzi*, Synthesis

Highlights

New synthetic methodology with higher yield and green chemistry principles.

Abstract

Synthesis of a series of analogues of sirtinol, i.e. Sir2 inhibitor, as potential antichagasic candidates. The reaction to obtain sirtinol is performed in two stages¹ and in this new proposal it is performed one-pot, using green chemistry principles. The reaction to obtain sirtinol and its analogues is represented by the scheme 1:



Scheme 1. Multicomponent reaction to obtain analogues of sirtinol.

For this purpose, a Microwave Synthesis Reactor - Monowave 300 – Anton Paar was used. The synthesis on the bench was also performed to establish a comparison.

| # | Product | Amine | Yield Bench ^a | Yield Microwave ^b |
|----|---------|----------------------------|--------------------------|------------------------------|
| 1 | EFsi1 | 4-methoxyaniline | 51% | 64% |
| 2 | EFsi2 | 4-chloroaniline | ≤ 2% | 71% |
| 3 | EFsi3 | benzylamine | ≤ 2% | 48% |
| 4 | EFsi4 | propargylamine | 82% | 55% |
| 5 | EFsi5 | 2-methylpyridin-3-amine | ≤ 2% | 50% |
| 6 | EFsi6 | 1H-1,2,4-triazol-3-amine | ≤ 2% | 83% |
| 7 | EFsi7 | 2H-1,2,3-triazol-4-amine | 58% | 47% |
| 8 | EFsi9 | 4-iodoaniline | ≤ 2% | 66% |
| 9 | EFsi10 | cyclohexanamine | ≤ 2% | 53% |
| 10 | EFsi11 | 4-ethynylaniline | ≤ 2% | 52% |
| 11 | EFsi12 | pyridin-3-ylmethanamine | ≤ 2% | 74% |
| 12 | EFsi15 | thiazol-2-amine | ≤ 2% | 54% |
| 13 | EFsi16 | benzo[d]thiazol-2-amine | ≤ 2% | 49% |
| 14 | EFsi17 | 2-(trifluoromethyl)aniline | ≤ 2% | 66% |
| 15 | EFsi18 | aniline | ≤ 2% | 52% |
| 16 | EFsi19 | 4-methylpyridin-2-amine | ≤ 2% | 49% |

Reaction conditions: they were performed using EtOH as solvent ^aConventional stirring at room temperature for 960 minutes. ^bMicrowave, 40 minutes at 80 °C.

Acknowledgments

CNPq; FAPESP

¹ Mai, A. et al. *J. Med. Chem.* **2005**, *48*, 7789.

Study of interaction between liposomes and porphyrins functionalized with *L,L*-diphenylalanine for photodynamic therapy

Sandra Valeria Vassiliades (PG)¹, Vinicius A. Braz (IC)¹, Juliana C. Araújo-Chaves (PQ)¹, Andréa M. Aguilair (PQ)², Iseli L. Nantes-Cardoso (PQ)¹, Francesca Giuntini (PQ)³, Wendel A. Alves (PQ)¹

s.valeria@ufabc.edu.br; wendel.alves@ufabc.edu.br

¹Centro de Ciências Naturais e Humanas, Universidade Federal do ABC, 09210-580, Santo André, SP, Brazil; ²Instituto de Ciências Ambientais, Químicas e Farmacêuticas, Universidade Federal de São Paulo, 09972270, Diadema, SP, Brazil; ³School of Pharmacy and Biomolecular Sciences, Liverpool John Moores University, Byrom Street, Liverpool, L3 3AF, UK.

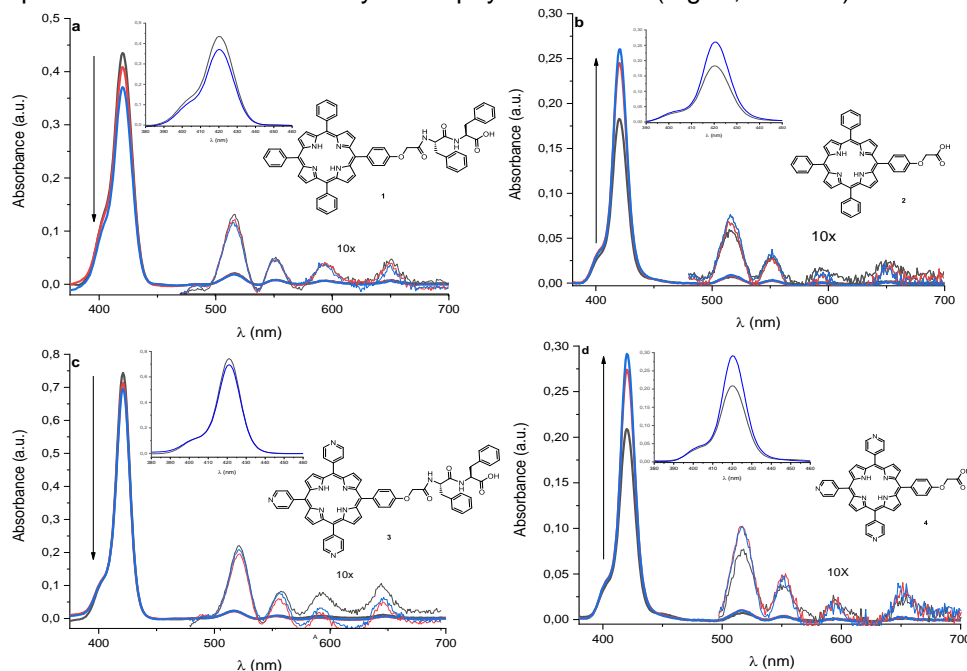
Keywords: Photodynamic therapy, porphyrin, photosensitizer, dipeptide, liposome.

Highlights

Porphyrins are an interesting class of dyes to be used in photodynamic therapy since they can have their properties modulated by functionalization. Notably, the asymmetric appending of peptides may improve the interaction with liposomes for studies in cells.

Abstract

Photodynamic therapy (PDT) is a less invasive chemical approach for the treatment of some cancer types. PDT triggers elective cell death by intense oxidative stress promoted by the generation of reactive species by a photosensitizer (PS) electronically excited by light. Porphyrins are widely used as PS due to its biocompatibility and localized cytotoxicity.¹ In the present study, 5,10,15-tris(phenyl)-20-(4-hydroxyacetylphenyl)porphyrin and 5,10,15-tris(pyridyl)-20-(4-hydroxyacetylphenyl)porphyrin (**2** and **4**, respectively) were monofunctionalized with *L,L*-diphenylalanine (**1** and **3**, respectively). The effect of monofunctionalization on the association of the porphyrins with lipid bilayers was investigated by using liposomes of DOPC (1,2-Dioleoyl-*sn*-glycero-3-phosphocholine). The compounds were synthesized according to literature.² The liposomes were prepared at the concentration of 25 mM DOPC and 100 mM porphyrins using extrusion method with 200 μ m pore membrane and the samples analyzed by electronic absorption spectroscopy.¹ The DOPC/porphyrins were titrated with DOPC liposomes containing 30% PE to facilitate vesicle fusion and dispersion of the PS in the bilayer. Porphyrins **2** and **4** (Fig. 1, a and c) exhibited increasing of Soret band



intensity by increasing lipid/porphyrin ratio that is suggestive of disaggregation. The lipid titration promoted a discrete decrease of **1** Soret band intensity and practically unaffected the **3** spectrum. The results suggest that the monofunctionalization favors the disaggregated state of the porphyrins in lipid bilayers. The disaggregated state of porphyrins is expected to increase the yield singlet oxygen production that will be investigated.

Figure 1: Absorption spectra of PS/liposome titrated with DOPC/PE (0%; 20%; 30%). Top panel Soret band compare of 0% and 30%; below panel Q band increased 10 times; porphyrin structure of **1-4** (panel a-d respectively).

(1) Kawai, C.; Araújo-Chaves, J. C.; Magrini, T.; Sanches, C. O. C. C.; Pinto, S. M. S.; Martinho, H.; Daghanli, N.; Nantes, I. L. *Photochem. Photobiol.* **2014**, *90* (3), 596–608. (2) Lindsey, J. S.; Schreiman, I. C.; Hsu, H. C.; Kearney, P. C.; Marguerettaz, A. M. *J. Org. Chem.* **1987**, *52* (5), 827–836.

***Bidens segetum* Mart. Ex. Colla: estudo do extrato etanólico de folhas frescas liofilizadas por HPLC-DAD e LC/ESI-MS/MS**

Simone Dias Franco* (PG)¹, **Jaqueline Pereira Soares Campos** (PG)², **Marcelo J. Pena Ferreira** (PQ)³, **Fabiana Henriques Machado de Melo** (PQ)², **Luce Maria Brandão Torres** (PQ).¹

Imb@uol.com.br; si.simonefranco@gmail.com

¹Núcleo de Fisiologia e Bioquímica, IBt-SP; ²Núcleo de Ciências Fisiológicas, FCMSCSP; ³Departamento de Botânica, IB-USP.

Palavras-Chave: *Bidens segetum*, Asteraceae, Ácidos Clorogênicos, Poliacetilenos.

Highlights

Ethanol extract of lyophilized fresh leaves from *Bidens segetum* were analyzed by LC-DAD-ESI⁺-MS-MS. Two constituents were identified, a polyacetylene (**1**) and one phenolic compound (**2**). Extracts from dried (LS) and lyophilized (LL) leaves were compared. Polyacetylenes were predominant components in LL while phenolic compounds in LS.

Resumo/Abstract

Bidens segetum Mart. ex Colla é uma herbácea que ocorre no Cerrado de alguns estados do Brasil. As espécies de *Bidens* sintetizam metabolitos, destacando-se os poliacetilenos (34%) e fenólicos com 9%. Em estudos anteriores identificou-se por GC-MS, no extrato aquoso das folhas de *B. segetum*, alguns metabolitos das classes citadas, como os ácidos clorogênicos (CGAs), mas não os poliacetilenos¹. Estudos com 1,345 Kg de folhas frescas (coleções de plantas - Núcleo de Fisiologia e Bioquímica – IBt/SP, 03/2017, Moraes 46, Herbário do IBt, SP), selecionadas, liofilizadas (485,0 g) foram submetidas à extração a frio com etanol (93%) obtendo-se o extrato etanólico (EEBs, 25,42%). Partições sucessivas forneceram a fase em n-hexano, acetato de etila (LFL-Acet) e aquosa, que foram avaliadas com ensaios para detecção das atividades antifúngica e antioxidante. A fração LFL-Act, ativa nos dois ensaios, foi fracionada em camada preparativa (CCP, em sílica gel) obtendo-se dez subfrações (P1-P10). A fração P4 com atividade antifúngica frente aos fungos *Cladosporium cladosporioides* e *C. sphaerospermum* foi analisada (HPLC-DAD e LC-ESI⁺-MS/MS, ¹H e ¹³C RMN uni e bidimensionais) e os dados obtidos permitiram propor a estrutura do poliacetileno **1** com m/z = 567 Da (Fig.1A) tempo de retenção (Tr) de 22.6min e **2** (Tr = 22.9 min. m/z = 338 Da (C₁₈H₂₆O₆, Kuma & Sinha 2003, Fig. 1B). Outros compostos estão presentes em PP4 e foram purificados por HPLC em escala semi-preparativa (PP4.1-PP4.4) e estão em fase de identificação. O EEBs, uma mistura complexa, rica em poliacetilenos e de difícil trabalho de isolamento e purificação nos motivou a fazer um teste comparativo com o extrato em acetato de etila, onde predominam os compostos ativos. Utilizando 155g de folhas frescas (coleta: 5/07/2018) que foram separados em partes iguais, uma liofilizada (FL) e a outra seca em estufa (60° C; FS) e imersas em acetato de etila. Os perfis cromatográficos dos dois extratos obtidos FL-Act (Fig. 1C) e FS-Act (Fig. 1D) por HPLC-DAD foram diferentes e os resultados indicam que os poliacetilenos, compostos menos polares e com atividade antifúngica predominam em FL-Act, enquanto os compostos fenólicos antioxidante em FS-Act.



Fig. 1- Analyses by LC-/ESI⁺-MS/MS: A. **1** e B. **2**; Analyses by HPLC-DAD: C. FL-Act e D. FS-Act.

1. Moreira, F.A.F.; Centeno, D.C.; Torres, L.M.B. *Bidens segetum* Mart. ex Colla: composição química do extrato aquoso de folhas e frações ativas por CG/EM. 33^a RASBQ. Livro de Resumo, 2010.

Agradecimentos/Acknowledgments

CNPQ, FAPESP, IBt-SP.

Área: QPN

(Inserir a sigla da seção científica para qual o resumo será submetido. Ex: ORG, BEA, CAT)

Nº de Inscrição: 01543

(Inserir o número de inscrição do autor que fez a submissão)

Identification of biomarkers in *Glycine max* in resistance mechanisms against herbivory

Maria Clara S. Aguiar (PG),¹ Renato L. Carneiro (PQ),¹ Marcelo M. Freitas (PG),² Carlos A. de Freitas (PG),² Arlindo L. Boiça Junior (PQ),² João B Fernandes (PQ),¹ Maria Fatima G.F. da Silva (PQ),¹ Moacir R Forim (PQ).¹

clarasantanaaguiar@gmail.com; renato.lajarim@ufscar.br; freitasmm@hotmail.com;
carloscaf77@gmail.com; aboicajr@fcav.unesp.br; djbf@ufscar.br; dmfs@ufscar.br; mrforim@ufscar.br.

¹Departamento de Química, UFSCar-campus São Carlos; ²Departamento de Entomologia UNESP/FCAV-campus Jaboticabal

Palavras Chave: Defense Response, *Spodoptera cosmioides*, Metabolomic Analysis, Soybean Leaves.

Highlights

In this work we analyzed the chemical difference between two genotypes from *Glycine max*, one resistant and other susceptible to insect *Spodoptera cosmioides*. The herbivory affected differently the qualitative and quantitative chemical profile in the evaluated genotypes. This study was carried out by chromatographic and spectrometric techniques (UPLC-HRMS).

Abstract

As a result of different biotic (insects, microorganisms, e.g.), and abiotic (temperature, humidity, e.g.) factors, the plants have developed a variety of defense strategies to readapt themselves to the environment. These strategies are often associated with alterations in their proteomic, and metabolomic profile. Among them, the expression of metabolites that act as defense compounds, it is the most common. Therefore, the metabolome profile analysis of a plant cultivated under adverse conditions may indicate the metabolites (or biomarkers) associated to the resistance.^{1,2} These data are interesting because they provide, e.g., biochemical details of plant-insect interaction that can be used in the search for alternative compounds for pest control.³ In this context, in the present study, genotypes of reference soybean plants (*Glycine max*) that were previously identified as resistant (showing constitutive resistance: intrinsic defense mechanism), or susceptible, but subjected to resistance assays (induced resistance), they were selected in order to compare their metabolic modifications to define the possible associated compounds to the soybean resistance.

Therefore, we developed an approach based on ultra-high performance liquid chromatography-quadrupole time-of-flight mass spectrometry (UHPLC-qTOF-MS) for the analysis of non-volatile secondary metabolites. We applied the UHPLC-qTOF-MS (Waters Xevo G2-XS QToF-MS system coupled to a Acquity-UPLC) technique to identify the main compounds related to the expression of constitutive and induced resistance of soybean genotypes submitted to herbivory by *Spodoptera cosmioides*. To obtain the extracts from the soybean leaves, the solid-liquid extraction technique was optimized using 2⁵⁻¹ fractional factorial design, which resulted in five independent variables. The response (dependent variable) were the number of compounds isolated in the extracts, and the area of chromatograms. The independent variables were: ionic strength, extraction mixture, temperature, time and number of extractions. Among them, only the composition of the extraction mixture and time showed a greater influence on the process. Through multivariate analysis (Principal Component Analysis and Partial Least Squares Discriminant Analysis) it was possible to verify that eight metabolites presented the greatest differentiation between the groups, some of them being isoflavones as daidzein, genistein and others glycosylated flavonoids. Moreover, we also evaluated quantitative difference to the main metabolites related to the resistance. Chemical profiles were also compared according to entomological results. As a summary, these data suggest that the action of herbivores could induce secondary metabolite expression in soybean leaves. In addition, these analyses may contribute to a molecular-level understanding of the resistance mechanisms developed by soybeans.

¹Sun, C. X. *et al. Plant Biology*, 18, 120, 2016.

²Sarkate, A. *et al. Scientific reports*, 8, 17844, 2018.

³Sato, D. *et al. Journal of Chromatography B*, 925, 95, 2013.

Acknowledgments

FAPEPS (2018/00340-0); CNPq (429404/2018-2; 403302/2013-7), CAPES, FINEP

Área: ELE

(Inserir a sigla da seção científica para qual o resumo será submetido. Ex: ORG, BEA, CAT)

Nº de Inscrição: 1544

(Inserir o número de inscrição do autor que fez a submissão)

Platform of antibody immobilization based on carboxymethylated cashew gum

Airis Maria Araújo Melo (PG),^{1*} Maria Roniele Felix Oliveira (PG),¹ Roselayne Ferro Furtado (PQ),² Maria de Fatima Borges (PQ),² Carlucio Roberto Alves (PQ),¹ Atanu Biswas (PQ)³ Huai N. Cheng (PQ)⁴.

airismelo@hotmail.com

¹Departamento de Química Universidade Estadual do Ceará;² Embrapa Agroindústria Tropical; ³USDA Agricultural Research Service, National Center for Agricultural Utilization Research; ⁴ USDA Agricultural Research Service, Southern Regional Research Center

Palavras Chave: (Carboxymethylation, Biosensor, Immunosensor, Amperometric, Electrochemical).

Highlights

Antibodies immobilization on carboxymethylated cashew gum film; Development of a rapid and specific amperometric immunosensor for *Salmonella* detection; Potential for bacteria detection in food.

Abstract

The development of immunosensors requires a biocompatible platform for the immobilization and maintenance of the antibody recognition property. Studies have successfully exploited the use of cashew gum film for the assembly of bioelectronic devices. In this work, cashew gum was isolated and then underwent carboxymethylation reaction in order to increase the amount of carboxylic groups available in the biopolymer chain. Protein A was used to promote the link between the fragment crystallizable (Fc) region of the antibody and carboxymethylated cashew gum (CGCM). The present work aims to evaluate concentrations of protein A and antibodies on films of chemically modified cashew gum (CGCM) in the recognition of the *Salmonella* antigen. CGCM was electrodeposited on gold electrodes using the cyclic voltammetry technique, applying a potential sweep of -1.0 V to 1.3 V with a scan rate of 50 mV s⁻¹, 10 scans. The modified electrode was immersed in N-hydroxysuccinimide / N-(3-dimethylaminopropyl)-N'-ethylcarbodiimide (EDC / NHS) solution (2 mM / 5 mM), during 1 h. After washing with PBS buffer (pH 7.4), the electrode was immersed in protein A solution for 1 h. Finally, the electrode was immersed in anti-*Salmonella* antibody solution overnight. The ideal conditions found for the development of the immunosensor were of CGCM 10% (w / v), protein A and antibody concentration of 7.5 mg mL⁻¹ and of 75 mg mL⁻¹, respectively. The use of these parameters allowed the assembly of a stable and efficient amperometric immunosensor for the *Salmonella* detection (Fig. 1).

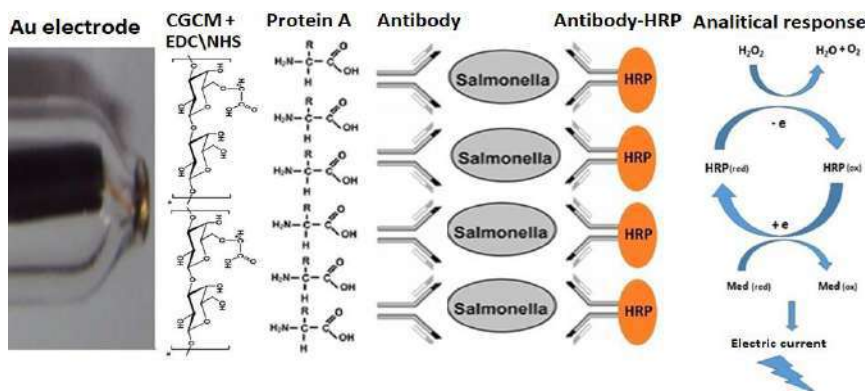


Fig. 1 Schematic diagram of the amperometric immunosensor developed on CGCM platform.

Acknowledgments

Embrapa Agroindústria Tropical; Universidade Estadual do Ceará; CAPES.

Área: MAT

(Inserir a sigla da seção científica para qual o resumo será submetido. Ex: ORG, BEA, CAT)

Nº de Inscrição: 01545

(Inserir o número de inscrição do autor que fez a submissão)

Avaliação estrutural e fotoluminescente do material 30SiO₂-70TiO₂ contendo Yb³⁺ e Eu³⁺ em função da quantidade de Er³⁺ na composição

Thaynah Yumi Kobayashi (IC),¹ Helliomar P. Barbosa (PQ),¹ Juliana Maria Martins Buarque (PQ)¹, Jefferson L. Ferrari (PQ),^{1*}

jeffersonferrari@gmail.com ou jeffersonferrari@ufu.br

¹Desenvolvimento de Materiais Inorgânicos contendo Terras Raras (DeMITeR); Laboratório de Materiais Fotoluminescentes (LAMAF) – Instituto de Química, Universidade Federal de Uberlândia; Uberlândia-MG, Brasil

Palavras Chave: Fotoluminescência, Terras raras, estrutura cristalina, espectroscopia.

Highlights

Evaluation of the structural composition of the different crystalline phases of TiO₂ on photoluminescent properties in the Er³⁺/Yb³⁺/Eu³⁺-doped SiO₂-TiO₂ material using Raman and photoluminescence Spectroscopy.

Resumo/Abstract

Photoluminescent materials containing rare earths ions (RE³⁺) have presented interesting applications from the point of view of their photoluminescent properties. Thus, one of the main characteristics necessary for the best use of photoluminescence is the host matrix in which the ion is housed [1]. The host matrix can provide different sites of symmetry to the rare earth ion in order to cause a significant changing in the shape of the bands in the emission spectra. These changes take materials to be applied in devices for different performances [2]. Based on this, the present work reports on the preparation of Er³⁺/Yb³⁺/Eu³⁺-doped 30%SiO₂-70%TiO₂ prepared by the sol-gel process heat-treated at 700 °C and the effect of changing of Er³⁺ amount on the TiO₂ crystalline phase and photoluminescent properties [3]. The materials were prepared by the sol-gel process, obtaining the xerogel at 60 °C and after heat treated at 700 °C in an over under air atmosphere. The concentration of Eu³⁺ and Yb³⁺ were fixed at 2 and 1.2 mol% and the Er³⁺ amount were changed at 0.1, 3 and 7 mol%. By Raman spectroscopy it was observed that formation of the rutile, anatase and rutile crystalline phases appear and that the intensity of the bands attributed to the formation of these phases are dependent on the concentration of Er³⁺ in the composition. Photoluminescence spectroscopy showed that the ⁵D₀→⁷F₂ emission band attributed to the Eu³⁺ ion is widening as a function of Er³⁺ concentration in the system. This may be an indication that the position of the Eu³⁺ is being affected by the presence of Er³⁺, in which causes a symmetry breakdown, or the enlargement of the band is attributed to overlap of Eu³⁺ (⁵D₀ → ⁷F₂) and Er³⁺ (⁴F_{9/2} → ⁴I_{15/2}) emission bands. Another very important point that is observed to the appearance of the band around 550 nm, attributed to the ⁴H_{11/2} → ⁴I_{15/2} and ⁴S_{3/2} → ⁴I_{15/2} of the Er³⁺ ion transition. In resume the concentration of RE³⁺ in the photoluminescence material can contribute significantly with the profile of the band and also with de potential different application of the material reported here.

Agradecimentos/Acknowledgments

The authors would like to thank CNPq, CAPES, REDE MINEIRA DE QUÍMICA, FAU and FAPEMIG.

1. Blasse, G., *Chem. Mater.*, 1989, 1 (3), 294.

2. You, W.W.; Tu, D.; Zheng, W.; Huang, P.; Chen, X., *J. Lumin.* 2018, 201, 255.

3. Buarque, J.M.M.; Manzani, D.; Scarpari, S.L.; Nalin, M.; Ribeiro, S.J.L.; Esbenshade, J.; Schiavon, M.A.; Ferrari, J.L., *Mater. Res. Bull.*, 2018, 107, 295.

Área: FOT

(Inserir a sigla da seção científica para qual o resumo será submetido. Ex: ORG, BEA, CAT)

Inscrição: _____

(Inserir o número de inscrição do autor que fez a submissão)

Silk fibroin hydrogels for potential applications in photodynamic therapy^[1]

Jose Eduardo U. Rojas¹ (PG), Barbara B. Gerbelli¹ (PG), Anderson O. Ribeiro¹ (PQ), Iseli L. Nantes-Cardoso¹ (PQ), Francesca Giuntini² (PQ), Wendel A. Alves¹ (PQ)

joeullo@hotmail.com

¹Centro de Ciências Naturais e Humanas, Universidade Federal do ABC, 09210-580, Santo André, Brazil;

²School of Pharmacy and Biomolecular Sciences, Liverpool John Moores University, Byrom Street, Liverpool, L3 3AF, UK.

Keywords: Porphyrin, fibroin, hydrogels, photodynamic therapy, crosslinking, rheology, singlet oxygen.

Highlights

The objective of the present work is to demonstrate the ability of hybrid porphyrin-fibroin hydrogels to generate singlet oxygen after gelation.

Resumo/Abstract

In this study, we prepared translucent hydrogels with different concentrations of silk fibroin, extracted from raw silk fibers, and used them as a matrix to incorporate the photosensitizer 5-(4-aminophenyl)-10,15,20-tris-(4-sulphonatophenyl) porphyrin trisodium for application in photodynamic therapy (PDT). The hydrogels obtained were characterized by rheology, spectrophotometry and scattering techniques to elucidate the factors involved in the formation of the hydrogel, and to characterize the behavior of silk fibroin (SF) after incorporating of the porphyrin to the matrix. The rheology results demonstrated that the SF hydrogels had a shear thinning behavior. In addition, we were able to verify that the structure of the material was able to be recovered over time after shear deformation. The encapsulation of porphyrins in hydrogels leads to the formation of self-assembled peptide nanostructures that prevent porphyrin aggregation, thereby greatly increasing the generation of singlet oxygen (see Fig. 1). Also, our findings suggest that porphyrin can diffuse out of the hydrogel and permeate the outer skin layers. This evidence suggests that SF hydrogels could be used as porphyrin encapsulation and as a drug carrier for the sustained release of photosensitizers for PDT.

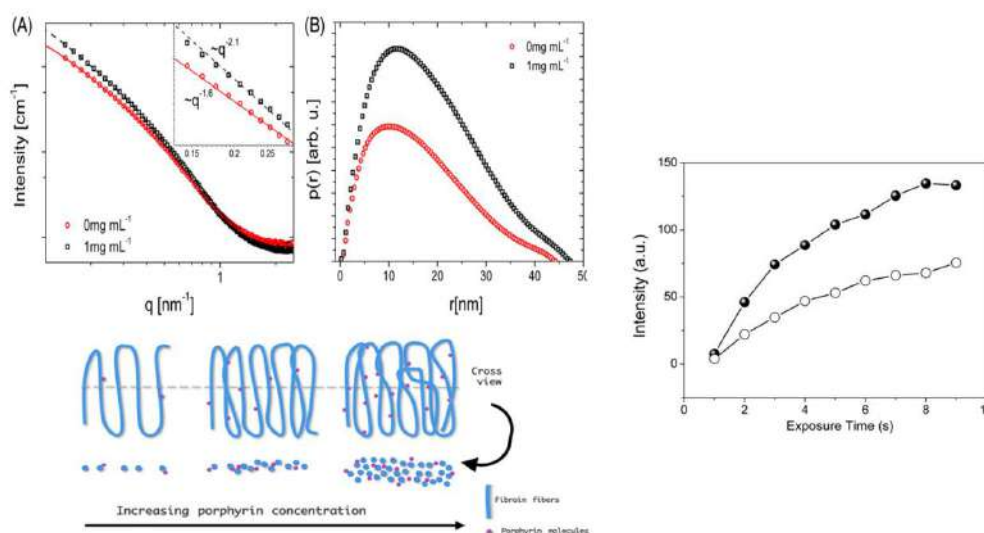


Fig. 1- (left) Fibroin/porphyrin hydrogels SAXS profiles of fibroin hydrogel with (black open symbols) and without (red circle symbols) porphyrin. and Schematic images (2D and 3D view) illustrating that increasing concentrations of porphyrin causes an increase of the radius of the fibroin fibers in the hydrogel. (Right) kinetic curve of generation of reactive oxygen species by using singlet oxygen sensor green (SOSG; Life Technologies, Carlsbad, CA) as the fluorescent probe for hybrid hydrogel (●) and porphyrin solution (○).

[1] ROJAS, J.E.U.; GERBELLI, B.B.; RIBEIRO, A.O.; NANTES-CARDOSO, I.L.; GIUNTINI, F.; ALVES, W.A. Silk fibroin hydrogels for potential applications in photodynamic therapy. BIOPOLYMERS, v. 1, p. e23245, 2018. (<https://doi.org/10.1002/bip.23245>)

Investigation of the antichagasic potential of new dimeric naphthoquinones derived from lawsone: synthesis, molecular modeling and structure-activity relationships

Aldo S. de Oliveira (PQ),^{1,2*} Luana C. Llanes (PG),³ Anacleto S. de Souza (PG),² Inês M. C. Brighente (PQ),⁴ Ricardo J. Nunes (PQ),⁴ Adriano D. Andricopulo (PQ),²

aldo.sena@ufsc.br

¹Department of Exact Sciences and Education, Federal University of Santa Catarina-UFSC- Blumenau-SC, Brazil; ²Center for Research and Innovation in Biodiversity and Drugs, Institute of Physics of São Carlos, University of São Paulo, Brazil; ³Department of Chemistry and Biochemistry, University of California, Santa Barbara, California, USA and ⁴Department of Chemistry, Federal University of Santa Catarina - UFSC, Florianópolis-SC, Brazil.

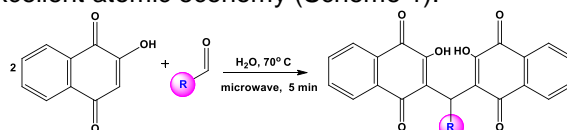
Keywords: Cruzain, Lawsone, Molecular docking, Chagas disease.

Highlights

Synthesis of unpublished dimers derived from lawsone. Correlation between *in vitro* assays and molecular modeling. Selection of potential candidates for the treatment of Chagas disease.

Resumo/Abstract

Quinones derivatives have been investigated for the development of new trypanocidal compounds for the treatment of Chagas' disease.¹ In this work, we have synthesized 29 dimeric quinones derived from lawsone, in high yields (75-98%) and excellent atomic economy (Scheme 1).



Scheme 1: Scheme of synthesis of the dimers derived from lawsone.

Docking studies were carried out with the purpose of elucidating some key properties and interactions between the synthetic ligands and the enzyme cruzain, a validated target for Chagas' disease drug discovery. The analysis of cruzain inhibition showed that the most active compound ($IC_{50} = 0.5 \mu M$) has the dodecyl group as the binder, but what determines the activity is the interaction by hydrogen bonds between oxygens from lawsone and glycine-19 and tryptophan-184 (Figure 1A). A linear correlation was observed between the IC_{50} values and the binding energy obtained by the docking protocol using the X Glide scoring function (Figure 1B). These compounds are candidates for biological evaluation against *T. cruzi*, and the work is underway.

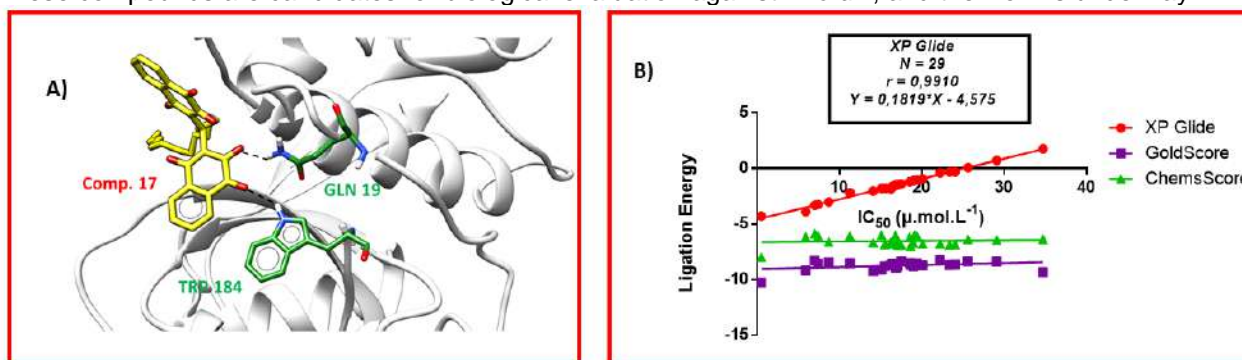


Figure 1: A) Molecular docking from the most active compound. B) Comparison between the docking scoring functions and IC_{50} values.

References

- Salomão K, De Castro SL (2017). Nova Science Publishers, NY, ISBN 978-1-53610-850-7, pp. 181-226.

Área: AMB

Nº de Inscrição: 01548

Use of sanitary landfill effluent for *Scenedesmus* sp. cultivation combined with non-thermal plasma to induce lipid production

L. de Souza(PG)¹, A. S. Lima(IC)², Â. P. Matos(PQ)², A. L. V. Cubas(PQ)³, E. H. S.Moecke(PQ)^{3*}

ecopinho@gmail.com; smoecke@gmail.com

¹ Postgraduate Program in Environmental Sciences (PPGCA), UNISUL ² Laboratory of Environmental Engineering, UNISUL. ³ PPGCA, UNISUL

Keywords: Microalgae, Biological treatment, Nitrogen and phosphorus removal, Plasma technology.

Highlights

Large capacity of microalgae to fix carbon dioxide for conversion of nutrients into biomass, biofuels and byproducts with great added value. - Production of biomass and lipids in a sustainable way, taking advantage of nutrients present in the effluents. - Protection of water resources and aquatic biodiversity.

Resumo/Abstract

Microalgae are considered renewable biomass source with great potential to harness solar energy combined with the ability to fix carbon dioxide in order to convert them into biomass that can be potentially used for biofuels and byproducts applications. The main advantages of microalgae cultivation are due to their rapid exponential growth and ability to handle with extreme environments, as well as being grown in freshwater, brackish, salted or wastewater. Several approaches have been used to increase the biomass concentration and lipid content in microalgae such as induction of cell stress, light intensity, extremes temperature and amount of nutrients during microalgae cultivation [1]. Cultivation of microalgae was carried out in photobioreactors of 2000 mL during 10 days, 24-hour photoperiod (24 h light), grown in CHU medium mixed with different proportions of sanitary landfill effluent (SLE, 0-, 20-, 40-, 60-, 80-, 100-%). In parallel, one cultivation was performed using only the CHU medium with non-thermal plasma (NTP) application every two days to induce cellular stress. On the fourth day of cultivation, the biomass concentration was 1.13 g L⁻¹ and lipid content (33.11%) was maximal (Figure1). Cultivation without the application of NTP on the same day yielded 1.25 g L⁻¹ of biomass and 17.40% of lipids. There was an increased proportion of lipids (47.42%) with NTP application. Biomass and lipid productivities of *Scenedesmus* sp. cultured in different proportions of SLE are shown in Table 1.

Figure 1. Biomass concentration and lipid content with plasma application every two days.

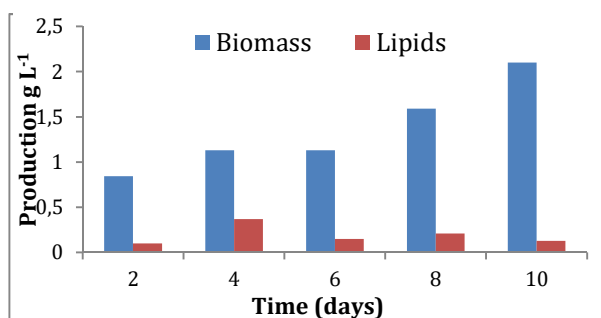


Table 1: Biomass concentration and lipid productivity of *Scenedesmus* sp. grown in different proportions of SLE and nutrient removal after 10 days of cultivation.

| SLE (%) | Biomass (g L ⁻¹) | Lipids (%) | Removal NO ₂ (%) | Removal NO ₃ (%) | Removal PO ₄ (%) |
|---------|------------------------------|------------|-----------------------------|-----------------------------|-----------------------------|
| 0 | 1.22 | 17.45 | 70.88 | 24.01 | 61.55 |
| 20 | 1.88 | 16.07 | 51.82 | 39.70 | 72.57 |
| 40 | 2.96 | 15.88 | 38.82 | 52.67 | 67.87 |
| 60 | 3.35 | 18.81 | 42.80 | 52.02 | 67.87 |
| 80 | 4.08 | 23.28 | 26.78 | 68.99 | 87.00 |
| 100 | 2.05 | 26.83 | 65.42 | 24.01 | 87.49 |

Using SLE as potential medium for *Scenedesmus* sp. cultivation, biomass concentration ranged from (1.88 to 4.08 g L⁻¹), while lipid content was an average of 20.17% (Table 1), Maximum nitrate (NO₃, 68.99%) and phosphorus (PO₄, 87.00%) removal was observed at 80% of SLE which translate to the maximum biomass concentration, with intermediate lipid production (23.28%).

References: [1] CHANG, H., et al. High-efficiency nutrients reclamation Bioresource Technology, 2018.

Acknowledgments

The authors thank CNPq and UNIUL for the scholarships.

Área: ELE

Nº de Inscrição: 01549

Voltammetric determination of INHHQ, a potential compound for the treatment of Alzheimer's disease, using a multi-walled carbon nanotube modified electrode

Marlin Pedrozo Peñafiel (PG),¹ Nicolas A. Rey (PQ),¹ Ricardo Q. Aucelio (PQ)¹

marlinpedrozo26@gmail.com; nicoarey@puc-rio.br; aucelior@puc-rio.br

¹Department of Chemistry, Pontifical Catholic University of Rio de Janeiro, Rio de Janeiro 22451-900, Brazil

Keywords: *INHHQ, Alzheimer's disease, multi-walled carbon nanotube.*

Highlights

Voltammetry
Alzheimer disease
Multi-walled carbon nanotube
INHHQ

Abstract

The electrochemical properties of 8-hydroxyquinoline-2-carboxaldehyde isonicotinoyl hydrazine (INHHQ), a potential drug for neurodegenerative disease treatment were investigated in detail using a glassy carbon electrode (GCE) modified with multi-walled carbon nanotube (MWCNT). The use of this modified electrode promoted the oxidation of INHHQ, producing a significant increase in the response intensity when compared with unmodified GCE due to the increase in electrode area¹. Cyclic voltammetry (CV) (fig. 1) and square wave voltammetry (SWV) were used as diagnostic techniques. The quantification of the INHHQ was made using a Britton-Robinson buffer (pH 11; 0.02 mol L⁻¹)/KCl 0.25 mol L⁻¹. The quantitative assays with square wave voltammetry were performed with successive additions of standard INHHQ solutions for the construction of an analytical curve, with an estimated limit of detection (LOD) of 1.1 x 10⁻⁷ mol L⁻¹, under the selected conditions such as the amplitude of 40 mV, frequency of 30 Hz, step potential of 20 mV. A procedure involving thin layer chromatography was performed to promote selectivity in the determination of INHHQ. Fortified samples of mice brains were analyzed with recoveries around 85%.

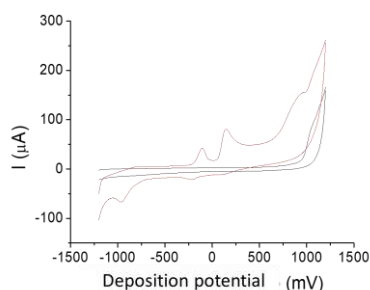


Figure 1. Cyclic voltammogram of INHHQ using GCE modified with MWCNT. 5x10⁻⁴ mol L⁻¹ of INHHQ. Conditions: Britton-Robinson buffer (pH 11; 0.02 mol L⁻¹)/KCl 0.25 mol L⁻¹. Sweep rate was 100 mV s⁻¹.

¹Alegret, S. Rigid carbon-polymer biocomposites for electrochemical sensing. A review. Analytical Letters, 1996; 121, 1751.

Acknowledgments



Non-covalent interactions as a tool for improving the selectivity of the Heck reactions: a DFT study of spiro systems

Vitor H. Menezes da Silva (PQ),¹ Valdeir C. de Oliveira (PG),¹ and Carlos R. D. Correia (PQ).¹
vitor.silva@iqm.unicamp.br

¹Departamento de Química Orgânica, Instituto de Química, Universidade Estadual de Campinas, CP 6154, 13083-970 Campinas-SP, Brazil

Palavras Chave: (Heck reactions, DFT, non-covalente interactions, spiro systems, reaction mechanism)

Highlights

In the intervening years, our group have been evidenced the feasibility of non-covalent interactions as directing effects for modulating the selectivity of Heck-Matsuda (HM) reactions using combined experimental and computational methods.¹ Herein, spiro systems were investigated by DFT calculations.

Abstract

We aim to improve diastereoselectivity of HM arylation of olefinic spiro systems using the non-covalent substrate directed approaches. The feasibility of these approaches relies on the ability of the substrate to provide well-defined ion-ion or ion-dipole interactions involving the palladium center and the negatively charged substituents. In this context, the understanding on how the substrate interacts with palladium and its ligands is crucial for the design of new Heck-substrates on a more rational basis. Computational methods have been valuable tools to achieve good levels of understanding of non-covalent interactions as directing effects. Therefore, density functional theory (DFT) calculations were performed using the M06-L density functional with the methanol solvent effects taken into account the SMD method. The present research focused on the regioselectivity-determining step of the catalytic cycle, i.e., the migratory insertion of aryl group to olefin, the key step to elucidate the diastereoselectivity observed in the experimental study. It was assumed that HM reactions are under Curtin-Hammett regime. In computational chemistry it means that elucidation of the diastereoselectivity was obtained directly by the analysis of the key transition states (Figure 1). Initially, we compared two spiro olefinic systems used in previously HM reactions performed in our group,² in which the final products were used as precursor for the VCP01091 synthesis, a candidate drug for treatment of multiple sclerosis.

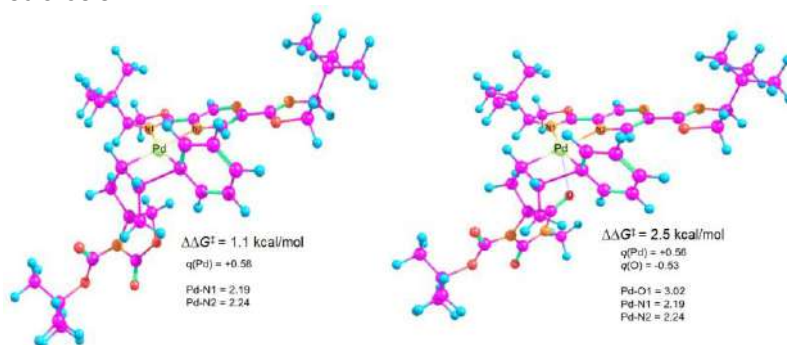


Figure 1. The key migratory insertion transition states using spiro substrates with absent (left) and non-covalent directed group (right). Free energies (298.15 K) are relative the difference between the diastereomeric transition states.

The DFT predictions matched well with the experimental results demonstrating that ion-dipole interactions can be feasible tools for improving the selectivity of these systems. Further results will be presented in the poster session.

¹ Oliveira, J. M.; Angnes, R. A.; Khan, I. U.; Polo, E. C.; Heerd, G.; Servilha, B. M.; Silva, V. H. M.; Braga, A. A. C.; Correia, C. R. D. *Chem. Eur. J.* **2018**, *24*, 11738.

² Khan, I. U.; Kattela, S.; Hassan, A.; Correia, C. R. D. *Org. Biomol. Chem.* **2016**, *14*, 9476.

Acknowledgments

V.H.M.S (grant #2017/18207-1) and C.R.D.C. (grant #2014/25770-6) FAPESP for financial support.

Área: ELE N° de Inscrição: 01551

Thiols adsorption: The influence of the surfaces, pH and organic functional groups present in the molecules.

Gabriel I. R. M. Pereira (IC), André H. B. Dourado (PG), Susana I. Córdoba de Torresi* (PQ)
gabriel.ignatti@usp.br; storresi@iq.usp.br

¹Departamento de Química Fundamental, USP

Key-words: *Thiol adsorption, Pt-S, Au-S, Thiol oxidation, Surface bond, pH influence.*

Highlights

The MPA has more positive oxidation potentials on Au than on Pt. Besides, the current density is also higher on Au than on Pt. The MPA is more electroactive in low pH than in high.

Resumo/Abstract

The immobilization of molecules with electroactive properties like L-Cysteine (L-Cys) has captivated the academic-technological community due to its application in material, bio and nanotechnology for issues like clinical-analytic, surface and catalysis, high efficiency and low costs solar cells and many others applications. However, these uses, the adsorption Au and Pt surfaces the behavior is not well known. The L-Cys electrochemical behavior is guided by its functional groups (thiol, amine and acyl), but it is not known precisely the relative influence of each organic function on the electrochemical, kinetics, thiol-metal bonding force and surface orientation properties. Therefore, the present work aims to investigate the influence of functional groups present in different thiols during the adsorption-oxidation processes on Au and Pt electrodes. The molecules chosen to conduct the study are Cysteamine, 3-Mercaptopropionic Acid (MPA) and 1-Propanethiol..

Voltammetric investigations concluded that MPA oxidation potential is more positive on Au surface than on Pt. The current intensity is also higher for Au, these are explained by Au-S bond force, which is stronger than Pt-S, then there is more surface overlay which increases the current density. In both cases the oxidation reaction was controlled by activation and presented an adsorption step as the rate limit step. The number of electrons present on this step was found to be the same, however, the symmetric charge transfer factor was found to be very different in the Au vs. Pt comparison, being more reversible on Pt surfaces.

The full protonated MPA was found to be more electroactive than the full deprotonated one, as observed in the literature for L-Cys. This is related to coulombic repulsion between the MPA in solution and the surface,

Agradecimentos/Acknowledgments

CNPq; FAPESP #2015/ 26308-7 #2018/07709-9

Área: MAT

Nº de Inscrição: 01552

Preparation of porous clay heterostructures (PCHs) from commercial montmorillonite clay Cloisite-Na⁺

Bruna P. Nicola (PG), Anderson J. Schwanke (PQ), Katia Bernardo-Gusmão (PQ).

bruna.pnicola@hotmail.com

Instituto de Química, UFRGS

Keywords: PCH, Porous clay heterostructures, Montmorillonite, Clay, Cloisite-Na⁺.

Highlights

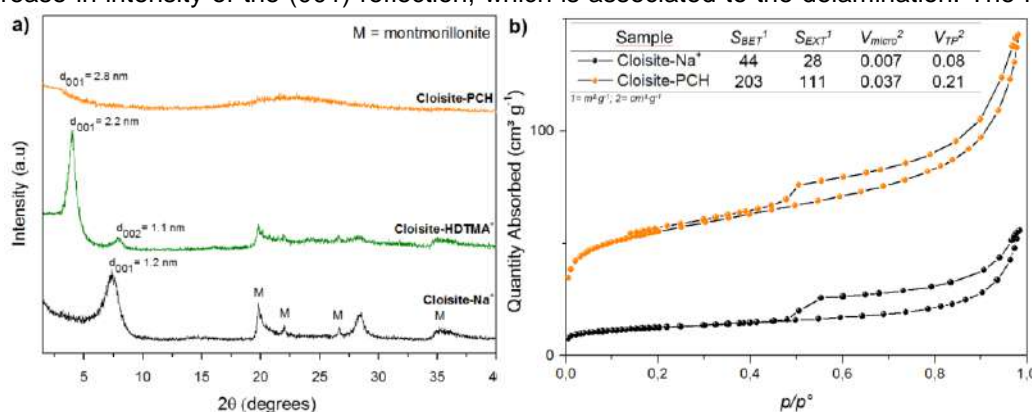
PCH was synthesized with commercial montmorillonite clay Cloisite-Na⁺. The d_{001} spacing increases 1 nm after intercalation of hexadecyltrimethylammonium (HDTMA⁺) cations. The insertion of silica pillars decreases the intensity of the d_{001} reflection suggesting a strong delamination in the PCH structure.

Abstract

Porous clay heterostructures (PCHs) are inorganic materials with a structure formed by a template mechanism similar to MCM-41. They combine mesoporous-material characteristics with clay properties such as rigid structure, acidity, and ion exchange capacity. These characteristics make PCHs interesting materials for applications as adsorbents, supports, and catalysts. We investigated the preparation of a PCH using the commercial montmorillonite clay Cloisite-Na⁺, aiming to use it as catalysts' support. The experimental procedures comprised hydration of the clay, intercalation of HDTMA⁺ molecules, and stabilization of silica pillars in the interlamellar region using silicon alkoxyde (TEOS) at 80 °C for 24 hours and calcination at 600 °C. The materials were characterized by X-ray diffraction (XRD) and N₂ adsorption-desorption isotherms at -196 °C. The XRD analysis in Fig. 1a reveals a shift of the (001) reflection to lower angles after HDTMA⁺ intercalation. The d_{001} of 2.2 nm confirms that HDTMA⁺ surfactant molecules exhibited a pseudo-trilayer accommodation between clay layers. Insertion of the pillaring agent (TEOS) and subsequent calcination increases the d_{001} spacing to 2.8 nm. Moreover, a loss of order of the layer stacking along the *c* axis was evidenced by a decrease in intensity of the (001) reflection, which is associated to the delamination. The N₂ adsorption-desorption

isotherms in Fig. 1b show an increase in the quantity of N₂ adsorbed already at low pressure for Cloisite-PCH, and an increase of S_{BET} of 159 m² g⁻¹ compared with Cloisite-Na⁺. In addition, the V_{micro}

and V_{TP} values for Cloisite-PCH are higher than Cloisite-Na⁺, which confirms that accessibility was increased.



Acknowledgments

We acknowledge support from CAPES and PPGQ-UFRGS.

Área: MAT

(Inserir a sigla da seção científica para qual o resumo será submetido. Ex: ORG, BEA, CAT)

Nº de Inscrição: 01553

(Inserir o número de inscrição do autor que fez a submissão)

Structural and thermal evaluation of composites based on polycaprolactone/titanium phosphate with and without long chain amine

Raquel R. R. Quinelato (PG),^{1*} Dayana Coval (IC),¹ Gerson Valencia (PQ),¹ Luis C. Mendes (PQ).¹

rquinelato@ima.ufrj.br

¹Instituto de Macromoléculas Professora Eloisa Mano, Universidade Federal do Rio de Janeiro.

Palavras Chave: *Polycaprolactone, Titanium Phosphate, Intercalation, Composites.*

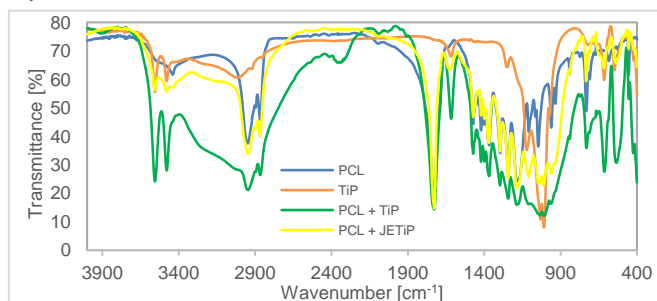
Highlights

Evaluation of structural and thermal properties of polycaprolactone composites with neat and chemically modified titanium phosphate. Titanium phosphate chemically modified with a long chain amine.

Resumo/Abstract

The aim of this work is to study the intercalation effect of titanium phosphate (TiP) with long chain amine and its impacts on structural and thermal properties of composites based on polycaprolactone (PCL) with neat TiP (PCL/TiP) and modified TiP (PCL/JETiP). TiP was synthesized from titanium isopropoxide and orthophosphoric acid with 1: 8 molar ratio, and was then organically modified with long chain amine (ethylamine and O- (2-aminopropyl) -O'- (2-methoxyethyl) polypropylene glycol) in a phosphate molar ratio of 0.5:1. The titanium phosphate and amine were dispersed in ethanol and then mixed. The composites were prepared by mixing aqueous solutions of PCL and TiPs.

Fourier-transform infrared spectroscopy (FTIR) and thermogravimetric (TGA) analysis were carried out. TGA curve of TiP presented three degradation steps: first step below 200°C showed maximum degradation temperature (T_{max}) at 110 °C, second step between 200-300 °C showed T_{max} at 210 °C and final step, between 400-600°C showed T_{max} at 456 °C. Each one represents adsorbed water, hydrated water and dihydroxylation of TiP, respectively. PCL presented two degradation steps, according to the literature^[1]. PCL/TiP composite presented four degradation steps: first step below 300°C showed T_{max} at 208°C, second step around 300-450°C showed T_{max} at 355 and 396°C, and the last one, between 450-550°C showed T_{max} at 476°C. They were attributed to adsorbed water, hydrated water, PCL degradation and TiP dihydroxylation, respectively. PCL/JETiP composite presented two degradation steps: first between 200-350°C showed T_{max} at 292°C and second around 350-425°C showed T_{max} at 355 °C. Each one represents long chain ether-amine free/linked and PCL/ether-amine degradation. Figure 1 presents FTIR spectra of precursors and composites. PCL fingerprint region presents a series of absorptions which are superimposed those observed for TiP and JETiP, making difficult spectral analysis. In the region above 3000 cm^{-1} , PCL/TiP and PCL/JETiP presented absorptions at 3556 and 3479 cm^{-1} related to TiP and JETiP individually. These absorptions were attributed to hydrogen bonds and are under evaluation. The work continues at Instituto de Macromoléculas Professora Eloisa Mano (IMA) laboratory.



REFERENCE

1. Persenaire, O. *et al* Biom. 2001, 2, 288–294.

Agradecimentos/Acknowledgments

The authors thank the Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq), Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior (CAPES) and IMA for supporting of this work.

Área: ELE

Nº de Inscrição: 01554

Solar-Driven Membraneless Hydrogen Peroxide-Photofuel Cell Employing Bismuth Vanadate and Cuprous Oxide Photoelectrodes

Tatiana Andrade (PG),^{1*} Bárbara Antunes (IC),¹ Andreia Oliveira (PG),¹ Mariandry Rodriguez (PQ),¹ Márcio Pereira (PQ)¹ *tsandrade@live.com

¹Nanotechnology and Novel Materials research group/ Instituto de Ciência, Engenharia e Tecnologia/ Universidade Federal dos Vales do Jequitinhonha e Mucuri, Teófilo Otoni, Brasil

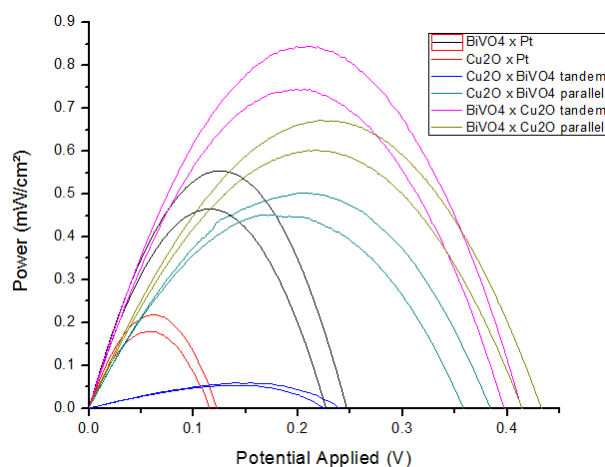
Palavras Chave: Solar Fuels, One-Compartment, Drop Casting, Tandem Cells.

Highlights

- Membraneless H₂O₂ based fuel cell;
- Abundant elements for the photoelectrodes: BiVO₄ and CuO;
- Simple deposition technique to synthesize the materials: drop casting;
- Current Density of 7 mA/cm² at 0V;
- Maximum power of 0.85 mW/cm².

Resumo/Abstract

Introduction. H₂O₂ fuel cells appear as a promising alternative for energy generation from a renewable source as solar light. However, efficient one-compartment H₂O₂ fuel cells without expensive membranes still need better photoelectrodes to improve its performance ^a. **Experimental.** BiVO₄ and Cu₂O powder materials were dissolved in alcohol and ultrasounded for an hour. The precursor solution (4mg/400uL) was deposited in FTO glass by means of drop casting technique in 25uL layers. Then the films were calcinated at 500 and 450°C for BiVO₄ and Cu₂O (with CuO formation) respectively. After that, it was constructed an aerated photofuel cell using H₂O₂ as the fuel and the oxidant in a basic media, employing BiVO₄ as the photoanode and CuO as the photocathode under simulated sunlight. The cell was performed in tandem and parallel configuration. For means of comparison, cells comprising: BiVO₄ as the photoanode and platinum as the counter electrode; CuO as the photoanode and platinum as the counter electrode; and CuO as the photoanode and BiVO₄ as the photocathode, were also evaluated. **Results.** The results shows that the tandem configuration using BiVO₄ as the photoanode and CuO as the photocathode reached the best performance, with a photocurrent of 7 mA.cm⁻² without an external bias, an open-circuit value of 0.4 V and a maximum power density as high as 0.85 mW.cm⁻². Figure 1 shows the power density per potential applied for all the circuits tested. **Conclusion.** This study shows relevant and promising results that brings us closer to the development of high performance membraneless H₂O₂ based fuel cells. **References.** ^aFukuzumi & Yamada. ChemElectroChem 2016, 3, 1978 – 1989.



Agradecimentos/Acknowledgments

The authors thank to Universidade Federal dos Vales do Jequitinhonha e Mucuri, CNPQ and FAPEMIG for the financial support.

42ª Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química: Eixos Mobilizadores em Química

Eletródos de grafite de lapiseira aplicados ao estudo voltamétrico do complexo Cu-Picloram em águas da represa Billings

Carolina Mecca (IC)^{1*}, Carolina Simião (PG)¹, Lúcia Codognoto (PQ)¹, Eliana M. A. Valle (PQ)¹.

meccacarolina1@gmail.com; simiao.carolina@gmail.com

¹Departamento de Química, UNIFESP Campus Diadema, SP

Palavras Chave: Picloram, Complexos metálicos, Eletrodo de Grafite, Voltametria Cíclica.

Highlights

Pencil graphite electrodes applied to the voltammetric study of the Cu-Picloram complex in waters of the Billings dam. Study the interaction of the pesticide complexed present in natural environments can culminate in possible methods of environmental remediations. The electrochemistry technique allows evaluation the necessary energy to effect the oxidation or the reduction chemical species. The graphite electrode appears as an alternative due to its low cost and an easy handling.

Resumo

O pesticida picloram (ácido 4-amino 3,5,6 triclora-2-piridinacarboxílico), é um herbicida clorado da classe dos ácidos carboxílicos de piridina derivado do ácido picolínico, utilizado no controle de plantas daninhas dicotiledôneas arbustivas e arbóreas e em pastagens. É um forte ligante coordenante para íons metálicos, pois apresenta um nitrogênio piridínico com um par de elétrons livres e um grupo ácido. O estudo de interação do picloram com metais é de grande interesse ambiental, devido o potencial risco toxicológico para a saúde humana, pois os pesticidas uma vez que complexados podem ter suas propriedades modificadas. Para avaliar a complexação do picloram com o íon metálico cobre (II), utilizou-se a técnica de voltametria cíclica e o eletrodo selecionado para a realização desta etapa do trabalho foi o eletrodo de grafite de lapiseira, confeccionado em nosso laboratório. Foi utilizado como eletrólito suporte uma solução de KNO₃ com concentração de 0,1 mol L⁻¹ e testado a complexação em diferentes proporções, realizando adições do metal e mantendo o picloram fixo (Figura 1). Observa-se um processo redox em torno de 0,1 V referente ao complexo Cu-Picloram formado. Em uma nova etapa de análises, nas mesmas condições anteriores, utilizou-se o mesmo eletrólito de suporte, porém como solvente água da represa Billings (Figura 2). Pode-se observar um comportamento semelhante, mas com menor intensidade do sinal eletroquímico, provavelmente em função dos componentes da água da Billings, como material orgânico (ácidos húmicos, fúlvicos, etc.), que podem interagir com picloram e/ou o metal diminuindo a concentração efetiva destes em solução, ou ainda pela contaminação da superfície eletródica, provocando a diminuição de sítios ativos do eletrodo. No entanto, foi possível observar que mesmos em águas naturais (como as da Represa Billings) pode ocorrer a complexação do cobre (II) com o ligante picloram.

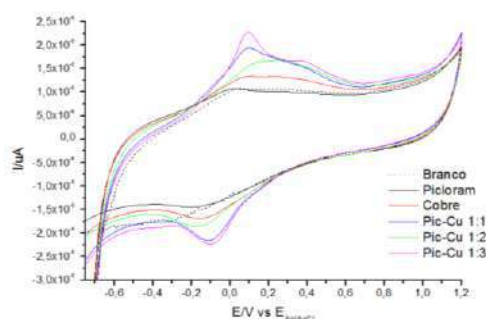


Figura 1: Voltamograma cíclico do Picloram, e complexo Cu-Picloram em diferentes proporções.

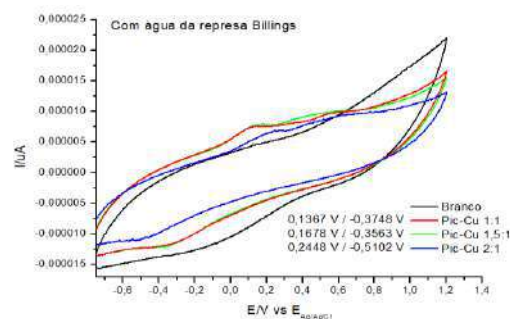


Figura 2: Voltamograma cíclico do complexo Cu-Picloram em diferentes proporções na água da represa Billings.

Agradecimentos

FAPESP (2017/24235-8), CNPq, CAPES.

Área: _____ Nº de Inscrição: _____

Estudo voltamétrico da interação entre o íon metálico Cu (II) e compostos cumarínicos

Pedro H. de Lima Ferreira (IC)^{1*}, Lucas Vairolette Evangelista (PG)¹, Hueder P. M. de Oliveira (PQ)², Lucia Codognoto (PQ)¹, Eliana M. Agostini Valle (PQ)¹

pedrohenriquelf@outlook.com, lucas_vairolette@hotmail.com

¹Departamento de Química, UNIFESP Campus Diadema, SP

²CCNH - UFABC, Santo André, SP.

Palavras Chave: voltametria, eletrodos de grafite de lapiseira, compostos cumarínicos, cobre

Highlights

Voltammetric studies of the interaction between copper metal ion and the coumarin compounds.
Electrochemical study of the interaction of metals with organic compounds.
Pencil graphite electrodes applied to electrochemical studies in medicinal plants.

Resumo/Abstract

Cumarinas são lactonas comumente encontradas em espécies como guaco, e que apresentam propriedades vasodilatadoras, anti-inflamatórias, antiasmáticas e antialérgicas. São moléculas bastante estudadas quanto suas atividades biológicas, tendo muitos estudos investigando atividades antibacterianas e no tratamento contra melanoma. Devido à importância dessas moléculas, este trabalho visou estudar a interação entre a cumarina (CM) e a 7-hidroxycumarina (7OHCM) com o íon metálico cobre (II), o qual está presente naturalmente tanto no meio ambiente, quanto no meio biológico. Estes estudos foram realizados utilizando um eletrodo de grafite de lapiseira como eletrodo de trabalho, Ag/AgCl como eletrodo de referência e uma placa de platina como contra eletrodo. Eletrólito suporte utilizado foi uma solução de KNO_3 0,1 mol L^{-1} (pH 7,0).

Os resultados obtidos por voltametria cíclica (VC) sob eletrodo de grafite de lapiseira, para o Cu (II), mostraram um pico de oxidação em 0,48 V vs Ag/AgCl e um pico de redução em 0,18 V vs Ag/AgCl, com características de processo *quasi-reversível*, controlado pela difusão das espécies em solução. Os estudos da interação entre o Cu e as cumarinas estudadas foram feitos em pH 4,0, 7,0 e 9,0 a fim de avaliar a influência do meio na complexação. Após adição de solução de CM observou-se o deslocamento do sinal eletroquímico do cobre para valores mais positivos. Para uma estequiometria 1:2 M:L, o pico de redução atribuído ao íon metálico complexado se encontra em 421 mV (pH 4,0), sofrendo um deslocamento de 266 mV. Este deslocamento para valores mais positivos indica um centro metálico rico em elétrons, o qual torna a redução do mesmo mais difícil. O mesmo padrão é observado no pH 7,0 com um deslocamento de pico de 233 mV; e em pH 9,0 com um deslocamento de 270 mV. Os complexos formados apresentaram características de processos reversíveis. Já nos estudos com a 7OHCM foi observado um deslocamento de 266 mV, 217 mV e 249 mV para os pH 4,0, 7,0 e 9,0, respectivamente. Observou-se que o pH não influencia no processo de complexação, porém em pH 7,0 observou-se um perfil voltamétrico bem definido, sendo este pH selecionado para os próximos estudos. Os dados voltamétricos obtidos para o íon Cu^{2+} em função da velocidade de varredura indicaram um processo difusional. Estudos da variação da velocidade de varredura para os complexos formados Cu-CM e Cu-7OHCM, em um intervalo de velocidade de varredura de 10 a 250 mV s^{-1} , foram realizados. Foi observado um aumento na intensidade do sinal de corrente com o aumento de velocidade. A variação de ΔE aumenta apenas para o complexo formado com o ligante CM, indicando um sistema *quasi-reversível*, porém não há variação quando o ligante é a 7OHCM, comprovando ser um sistema reversível. Os complexos formados indicaram ser um processo difusional.

References:

- 1- Yunes, R.A.; Pedrosa R.C.; Filho, V. Química Nova v. 24, n. 1, p. 147-152,2001.
- 2 - Miyano, D.M.; Lima, T, Simões F.R.; La-Scalea, M.A.; Oliveira, H.P.M.; Codognoto, L. Journal of the Brazilian Chemical. Society, v. 25, n. 3, p. 602-609, 2014.

Agradecimentos/Acknowledgments

CNPq, CAPES e FAPESP.

Analysis and evaluation of endophytic fungi extracts in herbicidal activities

Mariana de S. Moura (IC)^{1*}, Jhuly W. F. Lacerda (PG)¹, Marcos A. Soares (PQ)², Lucas C. C. Vieira (PQ)³, Olívia M. Sampaio(PQ)¹
marianadesouzamoura@hotmail.com

¹ Chemistry Department, Federal University of Mato Grosso, Cuiabá-MT, Brazil; ² Institute of Biosciences, University of Mato Grosso, Cuiabá-MT, Brazil; ³ Engineering Institute/Chemistry, Federal University of Mato Grosso, Várzea Grande-MT, Brazil.

Keywords: Endophytic fungus, weed, bioherbicides, chlorophyll a fluorescence, photosynthesis.

Highlights

Extracts of endophytic fungus were evaluated as photosynthesis inhibitor through chlorophyll a fluorescence assay. All extracts showed an action in electron flux inhibition, promoting a plant stress.

Resumo/Abstract

A greener alternative to weed control is the biological process that aimed to reduce or eliminate the use of chemicals with high toxicity to humans and nature.¹ In this way, the use of endophytic microorganism extracts as agricultural pesticides replacement, since they demonstrate important biological properties and low toxicity.^{1,2} *Diaphorus phaseolorum*, *Penicillium simplicissimum* and *Trichoderma spirale* extracts were evaluated as bioherbicides through the inhibitory activity on photosynthetic apparatus. The extracts were evaluated through semi *in vivo* (spinach leaf discs assay) and *in vivo* experiments, employing the weed *Senna occidentalis*.^{3,4} Chlorophyll a (Chl a) fluorescence measurements provided parameters for the evaluation of photosynthetic efficiency, specifically on photosystem II (PSII) behavior.⁵ The inhibition of electron flow on photosynthesis process was observed for the three fungi extracts though the spinach leaf disc assay, which meant the plant stress where the decrease in density of reactional centers parameter, indicated the low energy accumulation preventing the regular flow of electrons in the transport chain.^{3,6} The extracts reduced the electron transport on the photosynthesis process, causing a significant non-reversible damage or even death of the plants.³ The *T. spirale* fungus showed better activity at 100 ppm concentration, which reduced the index of performance (PI_{abs}) by 20% and increase the relative variable fluorescence as a function of time (dV/dt) by 31%. These parameters demonstrated the compound activity on PSII and the plant stress.⁶ For the fungi *D. phaseolorum* and *P. simplicissimum* at 100ppm, there was a decrease in PI_{abs} by 35.5 and 23% respectively, which indicates stress in the development of the plant and possible damage in its electron transport. In the *in vivo* experiment employing *S. occidentalis* plant, the Chl a fluorescence measurements were performed at 24, 48 and 72h. The PI_{abs} was decreased by 40.5, 40.0 and 71.0% for *T. spirale*, *D. phaseolorum* and *P. simplicissimum*, respectively. Based on these results, the *P. simplicissimum* showed a greater inhibitory activity of electron transport in the photosynthesis process of *S. occidentalis*.

References

- ¹AZEVEDO, J. L. *et al*, **Electronic Journal of Biotechnology**, 2000.
- ²SAIKKONEN, K. *et al*, **Entomologia Experimentalis et Applicata**, 1996.
- ³SAMPAIO, O. M. *et al*. **Pestic Biochem Physiol**, 2016.
- ⁴STRASSER, R. *et al*, **Photochem Photobiol**, 1995
- ⁵SCHANSKER, G. *et al*, **Photosynthesis Research**, 2014.
- ⁶SAMPAIO, O. M. *et al*. **Molecules**, 2018.

Agradecimentos/Acknowledgments

FAPEMAT, CAPES e CNPq pelo suporte financeiro.

Área: AMB

Nº de Inscrição: 01558

Reverse micellar extraction of dyes based on fatty acids and reusable organic solvent

Lais Bukman (PG),¹ Vagner Roberto De Souza (PQ),¹ Nádia Regina Camargo Fernandes (PQ),² Wilker Caetano (PQ),¹ Vagner Roberto Batistela (PQ),³ Noboru Hioka (PQ).^{1*}

¹ Chemistry Department, UEM; ² Chemical Engineering Department, UEM; ³ Technology Department, UEM.

vrbatistela@uem.br; labukman@hotmail.com

Keywords: Reverse micelles, Extraction, Dyes, Wastewater, Fatty acids, Isoamyl alcohol.

Highlights

- Reverse micelles of fatty acids were effective (>99%) for removal of dyes.
- Isoamyl alcohol can be recovered by acidification and reused.
- This process is environmentally friendly for wastewater treatment.

Resumo/Abstract

Reverse micelle extraction occurs when a substrate migrates from the aqueous phase to an organic phase, immiscible with water, rich in reverse micelles. In this work three fatty acids were investigated for the extraction of methylene blue (MB⁺) dye, lauric acid (C₁₂), palmitic acid (C₁₆) and stearic acid (C₁₈). Experiments were performed in ratio of 2:1 (volume) of aqueous solution of MB (6.25x10⁻⁴ mol L⁻¹) at pH around 9 and surfactants (0–6.0x10⁻³ mol L⁻¹) in isoamyl alcohol, performed in common quartz cuvettes by electronic absorption spectroscopy (UV-Vis). Thermodynamic and kinetic studies were carried out directly on the cuvette at 655 nm for efficiency determination and 750 nm for phase separation analysis, in a Cary-60 spectrophotometer and 25.0° C. The removal of the MB⁺ from aqueous solution with pure organic solvent was inefficient. For the three surfactants, there was low dye removal when there was no pH control. At pH close to 9, the three fatty acids presented efficiency of removal of MB⁺ upper to 99%, in the range of 3.0 to 6.0 x10⁻³ mol L⁻¹, except lauric acid that formed solid particles at high concentrations. In more basic medium, precipitation was observable for all fatty acids in a wide range of concentrations. For all tested conditions, C₁₈ at 3.7x10⁻³ mol L⁻¹ presented the fast separation of phases, probably due to its long hydrophobic organic chain. Near pH 9, fatty acids have a negative charge that interacts with the positive charge of the dye, resulting in ionic pairs. These aggregates migrate from aqueous solution to organic phase, in which form reverse micelles concentrating dye molecules in their inner part. The effects of percentage of organic phase and the concentration of stearic acid on percentual efficiency and half time of separation (t_{1/2}) were studied by response surface methodology. The maximum efficiency (>99%) occurred with at least 21% of organic phase, being the variable that explained most of the experimental variance. Concentration of C₁₈ showed be relevant for time of separation of phases, probably due to the influence in the interphase tension. In the optimum condition, the total time of separation of phases was around 5h, but this time could be improved by addition of inert salts, ultrasound and temperature modifications. After the total process, organic phase containing MB⁺ were acidified with H₂SO₄ diluted for protonation and precipitation of fatty acids, solids very biodegradable in mild conditions. Therefore, in this case, reverse micelles were disrupted and MB⁺ was concentrated in a small drop of acid aqueous solution, concentrating all MB⁺ of initial aqueous phase and leading recuperation of isoamyl alcohol for reuse. In conclusion, this process can be applied for extraction of cationic dyes from wastewater and the main advantages include selectivity, mild thermal conditions, low energy consumption, potential for industrial scale and possibility of application for the removal of other cationic pollutants.

Agradecimentos/Acknowledgments

UGF (SETI/PR), CAPES e CNPq.

Área: QPN

Nº de Inscrição: 01560

Isolamento e identificação de novas saponinas do “Mandacaru” (*Cereus jamacaru*).

Lucas S. Abreu (PG),¹ Analu F. de Souza Brito (PG),¹ Yuri M. do Nascimento (PG),¹ César Augusto G. Dantas (PG),¹ Laiane Caline O. Pereira (PG),¹ Francisca Sabrina Vieira Lins (PG),¹ Raimundo Braz-Filho (PQ),² Vicente Carlos de Oliveira Costa (PQ),¹ Marcelo Sobral da Silva (PQ),¹ Josean Fachine Tavares (PQ).^{1*}

Lucasabreu99@hotmail.com; josean@lft.ufpb.br

¹Programa de Pós Graduação em Produtos Naturais e Sintéticos Bioativos, UFPB; ²Centro de Ciência e Tecnologia, UENF

Palavras Chave: *Cereus jamacaru*, Saponinas, CLAE-IES-EM, RMN.

Highlights

Isolation and identification of novel saponins from "Mandacaru" (*Cereus jamacaru*)
Mandacaru is a symbol of Caatinga biome. This species does not show an extensive chemistry description. Saponins were isolated using HPLC-ESI-MS

Resumo/Abstract

Cereus jamacaru pertence à família Cactaceae, sendo popularmente conhecido no Brasil por Mandacaru, com ocorrência nos estados do Piauí, Paraíba, Ceará, Sergipe, Rio Grande do Norte, Alagoas, Pernambuco, Bahia e norte de Minas Gerais. Ela é categorizada como “símbolo do sertão” por ter sido uma das primeiras espécies identificadas e com ampla distribuição na caatinga. O uso popular desta espécie é relatado no tratamento de problemas uretrais, sífilis, dores na coluna cervical, controle de diabetes, tratamento de pedras vesiculares, problemas no aparelho respiratório como tosses e bronquites, além de úlceras. Este trabalho teve como objetivo contribuir com a ampliação do conhecimento químico de *Cereus jamacaru*. Para isto, o material vegetal coletado na cidade de Serra Branca-PB (SISGEN: A241001), após seco e moído, foi submetido a uma maceração com etanol a 95% por 72 horas, sendo esse processo repetido por três vezes, obtendo-se o extrato etanólico bruto (EEB). Uma alíquota do EEB foi submetida a uma partição líquido-líquido com os solventes hexano, diclorometano e acetato de etila. A fração acetato de etila foi submetida a uma cromatografia de exclusão para realizar um fracionamento prévio desta fração. As frações resultante foram analisadas por CLAE-DAD-EM/EM o que permitiu a identificação de substâncias com $m/z > 600$ Da e com perdas neutras de 162 Da representando a perda de unidades de hexose. Algumas frações foram selecionadas para análise de RMN de ¹H apresentando sinais característicos de Saponinas. O isolamento das substâncias foi realizado utilizando o CLAE-IES-EM. Duas saponinas foram identificadas utilizando dados de RMN uni e bidimensionais, EM de alta resolução, EM/EM e comparação com dados da literatura. Assim, este estudo descreve um trabalho fitoquímico utilizando as técnicas de RMN e EM com ferramentas para identificação de saponinas, não relatadas na literatura, e contribuição para a química de *C. jamacaru*.

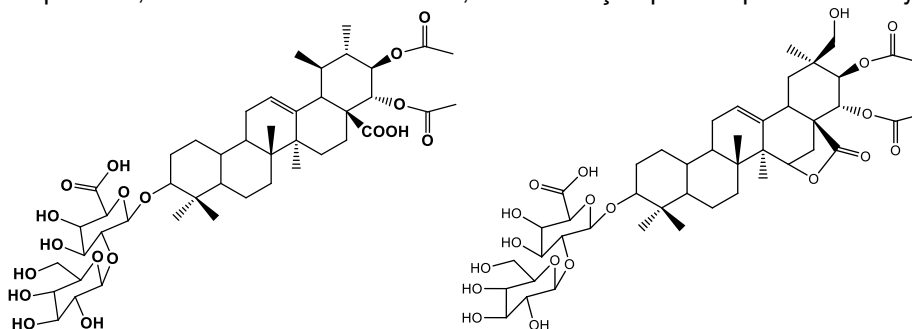


Figura 01: Substâncias isoladas de *C. jamacaru*.

Ref: TSASI, G.; SAMARA, P.; TSITSILONIS, O.; JURGENLIEMK, G.; & SKALTSA, H. (2016). Isolation, Identification and Cytotoxic Activity of Triterpenes and Flavonoids from Green Walnut (*Juglans regia* L.) Pericarps. *Records of natural products*, 83-92p.

Agradecimentos/Acknowledgments

Agradecimentos ao CNPq e CAPES (COD:001) pelo financiamento

Área: INO

(Inserir a sigla da seção científica para qual o resumo será submetido. Ex: ORG, BEA, CAT)

Nº de Inscrição: 01561

(Inserir o número de inscrição do autor que fez a submissão)

Synthesis of trivalent rare earths co-doped $\text{LaAlO}_3:\text{Cr}^{3+}$ nanoparticles with infrared persistent luminescence

Douglas L. Fritzen (PG)*,¹ Lucas C. V. Rodrigues (PQ),¹

douglas.fritzen@usp.br;

¹Departamento de Química Fundamental, IQ-USP;

Palavras Chave: *persistent luminescence; NIR; lanthanum aluminate; rare earths; nanomaterials;*

Highlights

New material co-doped with Cr^{3+} and RE ions with NIR persistent luminescence. Optimization of a combustion synthesis method to achieve $\text{La}_{1-x}\text{R}_x\text{Al}_{1-y}\text{Cr}_y\text{O}_3$ nanoparticles. Persistent luminescence of Cr^{3+} enhanced by Sm^{3+} co-dopant.

Resumo/Abstract

Most persistent luminescent materials has its emission at blue-green region (400 - 550 nm). Near Infrared (NIR) emitters are rare and often very expensive or inefficient. These NIR emitting materials have great potential for applications on energy storage and bioimaging. For an efficient application of NIR emitters, their luminescence should persist for hours after ceasing the charging with visible light irradiation. On this project, we developed nanoparticles of $\text{La}_{1-x}\text{R}_x\text{Al}_{1-y}\text{Cr}_y\text{O}_3$ (R: trivalent rare earth ion i.e. Y, Ce-Lu) with persistent luminescence at near infrared region. The nanoparticles were obtained by an optimized combustion synthesis, where high temperatures can be reached in few seconds and nanoparticles are easily obtained. Cr^{3+} were used as activator at NIR region (~736 nm) whereas R^{3+} co-dopants were applied aiming to intensify the persistent luminescence of the material. X-Ray diffractions showed that synthesized particles are a pure and crystalline perovskite (figure 1); Emission and excitation spectrum (figure 2), as high energy absorption spectrum (figure 3), were measured and depicts a high peak at 736 nm, characterized as the chromium intra configurational transitions $d-d^2E \rightarrow ^4A_2$. Sm^{3+} showed the best results acting as a co-dopant, and improved the material's persistent luminescence at 736 nm when irradiate at its band gap energy (~5,5 eV).

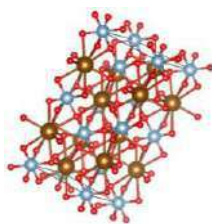
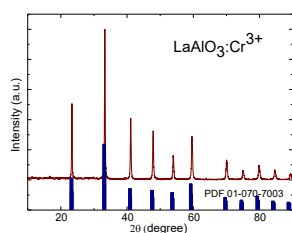


Fig. 1 Fig. 1 (left) XRD pattern of $\text{LaAlO}_3:\text{Cr}^{3+}$ of the optimized combustion synthesis and reference pattern of PDF#01-070-7003; (right) the LaAlO_3 perovskite cell.

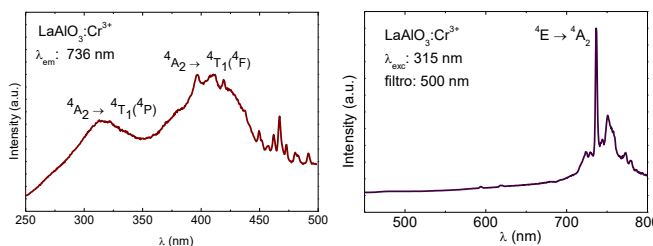


Fig. 2 (left) excitation spectra with λ_{em} : 736 nm and (right) emission spectra with λ_{exc} : 315 nm of $\text{LaAlO}_3:1,0\%\text{Cr}$ at room temperature

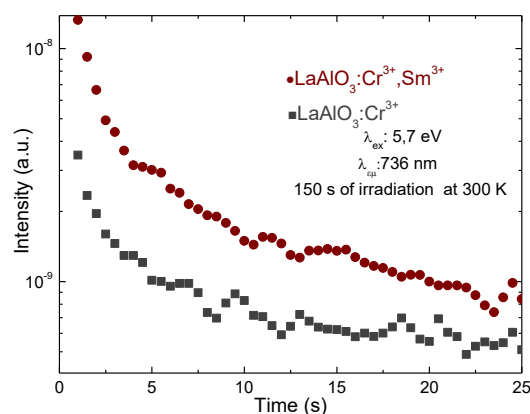


Fig. 3 Persistent luminescence lifetime for $\text{LaAlO}_3:1,0\%\text{Cr}$ (gray) and $\text{LaAlO}_3:1,0\%\text{Cr},0,5\%\text{Sm}$ (red). Excitation at 5,7 eV and excitation monitored at 736 nm, with 150 seconds of irradiation at 300 K.

Área: INO

Nº de Inscrição: 01562

Cellular uptake of a Cu(I)-phosphine complex in breast tumor and non-tumor cells

Legna Colina-Vegas (PQ),^{1*} Wilmer Villarreal (PQ),¹ Alzir Azevedo Batista (PQ),¹ Joaquim Araújo Nóbrega¹

esleg_24@hotmail.com

¹Departamento de Química, UFSCar.

Keywords: copper complex, cytotoxicity, cell death, ICP-MS

Highlights

The synthesis, characterization, cell death mechanism and the intracellular accumulation by inductively coupled plasma mass spectrometry of a Cu(I) phosphine complex is presented.

Abstract

Pt-based drugs as anticancer agents have clinical success against various types of cancer such as ovarian, head, neck, lung, testicular and bladder. Many more metal-based complexes have been synthesized with enhanced safety and cytotoxic profile. In this context, the copper is one of the most attractive metals because is an essential cellular element necessary for many biological pathways. Cytotoxic effects of copper-based complexes have been investigated based on the assumption that endogenous copper may be less toxic in the human body but remaining the biological activity against tumor cells.¹ In this work is presented the synthesis of the compound with general formula $[\text{Cu}(\text{CTZ})_2(\text{PPh}_3)_2]\text{PF}_6$ (PPh_3 is triphenylphosphine and CTZ is Clotrimazole)² and its characterization by elemental analyses, IR, 1D and 2D ^1H , $^{13}\text{C}\{^1\text{H}\}$ and $^{31}\text{P}\{^1\text{H}\}$ NMR, UV-Vis spectroscopy and cyclic voltammetry. The ability of the Cu(I) compound to inhibit the proliferation of selected human tumor and non-tumor cell lines was determined by the colorimetric MTT assay, showing between 10- and 40-fold higher cytotoxic than the free ligands and the positive control cisplatin. Additionally, this copper complex induces morphological changes, loss of adhesion, inhibition of colony formation, cell cycle arrest and a mechanism of cell death by apoptosis in the breast tumor cell line MDA-MB-231. Once the previous comprehension on the cytotoxic profile of the Cu(I) compound in this tumor cell line, we determined its cellular uptake properties in the whole cell by inductively coupled plasma mass spectrometry (ICP-MS). The MDA-MB-231 cells were incubated with $7 \mu\text{mol L}^{-1}$ of the Cu(I) compound during 24 h. At this time, the cells were washed with Milli-q water, trypsinized, pelleted and digested by three decompositions methods: alkaline digestion (TMAH), acid digestion (HNO_3 14 mol L^{-1}) and microwave-assisted digestion (HNO_3 2 mol L^{-1}). The intracellular quantitative values were 17.8 ± 0.1 , 16.6 ± 0.1 and $16.6 \pm 0.2 \mu\text{g L}^{-1} \text{ }^{65}\text{Cu}$ per 10^6 cells and the limits of detection calculated were 0.4, 0.6 and $0.6 \mu\text{g L}^{-1}$, respectively. It was possible to obtain a Cu(I) phosphine compound with relevant activities in tumor cells, establish the concentration/time at which the cells were exposed to the compound for the metal determination of the cellular absorption by ICP-MS. The concentrations of Cu determined in the whole tumor cell using acid digestions assisted by microwave radiation and TMAH were more efficient than the acid digestion at room temperature (conventional).³

References

- ¹Santini, C.; Pellei, M.; Gandin, V.; Porchia, M.; Tisato, F.; Marzano, C. *Chem. Rev.* **2014**, 114, 815.
²Gagini, T.; Colina-Vegas, L.; Villarreal, W.; Borba-Santos, L.P.; Pereira, C.S.; Batista, A.A.; Fleury, M.K.; de Souza, W.; Rozental, S.; Costa, L.A.S.; Navarro, M. *New J. Chem.* **2018**, 42, 13641.
³Egger, A.E.; Rappel, C.; Jakupec, M.A.; Hartinger, C.G.; Heffeter, P.; Keppler, B.K. *J. Anal. At. Spectrom.*, **2009**, 24, 51.

Acknowledgments

Legna Colina-Vegas is thankful to grant #2016/23130-5, São Paulo Research Foundation (FAPESP).

Área: ORG

Nº de Inscrição: 01563

Synthesis of a Novel Chiral Catalyst Based on Thioproline and Thiourea to be applied in Asymmetric Michael Reaction

Flávia R. Alvares (IC),¹ Frederico R. C. Noronha-Jr²(PG);, Sabrina Baptista Ferreira (PQ),² Tiago Lima da Silva¹ (PQ)

tiagolds@iq.ufrj.br; flavia.rodrigues@hotmail.com

1) LACASO, Laboratory of Catalysis and Organic Synthesis, Chemistry Institute, Federal University of Rio de Janeiro, CEP 21941-909

2) Laboratory of Organic Synthesis and Biological Prospecting, Chemistry Institute, Federal University of Rio de Janeiro, CEP 21941-909

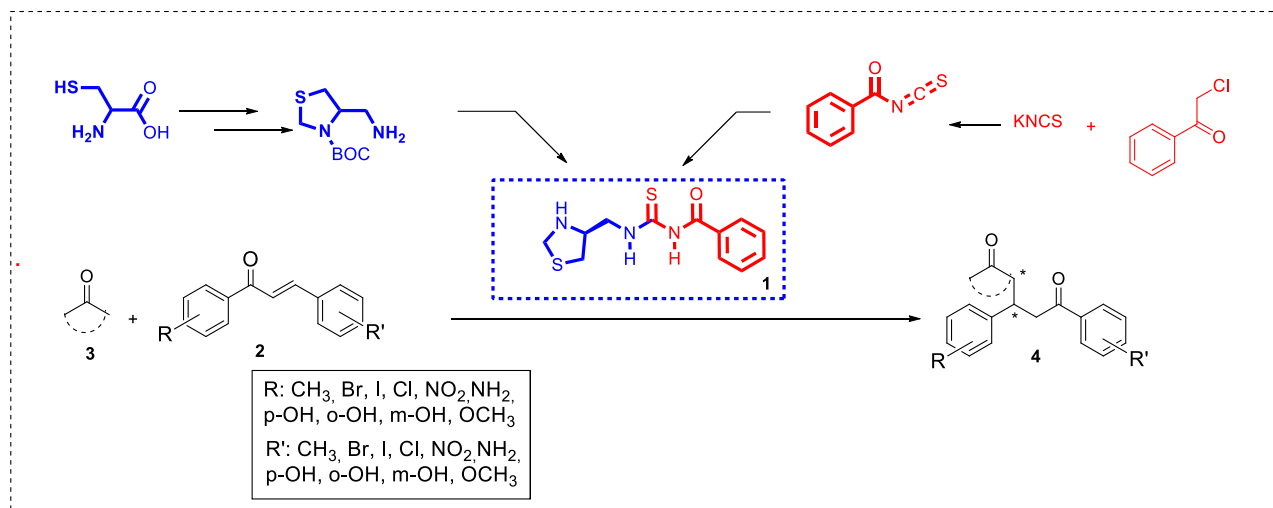
Keywords: Thiazolidine; Thiourea, Chalcones, Asymmetric Michael

Highlights

Bifunctional catalysts based on thiourea have shown to be efficient in promoting asymmetric reactions. In this work we propose the development of an asymmetric methodology to afford a library of Michael adducts.

Abstract

Organocatalysis remains an efficient methodology to synthesize chiral molecules in high enantiomeric and diastereoisomeric ratio. L-thioprolinone is an L-proline analogous in structure and applications in asymmetric catalysis. The catalyst based on thiourea and L-thioprolinone **1** activates electrophile **2** through hydrogen bonding and the nucleophile **3** via enamine. However, in this work different chalcones **2** in face off different ketones **3** are going to be used as Michael acceptor to obtain enantioenriched and diastereo enriched Michael adducts **4**. These new enantioenriched compounds **4** have potential application on medicinal chemistry, mainly against tuberculosis. Then, this work aim to develop a novel asymmetric methodology to afford chiral Michael adducts through the use of new catalyst based on thiazolidine and benzoylthiourea.



Scheme 1. Synthesis of new catalyst and application on asymmetric Michael reaction.

1. (a) Nayak, S.; Chakrobarty, S. *et al. Res. Chem. Int.* **2016**, 42, 2731.

Acknowledgments

The authors gratefully acknowledge the financial support from the CNPq, CAPES, FAPERJ and UFRJ.

An ultrathin film membrane based on a nano-channeled reduced graphene oxide with enhanced antibacterial properties

Maura Mancinelli (PQ)*¹, Eduarda I. de Castro (IC)², Camila M. Maroneze (PQ)², Giovanni Di Bonaventura (PQ)³, Annalisa Martucci (PQ)¹, Jairo J. Pedrotti (PQ)², Gianluigi Rosatelli (PQ)⁴, Arianna Pompilio (PQ)³, Nei C. O. Sousa (PQ)²

¹ Department of Physics and Earth Sciences, University of Ferrara, via Saragat 1, 44122, Ferrara, Italy; maura.manci@hotmail.it

² Mackgraph - Graphene and Nanomaterials Research Center, Mackenzie Presbyterian University, Rua da Consolação, 896 - São Paulo, SP – CEP 01302-907; eduardaorio@hotmail.com

³ Department of Medical, Oral and Biotechnological Sciences; “GEOMED”, Center of Excellence on Aging and Translational Medicine; “G. d’Annunzio”; University of Chieti-Pescara, Via Luigi Polacchi 11, 66100 Chieti, Italy;

⁴ Department of Psychology, Health and Territory Sciences; “GEOMED”, Center of Excellence on Aging and Translational Medicine; “G. d’Annunzio” University of Chieti-Pescara.

Keywords: reduced graphene oxide · copper hydroxide nanowires - membranes · antibacterial activity

Highlights

- Synthesis with a rapid, economic and environmentally sustainable method.
- Excellent antibacterial activity for environmental, industrial and biomedical applications.

Abstract

The aim is to meet the global need for the development of environmentally compatible, energetically efficient and rapid materials, in reference to more efficient water purification technologies for waste water and industrial waste [1]. The antibacterial properties preclude the formation of fouling and preventing the closing of the pores, increase the performance of the membranes, the life time of the materials and the cost in maintenance. These prerogatives could be satisfied by exploiting the considerable characteristics of graphene, together with its characteristics to be an ultrathin, ultralight and supported by an economical sustainable production, that together with the antibacterial properties found makes it suitable too for the biomedical field.

The synthesis of the material covers a green economy principle (innovation-sustainability-research). The structure of the film membrane is of few layers (2-5 layers), with a single layer thickness of about 0.420 µm and in the total of 1.059 ± 0.200 µm (Fig.1). The image 1b shows in detail the membrane surface and the porosity left by the copper nanowires introduced during the synthesis and then leached through chelating agent. The bactericidal properties of the membrane were tested, in liquid medium [2], against four multi-drug resistant clinical isolates, representative both for Gram-positive (*Staphylococcus aureus* Sa2) and Gram-negative (*Escherichia coli* APN1, *Pseudomonas aeruginosa* PaPh32 and AC12a) species (Fig.2).

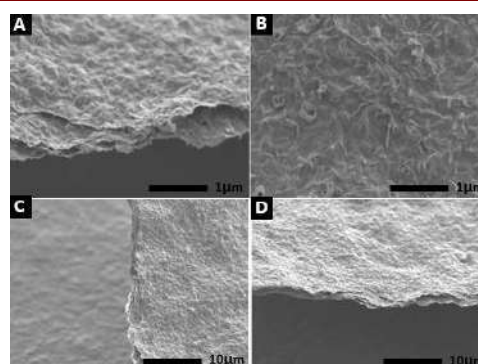
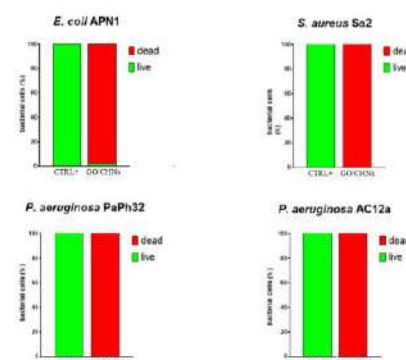


Figure 1 - SEM of the nanoporous and ultrathin GO-CHNs membrane.



| | <i>E.coli</i> APN1 | | <i>S. aureus</i> Sa2 | | <i>P. aeruginosa</i> PaPh32 | | <i>P. aeruginosa</i> AC12a | |
|--------|--------------------|----------|----------------------|----------|-----------------------------|----------|----------------------------|----------|
| | live (%) | dead (%) | live (%) | dead (%) | live (%) | dead (%) | live (%) | dead (%) |
| CTRL+ | 100 | 0 | 100 | 0 | 100 | 0 | 100 | 0 |
| GOCHNs | 2 | 98 | 0 | 100 | 0 | 100 | 0 | 100 |

Figure 2 - Membrane activity against Gram-positive and Gram-negative clinical isolates. The results are reported as % killing, indicating the percentage of the inactivated bacterial population in red, while the vital one in green. The percentages of killing obtained are in the table.

References

1. Huang H. et al., Nature Communications, vol. 4, 1-9 (2013).
2. Bykkam et al., International Journal of Advanced Biotechnology and Research, vol. 4, 142-146 (2013).

Acknowledgment: Mackpesquisa, FAPESP, University “G. d’Annunzio” of Chieti-Pescara.

Separação HILIC em cromatografia por injeção sequencial: estudo da retenção de bisfenol A e melamina e sua determinação em alimentos

Mariana R. Gama (PQ)¹, Camilla Fonseca Silva (PG)², Fábio R.P. Rocha (PQ)¹

mrgama@usp.br

¹Centro de Energia Nuclear na Agricultura, Universidade de São Paulo; ²Universidade Federal de São João Del-Rei

Palavras Chave: Interações hidrofílicas, SIC, Core-shell, Interferentes endócrinos, Adulterantes, Alimentos.

Highlights

Hydrophilic interaction separation mode in sequential injection chromatography: study of retention of melamine and bisphenol A

Implementação pioneira do modo HILIC de separação em cromatografia por injeção sequencial (SIC).

Separação eficiente de melamina, espécie pouco retida em cromatografia líquida em fase reversa.

Menor consumo de solvente orgânico em HILIC-SIC-UV em comparação à HILIC-HPLC-UV

Resumo/Abstract

A cromatografia por injeção sequencial (SIC, do inglês *Sequential Injection Chromatography*) é uma técnica de separação em que colunas cromatográficas são acopladas a sistemas de análise por injeção sequencial. SIC opera a baixas pressões (máx. 500 psi) e, para isto, requer o emprego de fases estacionárias de alta permeabilidade, como colunas monolíticas ou recheadas com partículas superficialmente porosas. O uso de SIC frequentemente resulta em análises rápidas, com baixo consumo de solventes e redução na geração de resíduos. O modo de separação HILIC (do inglês *Hydrophilic Interaction Liquid Chromatography*) emprega como fases estacionárias suportes cromatográficos - sílica ou polímeros - modificados por grupos funcionais polares e fases móveis compostas por uma mistura de água e um solvente polar aprótico, em geral acetonitrila (ACN), em proporção igual ou superior a 70%. HILIC é um modo de separação alternativo, indicado para compostos polares, que apresentam baixa retenção em fase reversa. O objetivo deste trabalho foi implementar o modo HILIC pioneiramente em SIC e avaliar os perfis de retenção de bisfenol A e melamina. Objetiva-se, também, a exploração dessa alternativa para a determinação de melamina em matrizes complexas, já que esta espécie não é eficientemente retida em fase reversa. Para tanto, uma coluna hidrofílica OH5 recheada por partículas superficialmente porosas (Supelco Ascentis Express, 2,7 μm , 30 x 4,6 mm i.d.) foi empregada, utilizando-se diferentes composições de fase móvel (entre 10 e 90% ACN, v/v) a uma vazão de 7 $\mu\text{L s}^{-1}$ e volume de injeção de 20 μL . A detecção espectrofotométrica foi realizada em 210 nm em uma cela de fluxo em Z, de volume de 9,0 μL . O perfil de retenção observado para a melamina em coluna OH5 foi compatível com o modo HILIC, em que o aumento da fração orgânica na fase móvel ocasiona o aumento da retenção de um analito polar (Figura 1). Isso ocorre porque, em HILIC, a força de eluição da fase móvel diminui com o aumento da porcentagem de ACN, fazendo com que o analito fique mais retido. A retenção do bisfenol A não foi alterada com a mudança da fração orgânica na fase móvel, indicando não concordância com o modo HILIC. Esta diferença de retenção entre melamina e bisfenol A é concordante com os diferentes valores de log P para ambos os compostos: -1,4 e 3,3, respectivamente. Quanto menor o log P, mas hidrofílico é um composto e, portanto, mais retido em HILIC. Um método em HILIC-SIC-UV foi desenvolvido para a determinação de

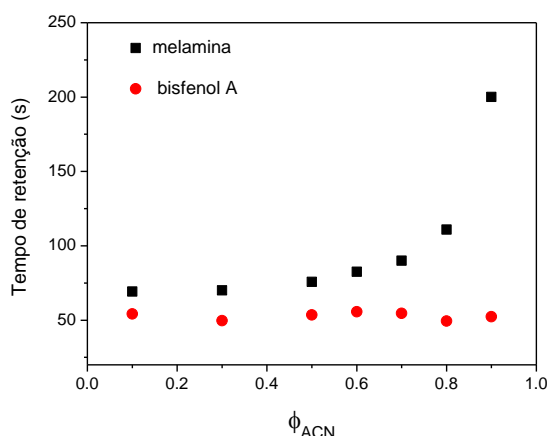


Figura 1. Perfil de retenção usando HILIC-SIC em coluna OH5.

melamina em leite, empregando ACN/água 70:30 (v/v) como fase móvel. A curva analítica mostrou linearidade entre 2,0 e 6,0 mg L^{-1} e LOD e LOQ foram estimados em 0,07 e 0,20 mg L^{-1} , respectivamente. Recuperações de 85% foram estimadas para amostras de leite bovino integral fortificadas com 5,0 mg L^{-1} de melamina. HILIC foi aplicado com sucesso em SIC para a determinação de melamina em leite, com redução no consumo de solvente orgânico (3,0 mL de ACN por determinação versus 39 mL em métodos cromatográficos tradicionais).

Agradecimentos/Acknowledgments

Dr. M.R. Gama agradece à FAPESP pela bolsa de pós-doutorado (processo 2017/ 08611-0).

DFT study on structure of defects related to persistent luminescence

Artur Aldi (IC)¹, Lucas Colucci Ducati (PQ)¹, Lucas Carvalho Veloso Rodrigues (PQ)¹.

artur.aldi@usp.br

¹Departamento de Química Fundamental, Instituto de Química, USP

Palavras Chave: DFT, Defect Structure, Stability of Defects, Persistent Luminescence.

Highlights

DFT study on structure of defects related to persistent luminescence. Correlation between defect energy and Schottky Pair distance. Effect of chemical environment of Schottky pair atoms on the stability of defects. Cadmium metasilicate most stable defects.

Resumo/Abstract

Persistent luminescence, and many other properties that a crystalline solid can have, are determined by the presence of defects in its structure. This creates the necessity of studying the imperfections that may be present in a given material, a task which includes not only characterizing the defect but also determining its concentration. In this regard, computational simulations are of great use because they permit the study on the effect of individual defects. This allows a more detailed analysis of imperfections in materials, the correlations involved in it and even opens the way for elucidating persistent luminescence mechanisms.

In the literature of persistent luminescence, studies on cadmium metasilicate are scarce when compared to other lattices, which are usually doped with Eu^{2+} ions, even though its properties are of great interest, as it is capable of emitting light in almost the entire visible spectrum, depending on its dopants.

DFT calculations were done using the Quantum Espresso plane waves package, and two sets of pseudopotentials were chosen: (1) USPP&NCPP, and (2) PAW. Supercell calculations were run with High Performance Computing services offered by LNCC.

In this presentation, we are going to show new observations and discoveries about the nature of defects, how the stability of imperfections relates to the distance between the atoms that constitute the Schottky Pair and to its chemical environment. Our results show that great linearity between energy and distance is observed, but only when defects made of atoms of same chemical environments are compared. It will also be shown which are the most stable defects in the cadmium metasilicate lattice.

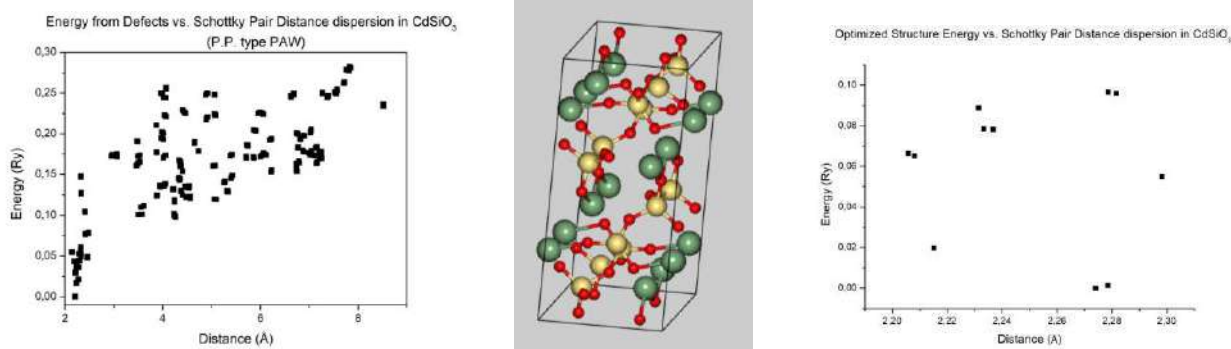


Figure: (left) Dispersion of defect energy (calculated with P.P type PAW) vs Schottky Pair Distance; (middle) picture of cadmium metasilicate unitary cell; (right) Energy of optimized structure vs. Schottky pair distance dispersion.

References:

[1] – RODRIGUES, Lucas Carvalho Veloso. BRITO, Hermi Felinto. HÖLSA, Jorma. STEFANI, Roberval. FELINTO, Maria C.F.C. LASTUSAARI, Mika. LAAMANEN, Taneli. NUNES, Luiz A.O. *Discovery of the Persistent Luminescence Mechanism of CdSiO₃:Tb³⁺*. J. Phys. Chem. C, 2012, 116, 11232–11240.

Agradecimentos/Acknowledgments

CNPq, Fapesp, LNCC.

Área: ANA

Nº de Inscrição: 01568

Modelagem da remoção de azul de metileno por carvão ativado de borra de café em micro coluna de leito fixo

Giulio W. Ferreira (IC)¹, Alessandra Stevanato (PQ)¹ e Janksyn Bertozzi (PQ)¹janksynbertozzi@utfpr.edu.br; giulio1616@live.com¹Departamento de Química, Universidade Tecnológica Federal do Paraná – Câmpus LondrinaPalavras Chave: *Micro coluna de leito fixo, Parâmetros termodinâmicos, Isoterma de adsorção.*

Highlights

Modeling of methylene blue removal by activated coffee leak coal in fixed bed column. The experiments were performed using the innovative micro column technique the results follow Thomas's model. In the optimized condition, 623.78 mg g⁻¹ methylene blue was adsorbed

Resumo

A utilização de resíduos gerados na produção de café solúvel para tratamento de efluentes tornou-se foco de interesse para muitos engenheiros e ambientalistas em todo o mundo. No presente estudo, foi produzido carvão ativado a partir de borra de café sendo empregado como adsorvato de baixo custo para remoção da molécula de azul de metileno, usado como modelo. Os experimentos de adsorção foram realizados a 293,15K utilizando micro colunas de 2 mm 10 mm de diâmetro, contendo 5 mg de carvão ativado. A solução de azul de metileno foi utilizada na concentração de 30 mg L⁻¹. Neste estudo avaliou-se as vazões de 1,0; 0,9; 0,8; 0,7 e 0,6 mL min⁻¹. Utilizou-se a técnica estatística ANOVA de um único fator para constatar o desempenho das vazões e a modelagem matemática proposta por Thomas, Yoon-Nelson e Adams-Bohart para estudar o desempenho e a capacidade de adsorção da coluna. Os experimentos para compreender as interações moleculares da coluna se deram pela construção da isoterma de adsorção, variando a concentração entre 10, 20, 30, 40 e 50 mg L⁻¹ de azul de metileno, mantendo a vazão 0,8 mL min⁻¹ e temperatura em 293,15K. Os parâmetros termodinâmicos foram obtidos variando a temperatura entre 293,15; 298,15; 303,15; 308,15 e 313,15 K; dimensões do micro cartucho 2,0 x 10 mm e concentração de 30 mg L⁻¹. Os dados foram testados utilizando a modelagem de Langmuir, Freundlich, Dubinin-Radushkevich, Temkin, Flory-Huggins, Hill, Redlich-Peterson e Sips. Para a verificação do mecanismo cinético, utilizou-se os dados coletados para os testes de vazão e como modelagem foi usada pseudo-segunda ordem e intra-partícula. A partir de uma análise dos resultados obtidos e da técnica ANOVA, conclui-se que a vazão 0,8 mL min⁻¹ é a mais adequada ao processo de adsorção. A modelagem matemática do sistema segue o modelo de Thomas apresentando um bom ajuste para os dados experimentais obtidos. A isoterma demonstrou que os dados experimentais se ajustam melhor aos modelos de Redlich-Peterson e Flory-Huggins, pois consideram que um sítio ativo tem capacidade de acomodar mais de uma molécula. Os parâmetros termodinâmicos demonstram que o processo de adsorção segue uma interação exotérmica e o processo é espontâneo. A cinética de adsorção ao longo de todo o processo teve um bom ajuste na modelagem cinética intra-partícula. Quanto ao desempenho do leito fixo, os resultados obtidos mostram uma capacidade de adsorção de 623,78 mg g⁻¹ na vazão 0,8 mL min⁻¹.

Agradecimentos/Acknowledgments

À Universidade Tecnológica Federal do Paraná, campus Londrina.

ISOPRENOIDES E ATIVIDADE ANTILEISHMANIA DO EXTRATO ETANÓLICO DAS FOLHAS DE *Combretum mellifluum* Eichler

Jaelson dos S. Silva (PG),^{1*} Mariana H. Chaves (PQ),¹ Amanda M. Lima (PG),¹ Ruth Raquel S. de Farias (PQ),¹ Gerardo M. V. Júnior (PQ),¹ Bruno Q. Araújo (PQ)¹

jaelson.silva@ifma.edu.br*; mariana@ufpi.edu.br

¹Departamento de Química, UFPI

Palavras Chave: *Combretum mellifluum*; triterpenoides; esteroides; atividade antileishmania.

Highlights

Triterpenoids and steroids were isolated and identified from the leaves of *Combretum mellifluum*. Antileishmania activity was evaluated.

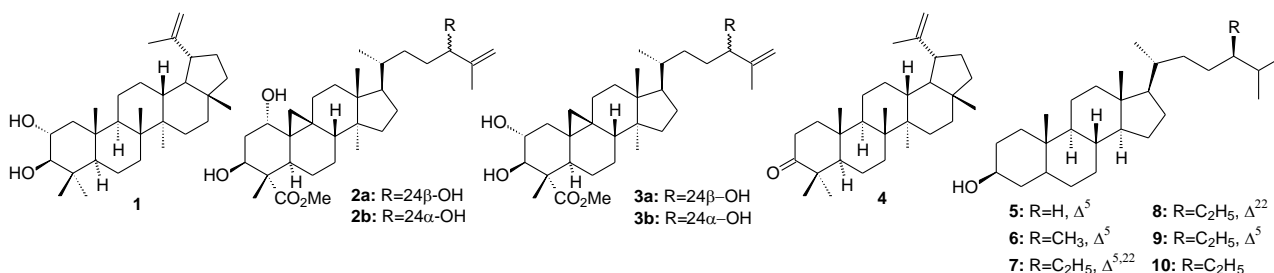
Resumo/Abstract

Combretum mellifluum Eichler (Combretaceae) é uma espécie não endêmica do cerrado brasileiro, conhecida popularmente como cipó, cipó vermelho e sipaúba. A espécie *C. mellifluum* possui indicação no tratamento de dores de cabeça, dores no estômago e tosse¹.

O extrato etanólico das folhas foi submetido à partição fornecendo as frações hexânica (FHex), acetato de etila (FAcOEt), aquosa (FAqu), precipitado (Fppt) e sobrenadante (FSbn). As frações FSbn e FHex foram submetidas a métodos cromatográficos clássicos em colunas de gel de sílica, C18 e Sephadex LH-20. O fracionamento de FSbn resultou no isolamento dos triterpenoides lup-20(29)-en-2 α ,3 β -diol (**1**) e duas misturas epiméricas de quatro novos triterpenoides do tipo cicloartano **2a+2b** e **2a+2b+3a+3b**, elucidados como quadrangularato M de metila (**2a**), 24-epiquadrangularato M de metila (**2b**), 2 α ,3 β ,24 β -trihidroxi-cicloart-25-eno de metila (**3a**) e 2 α ,3 β ,24 α -trihidroxi-cicloart-25-eno (**3b**). Os compostos obtidos a partir da fração FHex foram a lupenona (**4**) e uma mistura de seis esteroides, identificados como derivados sililados: colesterol (**5**), campesterol (**6**), estigmasterol (**7**), Δ^{22} -estigmasterol (**8**), sitosterol (**9**) e sitostanol (**10**). As estruturas dos compostos isolados foram identificadas e/ou elucidadas por métodos espectroscópicos de RMN ¹H e ¹³C uni e bidimensionais, CG-EM, EMAR e comparação com dados relatados na literatura^{2,3,4}.

O composto **1** está sendo relatado pela primeira vez na família Combretaceae e os epímeros **2a/2b** e **3a/3b** são inéditos na literatura.

O EEtOH, FAqu, FHex, e **2a+2b** apresentaram moderada inibição no crescimento de *Leishmania amazonensis*, enquanto a FSbn foi mais ativa apresentando concentração inibitória (CI₅₀) de 31,29 μ g mL⁻¹.



Agradecimentos: CNPq pelas bolsas e apoio financeiro.

¹Nascimento, J. M.; Conceição, G. M. BioFar. **2011**, 2, 138.

²Banskota, A. H.; Tezuka, Y.; Tran, K. Q.; Tanaka, K.; Saiki, I.; Kadota, S.; J. Nat. Prod. **2000**, 63, 57.

³Thang, T. D.; Kuo, P. C.; Huang, G. J.; Hung, N. H.; Huang, B. S.; Yang, M. L.; Luong, N. X.; Wu, T. S.; Molecules, **2013**, 18, 4477.

⁴Ferreira, E. L. F.; Mascarenhas, T. F.; Oliveira, J. P. C.; Chaves, M. H.; Araújo, B. Q. Cavalheiro, A. J.; J. Med. Plant Res. **2014**, 6, 353.

Área: CAT Nº de Inscrição: 01570

Niobium-based modified materials and its particularities as semiconductors for photocatalysis

Iza F. B. Silva (FM),^{1*} Tatiana A. R. dos Santos (PG),² Marcelo G. Rosmaninho (PQ),³ Flávia C. C. Moura (PQ).²

izafonte@cefetmg.br

¹Departamento de Formação Geral, CEFET-MG; ²Departamento de Química, UFMG; ³Departamento de Química, UFOP

Palavras Chave: *Niobium(V) oxide, Semiconductors, Photocatalysts, Decontamination, Sulfide.*

Highlights

This work aims to clarify the properties of niobium(V) oxide so that it can be applied efficiently in photocatalysis reactions, increasing the market value of this important Brazilian product.

Resumo/Abstract

The world considers Niobium as a strategic metal because of its diverse technological properties and applications. According to the Brazilian Mining Institute (IBRAM), Brazil is the largest producer of niobium-based products in the world, and it is of great importance to explore the potential of these compounds. The proposal of this work is the synthesis, characterization and careful study of materials based on niobium(V) oxide, a very abundant material in Brazil, to better understand and unveil their photocatalytic activity. In the past 75 years, several studies have reported the physical properties of niobium oxides, but there is still a lot of contradictory, inconsistent, and insufficient information about these metal oxides. Despite the known potentialities of niobium oxides and many types of niobates, in various technological applications, the understanding of these oxide systems is still notoriously insufficient. The available literature reveals that niobium oxides are a complex system, with many phases and polymorphs, and many works report contradictory or inconsistent information. More specifically, stoichiometry problems are one of the most common complications in niobium oxides and in many different niobates, where the NbO₆ octahedra are typically the basic structural units.

In this context, we have synthesized niobium-based materials modified with cobalt, nickel, zinc and methylene blue, in different ways, to study their properties and test the activity in photocatalysis reactions. The synthesis of the materials was done following the Evaporation Induced Self-Assembly (EISA) method, followed by calcination at 673 K.

Diffuse reflectance spectroscopy (DRS) was able to show the bandgap's changes. In general, it was possible to note that the change in the material structure induces a significant variation in bandgap ($\Delta E_g = 0.5$ eV). The mesoporous materials had a lower value of E_g and the modifications only decreased this value when Nb₂O₅ (n-type semiconductor) was coupled with p-type semiconductors (such as NiO and Co₃O₄). In addition, it was possible to propose that the transition of these materials occurs by indirect allowed type (or direct prohibited). On the other hand, the materials containing cobalt and methylene blue showed strong absorption in the visible region (approximately 1.5 and 1.7 eV, respectively), which makes these materials potential candidates for photocatalysts activated by sunlight. By the materials diffraction patterns (XRD) and by transmission electron microscopy (TEM), it is possible to notice that the materials have nanocrystalline domains. This "amorphous" structure gives better photocatalytic activity when compared to more crystalline materials. TEM also showed the mesopores present in the material. X-ray fluorescence (XRF) showed that the compounds used in the modification are in very small amounts to cause a significant structural modification in the initial mesoporous Nb₂O₅. Still, the modifications were enough to alter its semiconductor properties, which was the goal in the first place. Initial studies have shown that these materials have high activity of sulfides photooxidation with the formation of sulfate and elemental sulfur.

Agradecimentos/Acknowledgments

The authors would like to acknowledge CEFET-MG, CNPq, CAPES, FAPEMIG and INCT-Midas for financial support and the Center of Microscopy at UFMG for MET/EELS analyses.

Área: EDU

Nº de Inscrição: 49492

CONTEXTUALIZANDO O TEMA MODELO ATÔMICO DE BOHR COM A FLORESCÊNCIA PARA O ENSINO MÉDIO

Wellina N. santana (IC),¹ Diego G. de Sousa (IC),² Priscila F. de Oliveira (IC),³ Rita de C. S. di Pace (IC),⁴ Alisson de L. Xavier (IC),¹ Elaine da S. Vasconcelos (PG).

wellinansantana@gmail.com; diegogomees28@gmail.com; priscilafarias@hotmail.com;
ritinhadipace@hotmail.com; xdhamil13@gmail.com; elainvsquimica@hotmail.com

¹Licenciatura em Química, IFPB; ² Licenciatura em Química, IFPB; ³ Licenciatura em Química, IFPB; ⁴ Licenciatura em Química, IFPB, Doutorado, UFPB.

Palavras Chave: *Ensino de Química, Modelos atômicos, Fluorescência.*

Highlights!

CONTEXTUALIZING THE BOHR ATOMIC MODEL THEME WITH FLOWERING FOR MIDDLE SCHOOL. Teaching Chemistry, Atomic Models, Fluorescence. An experiment was carried out contextualizing the subject of fluorescence using the Bohr atomic model as an explanation, in an attempt to improve the student learning process.

Resumo/Abstract

Frequentemente a disciplina de Química é apresentada em sala de aula na tentativa de expor fórmulas, definição de leis, conceitos e resoluções de exercícios. O que pode torna-la uma disciplina mecânica e decorativa podendo ser prejudicial no processo de ensino- aprendizagem. Assim, fica claro que o uso da experimentação no ensino de Química é uma ferramenta capaz de tornar essa disciplina atraente. Diante disso, uma pesquisa foi realizada com o objetivo de realizar um experimento abordando de forma contextualizada o tema de fluorescência utilizando o modelo atômico de Bohr como explicação, na tentativa de melhorar o processo de aprendizagem dos alunos, além de fazê-los perceber que os fenômenos químicos podem ser percebidos em seu cotidiano. A atividade foi na escola estadual Professora Argentina Pereira Gomes localizada na cidade de João Pessoa. Para um total de 50 alunos do 1º ano de ensino médio, com duração de 120 minutos. A atividade mostrou que a utilização de experimentos como metodologia de ensino é capaz de transformar os alunos em questionadores/argumentadores e deixam de ser observadores, sendo assim, estimulados. A aprendizagem se dá de forma eficiente quando algumas condições são atendidas, como o interesse, a habilidade de compartilhar experiências e a habilidade de interagir com os diferentes contextos. Os objetivos propostos foram alcançados, uma vez que foi possível motivar os alunos durante explanação do conteúdo, com um tema de importância e que pode ser compartilhado em outro lugar além da sala de aula.

Agradecimentos/Acknowledgments

IFPB

Área: ANA

Nº de Inscrição: 01572

Determinação de estanho em ossos de ratas Wistar por GFAAS acoplado a um gerador de hidretos.

Rebeca L. Oliveira (IC),^{1*} Honerio C. Jesus (PQ),¹ Ian V. Silva (PQ),² Jones B. Graceli (PQ),² Charles S. Costa (PG),³ Oscar M.S. Niño (PG).³

rebecalirioo@gmail.com; honerio2@yahoo.com.br

¹Departamento de Química, ²Departamento de Morfologia, ³Departamento de Ciências Fisiológicas, UFES

Palavras Chave: Estanho, HG-GFAAS, TBT, Estanano, Hidretos, Ossos

Highlights

Determination of tin in bones of Wistar rats by hydride generation coupled to GFAAS. Wistar rats exposed for 15 days to TBT. Optimization of the hydride generation coupled to GFAAS technique. A concentration of 10 mg Kg⁻¹ tin was achieved in the bones treated with 500 ng kg⁻¹ day⁻¹.

Resumo/Abstract

O estanho se destaca na utilização comercial de seus compostos organometálicos, os quais são constantemente estudados, devido às suas características tóxicas. O Tributilestanho (TBT) é o organoestânico de maior notabilidade, em razão do seu acúmulo na biota como consequência de ter sido amplamente utilizado como biocida em tintas anti-incrustantes. O TBT pode ser detectado, após intoxicação, em diversos tecidos biológicos, como fígado, rins, ovários, útero e coração. Entretanto, estudos sobre a acumulação de estanho, proveniente do TBT, em ossos de ratos são escassos. Dessa forma, o presente estudo teve como objetivo a determinação de estanho total em ossos de ratas Wistar com a técnica de geração de hidretos acoplada à espectrometria de absorção atômica no forno de grafite (HG-GFAAS). Em comparação às outras técnicas a HG-GFAAS tem a vantagem de separar o analito da matriz na unidade de geração de hidretos e pré-concentrar esse analito no tubo de grafite, com posterior atomização do analito com um programa de forno otimizado. Isso confere maior seletividade e sensibilidade ao método.

As ratas foram expostas, durante 15 dias, a três tipos de tratamentos orais distintos: um tratamento controle – não exposto ao TBT – e outros dois tratamentos com concentrações diferentes de TBT (100 ng Kg⁻¹ dia⁻¹ e 500 ng Kg⁻¹ dia⁻¹). Quatro métodos de digestão para os ossos foram testados para a avaliação da eficiência de decomposição da amostra, dois deles utilizando micro-ondas para o aquecimento e os outros dois com bloco digestor, utilizando a mistura combinada de ácido nítrico com peróxido de hidrogênio ou com ácido clorídrico. Os primeiros parâmetros otimizados da técnica de HG-GFAAS foram os provenientes da formação do estanano, obtendo-se uma vazão de borohidreto de 19 mL min⁻¹ e uma solução redutora de 2% (m v⁻¹) de NaBH₄ em meio de 0,5% (m v⁻¹) de NaOH, após a verificação de algumas vazões e concentrações diferentes. Depois verificou-se a acumulação dos hidretos, alguns modificadores foram testados, sendo que o irídio 1000 mg L⁻¹ apresentou o melhor resultado. Verificou-se também a vazão do gás carreador e distância da ponteira de titânio ao tubo de grafite, onde, respectivamente, vazão nula de gás carreador e distância de 1,4 mm mostraram um maior sinal. Por fim, avaliaram-se os parâmetros de detecção do método, que envolve a etapa de atomização e parâmetros espectroscópicos, gerando os melhores resultados com temperatura de atomização de 2100 °C e linha espectral de 286,5 nm.

Como resultado conseguiram-se bons sinais para a determinação de estanho com HG-GFAAS; contudo, os resultados obtidos para os ossos controle e para o tratado com menor concentração de TBT não foram completamente confiáveis, por efeito destes estarem próximos ao limite de detecção do método e alto background devido a matriz de hidroxiapatita. Obteve-se uma concentração de aproximadamente 10,2 mg Kg⁻¹ de estanho nos ossos tratados com 500 ng Kg⁻¹ dia⁻¹; 0,20 mg Kg⁻¹ para os ossos tratados com 100 ng Kg⁻¹ dia⁻¹ e 0,08 mg Kg⁻¹ para os ossos controle. Esses valores foram similares a outros obtidos pela técnica de ICP-MS por um laboratório externo (PUC-RJ) – 9,0 mg Kg⁻¹ de estanho nos ossos tratados com 500 ng Kg⁻¹ dia⁻¹ e 0,06 mg Kg⁻¹ para os ossos controle.

Agradecimentos/Acknowledgments

Ao Departamento de Morfologia da UFES pela parceria e pelo fornecimento das amostras. À Universidade Federal do Espírito Santo pelo espaço e recursos disponibilizados.

Evaluation of photoderivatization as a tool for the fluorimetric determination of strobilurins

Camila C. Valério (IC),¹ Everson F. Barbosa (IC),² Dayana E. U. S. Siqueira (PQ),³ Joseany Almeida (PQ),³ Ricardo Q. Aucélio (PQ),³ Rosana C. Macedo (PQ),¹ Alessandra L. M. C. da Cunha (PQ).^{2*}

camilacamposvalerio@gmail.com; alessandra.cunha@ifrj.edu.br

¹Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia do Rio de Janeiro, Campus Realengo; ²Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia do Rio de Janeiro, Campus Rio de Janeiro; ³Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro.

Keywords: Fungicides, Strobilurins, Photoderivatization, Fluorescence.

Highlights

Photoderivatization as tool produced a stable fluorophore from strobilurins.
Significant induction of fluorescent signal for: KRESO, TRIF and AZO.
Alternative green method with less residue generation.

Abstract

Strobilurins are one of the most commercialized fungicide classes today, not only for their efficiency in pest control, but also for the physiological effect of their application. In order to better control the use of these substances, the development of simple, sensitive and selective analytical methodologies, together with the minimum generation of residues is fundamental. In this context, the present work evaluates the applicability of photoderivatization as a tool for the fluorimetric determination of strobilurins. The disruption of substituent groups of normal chains or the cyclization of the molecule of interest by UV radiation can produce a greater fluorescent quantum efficiency derivative and cause structural modifications in the analyte that are different from those caused in a concomitant interfering substance. In this preliminary study, seven strobilurins were evaluated: azoxystrobin (AZO), kresoxim-methyl (KRESO), trifloxystrobin (TRIF), fluoxastrobin (FLUO), pyraclostrobin (PYRA), picoxystrobin (PICO) and dimoxystrobin (DIMO). Aqueous solutions (1×10^{-6} mol L⁻¹) were prepared in acetonitrile/ultrapure water (90/10% v/v) and the measurements were performed under three conditions (reaction medium of the analyte solution): (1) original, (2) acid (pH 4.0) and (3) basic (pH 10.0). Afterwards, the solutions were exposed to UV radiation for 70s (reactor of own manufacture - LEEA PUC-Rio). The measurements were made by spectrofluorimetry Perkin Elmer LS45. The conditions and fluorescence signal intensities (a.u.) are in Table 1. Better results were obtained for KRESO, TRIF and AZO, respectively after UV treatment (Figure 1). Based on the promising results, the kresoxim-methyl was chosen as analyte of interest (gain of 2820% after UV exposure) for optimization and validation studies. The best experimental condition in excitation/emission wavelengths (371/435 nm) was: pH 8.0, UV exposure time of 45s and acetonitrile/ultrapure water (50/50% v/v), with LOD 10^{-8} mol L⁻¹ and CV < 5%. These results point to the photoderivatization associated with fluorimetric detection as a tool for the development of innovative methods for analysis of some strobilurins, eliminating the use of toxic reagents generally required in the chemical derivatization process.

Table 1: Fluorescent signal intensities (a.u.) of the evaluated strobilurins prepared in three pH conditions: (1) original, (2) acid and (3) basic, before and after 70s of UV exposure.

| Strobilurin | Fluorescent signal intensities, a.u. | | | | | |
|-------------|--------------------------------------|-------|-------|-------------------|-------|-------|
| | Before UV exposure | | | After UV exposure | | |
| | 1 | 2 | 3 | 1 | 2 | 3 |
| AZO | 262 | 211 | 211 | 757 | 445 | 586 |
| KRESO | 50 | 38 | 48 | 1460* | 126 | 1370* |
| TRIF | 71 | 88 | 80 | 285 | 259 | 633 |
| DIMO | 105 | 89 | 79 | 174 | 189 | 155 |
| PICO | 86 | 102 | 71 | 152 | 100 | 80 |
| FLUO | 79 | 74 | 74 | 96 | 96 | 77 |
| PYRA | 5936* | 3498* | 3300* | 277 | 4000* | 698 |

* Signals adjusted after using transmittance filters and/or sample dilution.

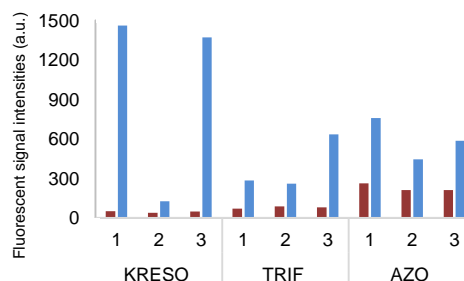


Figure 1: Fluorescent signal intensities (a.u.) of the promising strobilurins. Solutions prepared in three pH conditions: (1) original, (2) acid and (3) basic, before (red) and after (blue) 70s of UV exposure.

Acknowledgments

CNPq, PUC-Rio e IFRJ.

Área: INO Nº de Inscrição: 335403

Influência da metodologia sintética para a obtenção de um novo cluster metálico de Cu(I) a partir de Cu(II).

Nathália R. de Campos (PG),¹ Antônio C. Doriguetto (PQ),¹ Ana Karoline S. M. Valdo (PG)², Felipe T. Martins(PQ)², Maria Vanda Marinho (PQ).¹

nathaliarodriguescampos@yahoo.com.br; maria.marinho@unifal-mg.edu.br

¹Instituto de Química, Universidade Federal de Alfenas, Campus Santa Clara, Alfenas, MG, 37130-001, Brazil;

²Instituto de Física, Universidade Federal de Goiás, Campus Samambaia, Goiânia, Go, 74690-900, Brazil;

Keywords: coordination complex, dpss ligand, copper(I), Single-crystal X-ray diffraction.

Highlights

Influence of the synthetic methodology to obtain of a new copper(I) metallic cluster from copper(II).

- Preparation of a new copper(I) hexanuclear cluster by diffusion;
- Influence of the nitrogen ligand in the reduction reaction;
- Single-crystal X-ray diffraction.

Resumo

Estudos relacionados ao controle da metodologia sintética na obtenção de novos materiais têm promovido grande interesse e aumento nas pesquisas. Muitos fatores de influência desses sistemas têm sido relatados, resultando no estabelecimento de conceitos modernos em Engenharia de Cristal e Química Supramolecular, liderando o desenvolvimento de novas estratégias sintéticas resultando em materiais moleculares com propriedades interessantes.¹ A combinação de ligantes nitrogenados envolvendo sais de cobre(II), tem tornado uma rota potencial para a construção de novos compostos.² Em, geral, o ligante nitrogenado como o dissulfeto de di(2-piridila) (2-dpss), escolhido neste trabalho, atua de forma quelato bidentado formando complexos de coordenação ou macrociclos discretos. Assim, aqui, nós apresentamos um novo cluster metálico de fórmula $Cu_6(C_5H_4NS)_6$ (**1**), onde uma solução do sal de cobre(II) foi adicionado a uma solução do ligante nitrogenado dissulfeto de di(2-piridila) (2-dpss) por difusão lenta. A estrutura cristalina de **1** revelada por difração de raios X mostra a decomposição do ligante 2-dpss ($C_{10}H_8N_2S_2$) no ligante Py-S⁻ (C_5H_4NS)⁻, levando a redução do cobre(II) a cobre(I). Cada centro de Cu(I) apresenta-se pentacoordenado sendo o plano basal composto por dois átomos de enxofre e dois outros centros metálicos de Cu(I). A posição apical é ocupada por um átomo de nitrogênio do ligante Py-S. Além da difração de raios X por um monocristal (MXRD) (Figura 1), **1** foi caracterizado FTIR, TG / DTA e PXRD (Figura 2) e todas as análises estão de acordo com a estrutura determinada pelo MXRD. A análise térmica mostrou uma estabilidade até próximo a 200 °C, corroborando com a ausência de moléculas de água como solventes de cristalização ou coordenação.

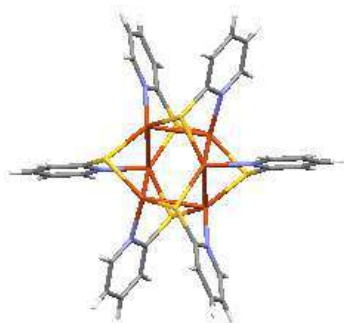


Figura 1: Vista do "cluster" apresentada pelo composto 1.

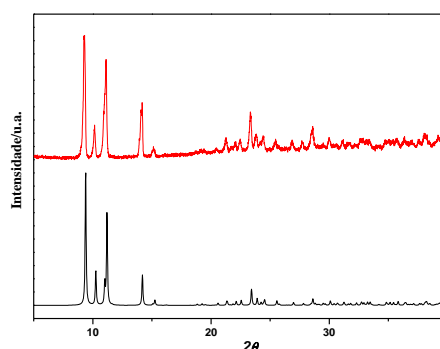


Figura 2: Difratomogramas experimental e simulado de 1.

¹ Feng, P. L.; Beedle, C. C.; Koo, C.; Wernsdorfer, W.; Nakano, M.; Hill, S.; Hendrickson, D. N. *Inorg. Chem.*, **2008**, *47*, 3188.

² Marinho, M. V.; Yoshida, M. I.; Guedes, K. J.; Krambrock, K.; Bortoluzzi, A. J.; Hörner, M.; Machado, F. C.; Teles, W. M. *Inorg. Chem.*, **2004**, *43*, 1539.

Agradecimentos

Unifal, Fapemig, CNPq, Capes, FINEP (ref.134/08).

Área: EDU

Nº de Inscrição: 49491

A PERCEPÇÃO DOS LICENCIANDOS EM QUÍMICA SOBRE A CONTRIBUIÇÃO DAS TIC'S UTILIZADAS DURANTE AS AULAS

¹Jonatas M. C. Silva (IC), ² Diego G. de Sousa (IC), ³ Priscila F. de Oliveira (IC), ⁴ Rita de C. S. di Pace (IC), ⁵ José L. C. (IC), F Edvaldo A. S. Correia (PQ)¹.

jonatasdaniel007@gmail.com; priscilaf03@hotmail.com; rita.pace@academico.ifpb.edu.br; diegogomees28@gmail.com; edvaldo.amaro@gmail.com; flaleo2012@gmail.com.

¹Licenciatura em Química, IFPB; ²Licenciatura em Química, IFPB; ³Licenciatura em Química, IFPB; ⁴Licenciatura em Química; ⁵Licenciatura em Química; ^{1*} Doutor, IFPB.

Palavras Chave: Tic's, Ensino de Química; Metodologia de Ensino

Highlights

THE PERCEPTION OF LICENSING IN CHEMISTRY ON THE CONTRIBUTION OF ICT USED DURING CLASSROOMS. Tic's, Teaching Chemistry; Teaching Methodology. The work evaluated the use of technologies such as classroom teaching in the IFPB of the Chemistry course.

Resumo/Abstract

É perceptível que existem dificuldades apresentadas pelos alunos de licenciatura em Química na compreensão dos conteúdos explorados ao longo do curso. Diante dessa realidade, alunos do instituto juntamente com os professores buscam meios de facilitar e aperfeiçoar o processo de ensino-aprendizagem e as tornaram mais acessíveis aos estudantes do curso. As Tecnologias da Informação e Comunicação, são um conjunto de recursos tecnológicos capazes de proporcionar melhor comunicação e automação do ensino através das pesquisas direcionadas. A utilização desse recurso valoriza as práticas pedagógicas, pois auxiliam o acesso a informação. A relevância das TIC's foram comprovadas através de entrevistas empregando a técnica de observação direta intensiva, pela aplicação de formulários de caráter semiestruturado, contendo questões abertas e fechadas. O trabalho propôs avaliar o modo como se usa os métodos tecnológicos em sala de aula por meio de um questionário respondido pelos discentes do curso contendo perguntas sobre a importância dessa ferramenta. Na análise de dados, utilizou-se uma abordagem qualitativa, com a finalidade de avaliar conhecimento e opiniões a respeito. A avaliação mostrou que as TIC's podem auxiliar na construção do conhecimento e que é necessário utilizá-las como instrumento de apoio nas práticas pedagógicas de ensino aprendizagem, pois facilitam a assimilação dos conteúdos. Assim, podemos afirmar que as TIC's são um recurso didático que pode ser utilizado para motivar e facilitar o interesse no ensino de Química.

Agradecimentos/Acknowledgments

IFPB

Core-shell nanofibers as drug carriers for transdermal delivery of drugs with antimalarial activity

Laura Rebouças (PG)^{1*}, Ana Paula S. Immich (PQ)² e Luiz Henrique Catalani (PQ).¹
lauraoreboucas@gmail.com; catalani@usp.br

¹Instituto de Química, USP; ²Departamento de Engenharias, Campus Blumenau, UFSC

Key Words: Malaria, Coaxial fibers, Transdermal device, Controlled drug delivery, Electrospinning, nanofibers.

Highlights

Malaria treatment is long and grueling, hampering patient adherence. A transdermal device would facilitate the treatment and improve effectiveness. Core-shell electrospun fibers are proposed as device to control the drug release.

Resumo/ Abstract

The treatment of malaria requires great dedication from the patient, where the medicine needs to be ingested for several days, compromising patient adherence to the treatment - especially children - with a high recurrence rate¹. Thus, this project aims the development of a patch for transdermal device to administrate antimalarial drugs, including Artemether-Lumefantrine² combination, as well as a melatonin derivative³. The main component of the device is a core-shell polymeric system, where the core contains the drug and the shell acts as barrier to control the delivery over several days.

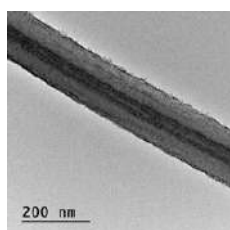


Fig. 1. TEM images of core-shell nanofibers

Core-shell and monoaxial nanofibers of PET/PCL were prepared and are being used to test the release profile of the drug. As shown in Figure 1, it was possible to prove that the fibers have core-shell architecture. The contrast between core and shell was enhanced by the addition of gold nanoparticles synthesized *in situ* for a better dispersion, reducing H₂AuCl₄ with NaBH₄ in core solution before electrospinning.

α -Tocopherol was chosen as one of the model drugs since its Log P (8.84) is very similar to Lumefantrine (8.34). The release profile for this drug in a core-shell nanofiber (PET as shell and PCL as core) is shown in Figure 2. This assay was held for 48h, using a Franz cell system, with a cellulose acetate membrane as barrier. These results set the next step, which are the testing using a pig ear skin as barrier to analyze the skin penetration capacity and the Artemether-Lumefantrine combination.

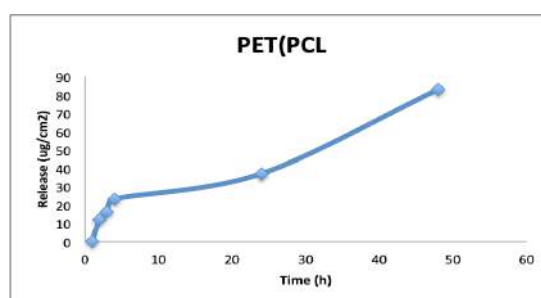


Fig. 2. Release profile of α -Tocopherol.

¹Laloo, D.G. et al., 2016. *J Infect* (2016). 1-15

²Balducci, A.G. et al., 2015. *J Drug Deliv Sci Tec*, 32, 1–7.

³Schuck, D.C. et al., 2014. *Eur J Med Chem*, 78, 375–382.

Agradecimentos/Acknowledgments

CAPES, FAPESP and University of São Paulo

Área: MED

(Inserir a sigla da seção científica para qual o resumo será submetido. Ex: ORG, BEA, CAT)

Nº de Inscrição: 01577

(Inserir o número de inscrição do autor que fez a submissão)

Comparative protein modelling of trypanosomatid epigenetic targets

Renan A. Gomes* (PG),¹ **Marcelo D. Polêto** (PG),² **Hugo Verli** (PQ),² **Gustavo H. G. Trossini** (PQ),¹

renan2.gomes@usp.br

¹ Department of Pharmacy, FCF-USP; ² Department of Molecular Biology and Biotechnology of Institute of Biosciences, UFRGS

Palavras Chave: Protein modelling, Sirtuin 2, Epigenetics, Chagas disease, Sleeping sickness

Highlights

Tertiary structures of *Trypanosoma cruzi* and *T. brucei* sirtuin 2 were constructed using three different tools and were evaluated by 12 different methods.

Abstract

The sirtuins 2 (Sir2) of pathogens of the trypanosomatidae family were validated as a therapeutic target by *in vitro* assays (1). Thus, the trypanosomiasis Chagas disease and sleeping sickness began to have a greater perspective of a new drug being developed. The objective of the present study was to generate reliable tertiary structure models of *Trypanosoma cruzi* and *T. brucei* Sir2 to support drug design studies, since their tertiary structures have not been determined experimentally yet. From the primary structures available in databases, the softwares Modeller, I-Tasser and RaptorX were used to generate the models by comparative modeling. For evaluation, 12 tools were used to comparatively analyze the models to structures of similar size present in databases, as well as individually for the backbone and lateral chains (2). The results of the best Sir2 model of each pathogen (figure 1) are in agreement with structural data of other organisms, evidencing the reliability of the structural information obtained.

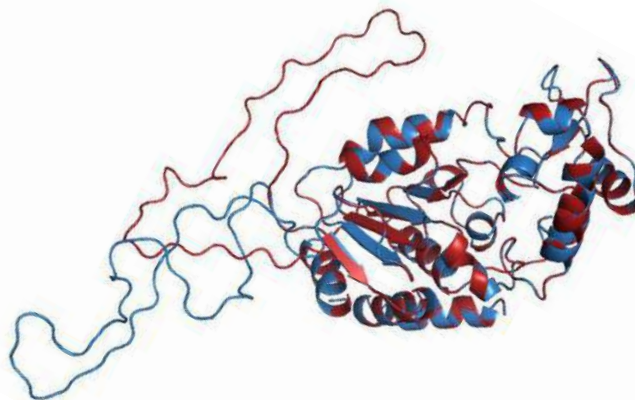


Figure 1. Best Sir2 models of each pathogen

References:

1. ZHENG, Weiping. Sirtuins as emerging anti-parasitic targets. *European journal of medicinal chemistry*, 2013, 59: 132-140.
2. LAM, Su Datt, et al. An overview of comparative modelling and resources dedicated to large-scale modelling of genome sequences. *Acta Crystallographica Section D*, 2017, 73.8: 628-640.

Acknowledgments

The author would like to thank the National Council for Scientific and Technological Development (CNPQ) and FAPESP (2017/25543-8) for the financial support for the work.

Área: ORG

Nº de Inscrição: 01579

Chemical modification of glycerol by etherification in acid homogeneous phase: a study of selectivity

Débora M. Kochepka* (PG),¹ Angelo R. S. Oliveira (PQ),¹ Maria Aparecida F. César-Oliveira (PQ),¹ Claudiney S. Cordeiro (PQ)¹

mafco@ufpr.br; deborakochepka@gmail.com

¹Departamento de Química, UFPR

Key words: Glycerol valorization, Etherification, Selectivity, Dodecanol, Glycerol monoalkyl ether.

Highlights

1. Glycerol etherification was studied by experimental design in a batch reactor coupled to distillation system.
2. Selectivity of substitution at C1 and C2 of glycerol molecule was performed from GCMS data.
3. Ether yields of 35% were obtained in 3 h of reaction.

Abstract

Glycerol, a coproduct of biodiesel production, has several uses, as wetting agent, solvent as well as a building block for other molecules. In recent years, chemical modification of this triol has been increased and it is called a key raw material for many industrial chemical processes. Valuable products, like glyceryl alkyl ethers, can be obtained and applied as fuel additives, besides to have biological activity (Monteiro *et al.*, 2019). Moreover, it should be mentioned that the size of the carbon chain that functionalizes glycerol may determine the new molecule properties, for instance long chain alcohols, such as dodecanol, give rise to products that can be used in recycling of polymers, specially glyceryl monoether for the chemical recycling of poly(ethylene terephthalate) (PET). In this case, the interesting is that when the glycerol monoethers are introduced in PET this can improve the material stability because ether bonds in the glycerol derivative are more stable to hydrolysis than the correspondent ester bonds derivatives of PET. Only low yields of ethers produced from glycerol are found in the literature. Therefore, in this study, the synthesis of glycerol ethers was performed with 60 mmol of glycerol, 15 mmol of dodecanol and 20 % of dodecylbenzenesulfonic acid (DBSA). The catalyst was removed from reaction medium through elution in an A26 resin and after one sample was analyzed by GCMS to calculate glyceryl monododecyl ether (GMDE) and dodecyl ether (DOE) contents produced. Main results from this investigation are summarized in Table 1.

Table 1. Experimental conditions and results of 2³ factorial design of the optimization of glycerol monoetherification with dodecanol.

| Reaction | Temp. ^a | MR ^b | Cat. ^c | GMDE ^d | C2 | C1 | DOE ^e |
|------------------|--------------------|-----------------|-------------------|-------------------|------|------|------------------|
| 1 | -1 | -1 | -1 | 9.10 | 2.11 | 7.44 | 10.1 |
| 2 | -1 | -1 | +1 | 3.30 | 4.71 | 11.3 | 29.8 |
| 3 | -1 | +1 | -1 | 8.90 | 0.24 | 7.15 | 8.60 |
| 4 | -1 | +1 | +1 | 12.5 | 3.98 | 10.6 | 14.1 |
| 5 | +1 | -1 | -1 | 12.1 | 0.95 | 9.79 | 13.1 |
| 6 | +1 | -1 | +1 | 14.8 | 1.14 | 12.2 | 35.1 |
| 7 | +1 | +1 | -1 | 9.70 | 0.00 | 7.81 | 9.80 |
| 8 | +1 | +1 | +1 | 23.0 | 8.35 | 19.3 | 23.5 |
| 9 ^{cp} | 0 | 0 | +1 | 15.7 | 4.45 | 12.9 | 18.9 |
| 10 ^{cp} | 0 | 0 | 0 | 12.5 | 5.61 | 10.5 | 14.3 |
| 11 ^{cp} | 0 | 0 | 0 | 13.3 | 4.79 | 11.0 | 14.9 |

Temperature in Celsius degrees; ^b Molar ratio of glycerol:dodecanol; ^c Catalyst percent in relation to the glycerol mass; ^d Glyceryl monododecyl ether content (m/m); ^e Dodecyl ether content; ^{cp} Center point.

This study showed that the reaction has selectivity to the production of GMDE substituted on carbon number 1 (C1). Moreover, the study of the reaction time monitoring showed that GMDE and DOE yields increase until 3 h of reaction, however, GMDE achieves the content maximum of 35% in 3 h and, after this its content decreases, while enhances the DOE production. Therefore, it was pointed that the glyceryl monoalkyl ether is the faster formed product, whereas dodecyl ether is the more stable one.

Acknowledgments

The authors would like to thank to CNPq, CAPES, UFPR, DQUI/UFPR and PPGQ/UFPR.

Optimization of optical and photocatalytic properties of silver tungstates and molybdate crystals

Jussara R. Fratelli (PQ*),¹ Luis H. Amorim (PQ),¹ Victor Y. Suzuki (IC),¹ Felipe de A. La Porta (PQ)

jussarafratelli@gmail.com

1- Federal Technological University of Paraná, Laboratory of Nanotechnology and Computational Chemistry, avenida dos Pioneiros 3131, 86036-370, Londrina, PR, Brazil

Palavras Chave: *Properties, Morphology, Synthesis.*

Highlights

Strategies to improve the physical characteristics of versatile materials, such as silver tungstates and silver molybdates, increase applicability and lead to the development of new technologies.

Resumo/Abstract

Compositional and morphological structural changes of Ag_2WO_4 and Ag_2MoO_4 crystals can contribute to enhancing properties and characteristics of these materials.[1,2]. In this paper, we evaluate the structural, optical and photocatalytic properties of $\text{Ag}_2\text{W}_{1-x}\text{Mo}_x\text{O}_4$ compounds in different concentrations of W and Mo. The $\text{Ag}_2\text{W}_{1-x}\text{Mo}_x\text{O}_4$ microcrystals have been synthesized via the co-precipitation method. This particular method was chosen due to its simplicity easy scalability and also by the good control of the desired characteristic for our work. We obtained in all cases polycrystalline materials of light yellow-color to light-brown that were characterized by the powder X-ray diffraction (XRD), photoluminescence (PL) and diffuse reflectance UV/VIS spectroscopies [3,4]. The XRD results obtained in Figure 1 shows all peaks exhibited a small enlargement suggest a high degree of crystallographic disorder at long-range. Additionally, the Rietveld refinement method has been employed in this study to quantify the composition of these prepared microcrystals. The catalytic activities were assessed through the analysis of decomposition of H_2O_2 . Diffuse reflectance UV/Vis results show energy values of "optical gap band" between 3,0 eV a 3.2 eV obtained by treatment of the spectra with the equation of Kubelka and Munk [6]. PL emission banda at room-temperature likely is due to diferente structural distortions of these crystals[4,6]. We conclude that changes promoted by the synthesis of materials with different concentrations cause significant structural changes and provide interesting properties for new applications.

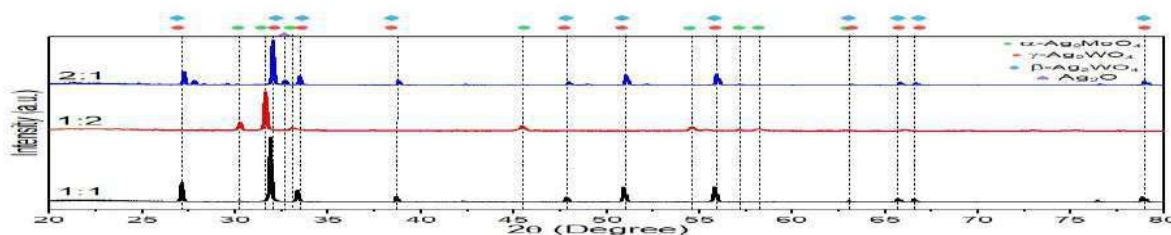


Fig 1 – XRD patterns of $\text{Ag}_2\text{W}_{1-x}\text{Mo}_x\text{O}_4$ microcrystals prepared in different concentrations of W and Mo.

REFERENCES

- [1] Miguel, TG; et al. ChemElectroChem, 2019.
- [2] Souza, GDS et al. 2018 – repositório.ufpi.br
- [3] Longo, E et al, 2018, repositório.uji.es
- [4] Cavalcante, LS et al. Royal Society of Chemistry, 2016

Agradecimentos/Acknowledgments

UTFPR; NANOQC; CNPQ; CAPES; FUNDAÇÃO ARAUCÁRIA.

Área: MAT

Nº de Inscrição: 01581

Study of Sulfonated Nanocellulose Beads as Potential Immunosorbents

Igor Rocha (PQ),^{1,2*} Mirna Diniz (IC),² Yocef Hattori (PG),² Natalia Ferraz (PQ),² Albert Mihranyan (PQ),² Maria Strømme (PQ),² Jonas Lindh (PQ).²

igurocha88@gmail.com; igurocha88@gmail.com

¹Instituto de Química, Universidade de São Paulo; ²Nanotechnology and Functional Materials, Engineering Sciences, Uppsala University

Palavras Chave: *Cladophora nanocellulose, Periodate oxidation, Cellulose beads, Surface properties, Biomaterials, Hemocompatibility.*

Highlights

The specific aims of this work were:

- To synthesize and characterize sulfonated cellulose beads and evaluate their cytocompatibility via an indirect toxicity test.
- To investigate the structure and physicochemical properties of modified cellulose beads, and to investigate how the different modifications influenced the surface properties.
- To evaluate the hemocompatibility of the sulfonated cellulose beads by means of an in vitro loop model with whole human blood.

Resumo/Abstract

Nanocellulose is a promising candidate for biomedical applications because of its enhanced mechanical properties, increased surface area and greater porosity compared to bulk cellulose. This work investigates the functionalization of *Cladophora* nanocellulose and evaluates the influence of these modifications on physicochemical properties and biocompatibility of the material. A periodate oxidation produced 10-20 μm 2,3-dialdehyde cellulose beads with very smooth and compact surfaces. This material was sulfonated up to 50% of the aldehyde groups, resulting in charged, porous structures that maintained the spherical shape. The mesoporous assembly could be tailored by altering the degree of sulfonation, which also produced variations in surface charge, ζ -potential, specific density, surface area and thermal stability. Because the physicochemical properties make these sulfonated beads potential candidates for immunosorption and blood-related applications, they were further characterized regarding hemocompatibility. In vitro studies showed that both sulfonated beads and unmodified *Cladophora* nanocellulose did not present hemolytic activity. The pro-coagulant activity of the sulfonated beads was significantly lower than that of the unmodified nanocellulose; however, the material's modifications did not diminish the activation of the complement system. The results show that it is possible to tailor the biocompatibility of *Cladophora* nanocellulose by introducing chemical modifications to its structure and by carefully tuning its physicochemical properties.

Área: EDU

Nº de Inscrição: 01582

A química do petróleo através de uma didática de ensino humanizadora

Yandrio M. S. Bezerra (IC)*, Karoline O. Dutra (IC), Viviane A. Cardoso (PQ)¹viviane.cardoso@ufr.br; yandriomartins@outlook.com¹Departamento de Química, UFRRPalavras Chave: *Contextualização, Interdisciplinaridade, Conhecimento prévio, Didática de ensino humanizadora.*

Highlights

The Chemistry of petroleum by means of a humanizing teaching. Project performed to discuss subjects concerning prejudice, and contradict the idea that Chemistry is limited to the classroom, thus distant from students' day-to-day life.

Resumo/Abstract

A tendência no processo de ensino e aprendizagem exige o uso de metodologias que estimulem a construção do conhecimento, tendo o aluno como participante ativo nesse processo. Para Miranda e Costa (2007) o aprendizado exige que o professor adote metodologias que façam relação com o contexto do aluno. Além dessa relação, a integração do conteúdo com outras disciplinas constrói pontes entre áreas diferentes, permitindo a construção de um conhecimento que ultrapasse os limites da disciplina (FAZENDA, 2003). A relação da teoria com a prática de forma investigativa, que gere problematizações por meio de experimentações é outra maneira de permitir com que o aluno participe, discuta e formule hipóteses, o que auxilia no processo de significação do mundo (GIORDAN, 1999). Dentro dessas propostas é importante que seja estabelecida também uma conexão com o tempo e o espaço social onde os alunos estão inseridos, visando a formação do cidadão e seus valores. A partir do tema "a química do petróleo", este trabalho fez uso da contextualização, interdisciplinaridade e experimentação para, através de uma didática humanizadora, promover discussões relacionadas à xenofobia, observada em Boa Vista-RR devido ao elevado fluxo de migrantes venezuelanos. O objetivo principal do trabalho foi desmistificar a ideia de a química ser uma disciplina descentralizada e distante do cotidiano, instigando o senso investigativo e crítico do aluno, a partir de problematizações e questionamentos relacionados com a formação do petróleo, sua história na sociedade, seus derivados, a química dos derivados do petróleo, a influência do petróleo na Venezuela e no mundo, dando início à debates relacionados a migração venezuelana e as formas de preconceito, especialmente a xenofobia. As atividades foram realizadas com alunos do 3º ano do ensino médio de uma escola estadual de Boa Vista-RR e foram desenvolvidas em quatro encontros. A principal dinâmica desses encontros foi de caráter discursiva, com foco na valorização do conhecimento prévio e opinião dos alunos. Através de questionários, foram coletados dados no início e final do projeto com o objetivo de avaliar a capacidade dos alunos em relacionar a química com o cotidiano e verificar se o uso de metodologias contextualizadas seriam eficazes na desmitificação das ideias iniciais dos alunos a cerca da disciplina de química. Os resultados obtidos através dos questionários indicaram que muitos alunos não conseguiam relacionar a química com o cotidiano. Entretanto, durante o desenvolvimento e ao final das atividades foi possível verificar diferenças quanto a forma de pensar, observadas no início do projeto, notando nos alunos um maior interesse pela disciplina de química e mais facilidade em relacionar os conteúdos com o cotidiano, o que indica que as metodologias utilizadas foram essenciais para facilitar o ensino e aprendizagem de química. Além disso, os alunos se mostraram mais sensíveis à situação dos imigrantes, indicando que uma didática humanizadora contribui para a formação de um cidadão mais consciente, participante de uma sociedade que requer além de conhecimento, valores.

FAZENDA, I. C. A. Interdisciplinaridade: História, Teoria e Pesquisa. Campinas: Editora Papirus, 11 ed. 2003, 143 p.

GIORDAN, M. O papel da experimentação no ensino de ciências. In: II ENCONTRO NACIONAL DE PESQUISA, 2, 1999. Anais... Valinhos: Associação Brasileira de Pesquisa em Educação em Ciências, 1999.

MIRANDA, D. G. P.; COSTA, N. S. Professor de Química: Formação, competências/ habilidades e posturas. Disponível em: <http://www.ufpa.br/eduquim/formdoc.html>. Acesso em: 14 de dez. 2018.

Agradecimentos/Acknowledgments

Universidade Federal de Roraima - UFRR

42ª Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química: Eixos Mobilizadores em Química

Emission efficiency intensification of Eu (III) ion through the formation of a new Eu(III)-Ir(III) heterobimetallic complex.

Felipe S. M. Canisares (PG),¹ Ana M. Pires (PQ),¹ Sergio A. M. Lima (PQ)¹.

fe_cani@hotmail.com; f.manrique.csar@gmail.com

¹Departamento de Química e Bioquímica, Unesp.

Palavras Chave: Lanthanoids, Europium, Iridium, heterobimetallic complexes, Luminescence, spin-orbital coupling.

Highlights

Emission efficiency intensification of Eu (III) ion through the formation of a new Eu(III)-Ir(III) heterobimetallic complex; Increase luminescence of Eu(III) by spin-orbital coupling of Iridium ion; New monocentered lanthanoids complexes; New Eu(III)-Ir(III) heterobimetallic complex.

Resumo/Abstract

Lanthanoid ions are excellent candidates for luminescent systems that demand for monochromaticity and long excited state lifetime.¹ They are constituents of oxides in inorganic matrices, or may form complexes with organic molecules, in which the luminescence process is described as antenna effect. These complexes can be used as active layers in displays, like OLEDs. Since the excited states of the lanthanide ions are sensitized mainly via the triplet state of the ligand, an alternative that may result in an increment of the emission efficiency is the use of a heavy-metal complex as an ancillary ligand. This secondary metal can increase the population of the triplet state by relaxing the spin selection rule via the strong spin-orbital coupling². In this work we used a carboxylic acid as ligand to synthesize mono-centered Eu(III) and Gd(III) complexes, with the molecular formulae $\text{Na}[\text{Eu}(\text{Fmpc})_4(\text{H}_2\text{O})_4]^+$ m/z : 1267.053, (MM: 1267.7 g/mol); $\text{Na}[\text{Gd}(\text{Fmpc})_3(\text{H}_2\text{O})_3]^+$ m/z : 1255.020, (MM: 1255.1 g/mol), where, Fmpc = Ethyl-5-trifluoro-1-phenylpyrazole-4-carboxylate. The Gd-complex was used to estimate the energy of the triplet state, as being $28,169 \text{ cm}^{-1}$, which is high enough to sensitize the $^5\text{D}_0$ excite state of Eu(III) at $17,227 \text{ cm}^{-1}$. After coordination of the Ir(III) ion to the Fmpc bridge ligand, the emission of Europium ions showed a considerable increase of the lifetime of emission, from 0.40 ms to 0.55 ms, while the quantum efficiency more than doubled, from 15 % to 36 % resulting in a shift of the color coordinates, from pinkish for the mono-centered complex to red for the heterobimetallic one, since the first have a wide emission band at the blue region along with the red emission of the Eu(III), and the second complex has only the narrow bands of Eu(III), as shown in Figure 1.

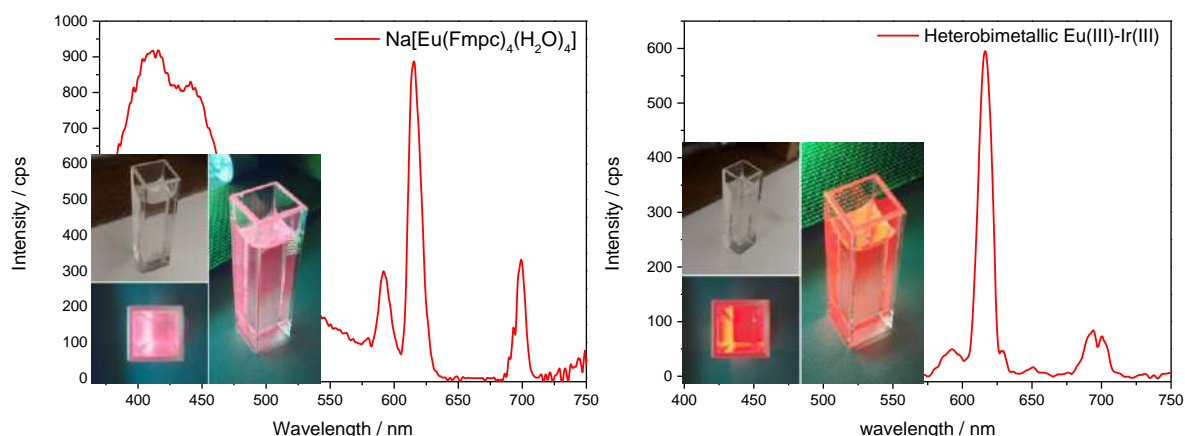


Figure 1: a) Emission spectra of (a) $\text{Na}[\text{Eu}(\text{Fmpc})_4(\text{H}_2\text{O})_4]$, and (b) heterobimetallic complex. Both in acetonitrile solution.

1 BÜNZLI, J.-C. G. E. PIGUET, C. **Chemical Society Reviews**, v. 34, n. 12, p. 1048–77, 2005.

2- THOMPSON, M. E. Et al. Organometallic Complexes for Optoelectronic Applications. In: MINGOS, D. M

Agradecimentos/Acknowledgments

FSM Canisares thanks to Capes for the scholarship.

42ª Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química: Eixos Mobilizadores em Química

Área: QPN

(Inserir a sigla da seção científica para qual o resumo será submetido. Ex: ORG, BEA, CAT)

Nº de Inscrição: 01584

(Inserir o número de inscrição do autor que fez a submissão)

Detecção dos biomarcadores presentes no óleo de copaíba pelas técnicas de HPTLC e TLC-MS.

Jessica Neves Pereira (IC)^{1,3*}, Leandro da Silva Nascimento (PG)³; Filipe Kayodè Felisberto dos Santos (PG)³; Milena Campelo F. de Lima²; Valdir Florêncio Veiga Júnior (PQ)³.

jessicanevespereira@hotmail.com

¹Federal University of Rio de Janeiro; ²Federal University of Amazonas; ³Military Engineering Institute

Keywords: Copaiba oil, TLC-MS, acid diterpenes

Highlights

Diterpenos de óleos de copaíba ainda são substâncias de difícil identificação para controle de qualidade dos óleos.

Análise de biomarcadores por HPTLC e confirmação por análise espectrométrica por TLC-MS permitiu a detecção dos diterpenos nos processos de fracionamento por coluna.

Resumo/Abstract

O óleo de copaíba apresenta atividades farmacológicas como antitumoral, antimicrobiana e cicatrizante significativas para a indústria e medicina devido a sua composição química, como os ácidos diterpênicos, de aparência resinosa e sesquiterpos voláteis. A identificação dos biomarcadores por técnicas de GC e HPLC ainda apresenta desafios nos processos de derivatização e no tempo de análise. O presente trabalho teve por objetivo analisar os biomarcadores de óleos de copaíba por HPTLC, relacionando seus fatores de retenção aos do cariofileno e do ácido copálico e confirmando as substâncias pelo uso de TLC-MS. O óleo foi fracionado por cromatografia de troca iônica em coluna de KOH, sendo coletadas frações com refinamento por zona de pH. A eficiência do processo de fracionamento pode ser acompanhada por HPTLC com padrões e confirmada por TLC-MS.

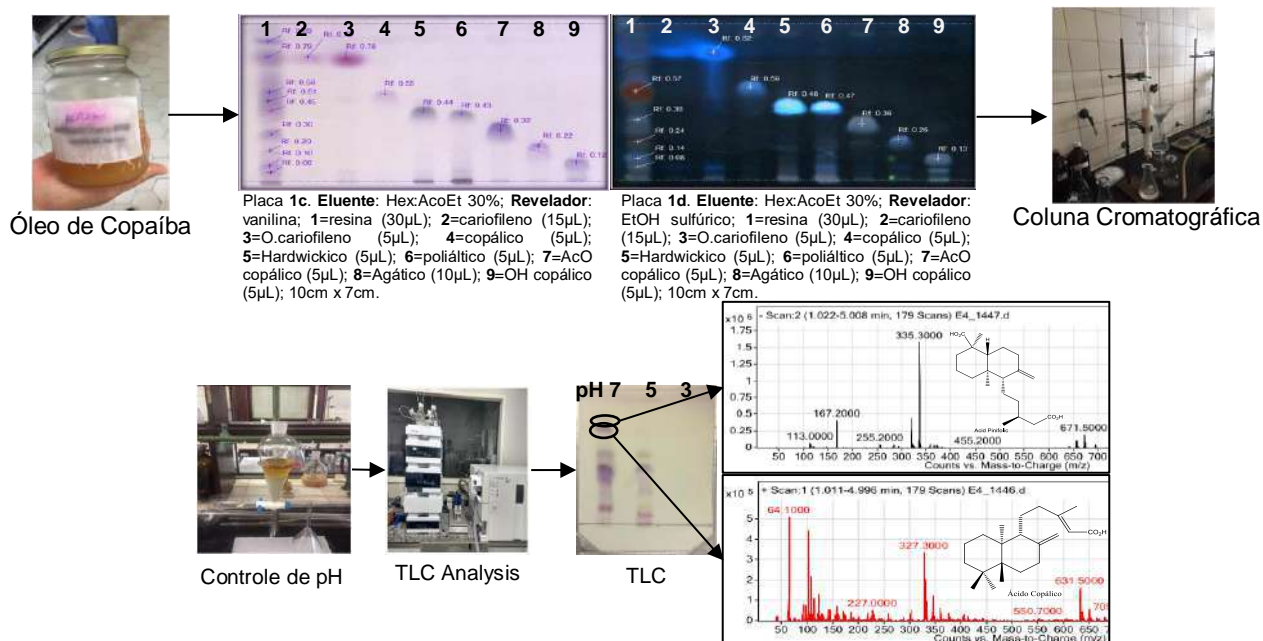


Figura 1: Fluxograma utilizado na detecção dos ácidos diterpenicos.

Os ácidos diterpênicos labdânicos copálico e pinifólico foram rapidamente identificados utilizando esta técnica, que pode ser uma importante metodologia de análise dos óleos de copaíba.

Agradecimentos/Acknowledgments

Agradecemos a CAPES e ao CNPq pelo apoio financeiro e ao Centro Tecnológico do Exército (CTEx) pelo fornecimento de equipamentos para a realização deste trabalho.

In vitro behavior and cytotoxicity evaluation of amphiphilic lipopeptide PRW-(C₁₈)₂

Karina A. B. Argüello (PG),¹ Iseli Laurenço Nantes (PQ),² Andrea M. Aguilar (PQ),³ Wendel A. Alves (PQ).^{1*}

Karina.arguello@ufabc.edu.br; wendel.alves@ufabc.edu.br

¹Laboratory of Electrochemistry and Nanostructured Materials (LEMN), UFABC; ²Laboratory of Nanostructures for biology and Advanced Materials (LNBAM), UFABC; ³Federal University of São Paulo, UNIFESP

Keywords: Lipopeptide, Nanostructures, Drug delivery, Cytotoxicity, Fluorescence microscopy

Highlights

The behavior and cytotoxicity of amphiphilic lipopeptide PRW(C₁₈)₂ was evaluated through cell viability assays using the MTT assay and fluorescence microscopy to determine cell changes, whose results agree that at low concentrations of 0.019mM this lipopeptide does not produce death in HEK293 cells, however, in concentrations of 0.089 mM the cell enters an apoptotic process.

Abstract

The synthesis of lipopeptide PRW(C₁₈)₂ has in its structure the aminoacids L-proline (P), L-arginine (R) and L-tryptophan (W), using the aminoacid glycine as a spacer to confer greater mobility to the double chain aliphatic of 18 carbon atoms. The preparation of this lipopeptide consisted of three stages, the coupling between the aminoacid Boc-glycine and the dioctadecylamine, the synthesis of the tripeptide PRW in solid phase through a series of coupling reactions using the F-moc strategy and finally the coupling between the tripeptide PRW and the aminoacid glycine bounded to the double aliphatic chain. Characterizations by LC/MS were carried out in order to verify the mass of the compound, as well as studies of cryo-microscopy of transmission that refers a globular structure with a diameter of ~ 7 nm and dispersion of x-rays at low angle (SAXS) that indicate an internal ray of 1.2 nm and an external beam of 3.6 nm for a concentration of 5mg/mL. The coupling of these peptides with molecules such as lipids and polymers provides certain advantages as potential drug carriers in the selective release of bioactive compounds because of their high encapsulation efficiency, high bioavailability and low toxicity. The cytotoxicity of this compound was evaluated in HEK293 cells using the MTT assay [3 (4,5-dimethylthiazole-2-yl) -2,5-diphenyltetrazolium bromide], in cell culture of 3.5 x 10³ cel.mL⁻¹ prepared in a 96-well plate, using a series of eight concentrations (0.019, 0.029, 0.039, 0.049, 0.059, 0.069, 0.079 and 0.089 mM) and positive and negative control, obtaining an IC₅₀ value of 0.03989 mM (Fig.1). Fluorescence microscopy studies were carried out to determine the behavior of the material in a cell culture of 7.5 x 10³ cel.mL⁻¹, a control sample was used (Fig.2. A), and cell cultures were analyzed with a material concentration of 0.019 mM (Fig. 2.B) and another concentration of 0.089 mM (Fig 2.C), which were incubated for 24 hours and labeled with Hoechst 33342, observing a change in the appearance of the nucleus for the lowest concentration and a process of apoptosis for the highest concentration which agrees with the cell viability studies.

Figure 1

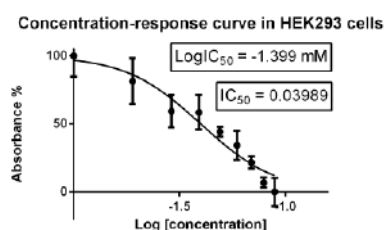
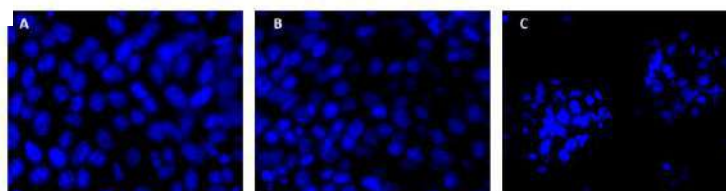


Figure 2



HEK293 cells were used as control (A), at the same time cells were cultured using concentrations of lipopeptide PRW(C₁₈)₂ in 0.019 mM (B) and 0.089 mM (C), labeled with Hoechst 33342 and the images were obtained using fluorescence microscopy after 24 h incubation

Acknowledgments



Synthesis of α -nitroketones via nitroaldol/oxidation reactions using green basic systems and PV-PCC as solid oxidant reagent

Douglas Lopes Ferreira de Souza (PG)¹, Jhonnathan Alves Moura (IC)¹, André Rodrigues Coutinho (IC)¹, Alex de Oliveira Gomes (PG)¹, Vera Lúcia Patrocínio Pereira (PQ)^{1*}

gxdouglaslopes@gmail.com; patrocinio.ufrj@gmail.com

¹ Laboratório de Síntese Estereosseletiva de Substâncias Bioativas, Instituto de Pesquisa de Produtos Naturais, UFRJ.

Palavras Chave: Henry reaction, nitroalkanes, periodic acid, solvent free conditions, green chemistry.

Highlights

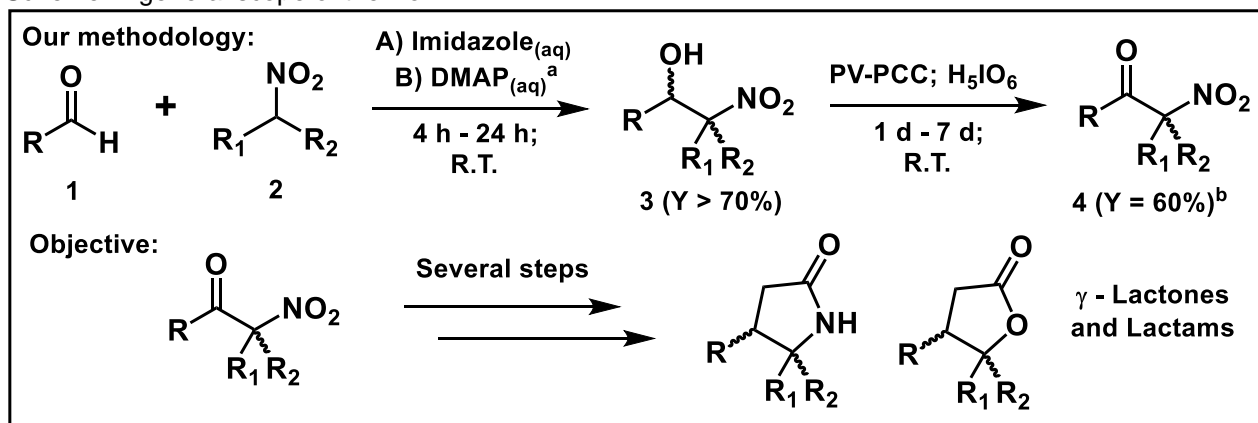
Nitroalcohol oxidation with resins supported reagents. Nitroaldol reaction in water.

Resumo/Abstract

α -nitroketones are versatile intermediates for organic synthesis. It has been used in the preparation of different pharmaceutically and industrially important compounds, such as nitroenamines, oxazoles, isoxazoles, Michael addition product and stable enols etc¹. Its main reactivity is due to the high acidity of the α -nitro hydrogens ($pK_a \cong 4.0$). Aiming at the synthesis of γ -lactones and γ -lactams derivatives we have developed a new methodology, based in the concept of green chemistry for the production of α -nitroketones.

In our attempt to use and develop greener methods, we have tried imidazole and water to produce the nitroalcohols we're interested and we discovered that DMAP was a suitable base in water to do the Henry reaction and in good yields (>80%) as well. For the oxidation reaction we tried a method based in PV-PCC (used catalytically) and orthoperiodic acid (scheme 1).

Scheme 1: general scope of the work



(R1 = H, R2 = H: R = Prop – 85% (A) in 4 days, 80% (B) in 8 h; R = Phenyl – 90% (A) in 1 h, 90% (B) in 6 h; R1 = H, R2 = Et: R = Prop – 65% (A); R = Phenyl – 70% (B)) **a.**: DMAP showed a reactivity similar to imidazole, but reacted faster with butanal in our hands, suggesting it may be faster for aliphatic aldehydes. **b.**: The only product of oxidation (4) obtained until now was for R = prop, R1 = H, R2 = Et in the conditions shown. Reactions with method B with other substrates (1 and 2) and oxidations of more nitroalcohol's (3) are still under analysis.

1) BALLINI, R. et al. Acyclic alpha-nitro ketones: a versatile class of α -functionalized ketones in organic synthesis. **Tetrahedron Letters**, v. 61, n. 38, p. 8971, 2005.

2) HUNSEN, M. et al. Pyridinium chlorochromate catalyzed oxidation of alcohols to aldehydes and ketones with periodic acid. **Tetrahedron Lett.** V.46, p.1651– 1653, 2005.

3) PHUKAN, M. et al. Imidazole-Catalyzed Henry Reactions in Aqueous Medium. **Synthetic Communications**, V.38, Issue 18, p.3068-3073

Área: ABM

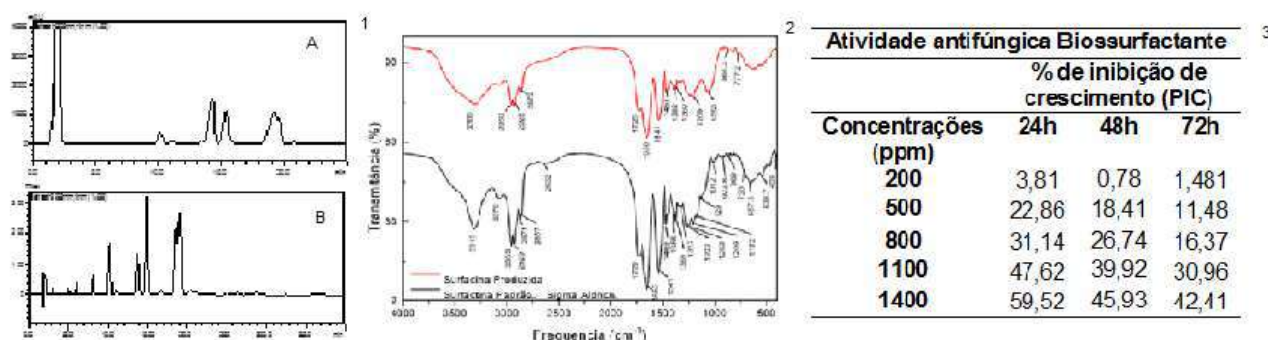
(Inserir a sigla da seção científica para qual o resumo será submetido. Ex: ORG, BEA, CAT)

Nº de Inscrição: 01587

(Inserir o número de inscrição do autor que fez a submissão)

Chemical characterization and antifungal activity of biosurfactant produced by *Bacillus* sp.**Katiany do Vale Abreu*** (PG),¹ **Maria Roniele F. de Oliveira** (PG),¹ **Ana Luiza B. da Silva** (IC),² **Darlane W. Freitas Soares** (PQ),³ **Liange Reck** (PG),¹ **Ana Livia Moreira Rodrigues** (PG),¹ **Carlucio Roberto Alves** (PQ),²**katianyabreu@yahoo.com.br**¹Rede Nordeste de Biotecnologia, UECE; ²Departamento de Química, UECE; ³Departamento de Engenharias, FANOR.
Palavras Chave: Biossurfactante, Fungicida, *Bacillus* sp., Surfactina, *Lasiodiplodia theobromae*.**Highlights***Bacillus* sp. was isolated from the effluent of the oil industry. The surfactant produced is a surfactin. The antifungal activity was performed against the phytopathogen *Lasiodiplodia theobromae*.**Resumo/Abstract**

Os biossurfactantes são moléculas anfipáticas produzidas por microrganismos, que reduzem tensões superficiais e interfaciais e possuem propriedades de emulsificação. Apresentam vantagens com relação aos surfactantes químicos como a biodegradabilidade e baixa toxicidade. A utilização de bactérias autóctones revela uma opção promissora pois os microrganismos encontram-se adaptados a situações de estresse ambiental. A bactéria em estudo LUB P1 foi isolada do efluente da Refinaria Lubrificantes e Derivados do Nordeste – Lubnor e revelou-se uma cepa promissora na produção de um biossurfactante para remediação de sítios contaminados e apresentou atividade antimicrobiana. O fungo *Lasiodiplodia theobromae* é um cosmopolita que infecta mais de 500 espécies de plantas em regiões tropicais, causando sintomas de seca de ramos, podridão de frutos e morte de plantas como o cajueiro. O objetivo deste trabalho foi identificar o tensoativo produzido através de caracterização química e verificar sua atividade antifúngica frente ao fitopatógeno *Lasiodiplodia theobromae*. O biossurfactante produzido por *Bacillus* sp. Foi identificado como uma surfactina através de técnicas como FTIR e HPLC. Após sua caracterização o biossurfactante bruto foi solubilizado em meio Ágar Sabouraud Dextrose, nas concentrações de 200, 500, 800, 1100 e 1400 ppm em placas de Petri de 9,0 cm. O ensaio foi feito em triplicata de produto/fungo. No centro de cada placa foi depositado um disco de micélio retirado das bordas da colônia do fungo *Lasiodiplodia theobromae* de aproximadamente 7mm. Para a avaliação da inibição do crescimento micelial, utilizou-se uma placa padrão inoculada com o fungo contendo apenas o meio de cultura. Mediu-se o diâmetro das colônias três dias após a incubação a 25°C.



Figuras – 1A- HPLC do biossurfactante, 1B- HPLC da surfactina padrão (Sigma Aldrich); 2- Espectrogramas vibracionais na região do infravermelho para surfactina padrão (Sigma Aldrich) e surfactina produzida extracelularmente a partir da cultura de LUB P1; 3- % inibição de crescimento micelial do fungo em exposição ao biossurfactante.

Agradecimentos/Acknowledgments

Agradecimentos CAPES e FUNCAP.

Natural thallium in the West region of Bahia (Brazil): a risk to geoenvironmental health?

Oldair D. Leite (PQ)^{1*}, Jorge L. O. Santos (PQ)², Djane S. de Jesus (PQ)³, Ana Maria P. dos Santos (PQ)⁴
Clayton R. Janoni(PQ)⁵, Eder L. de Moraes Flores (PQ)¹

oldair.leite@gmail.com*

¹Universidade Tecnológica Federal do Paraná, UTFPR – Campus Medianeira-PR.

²Universidade Federal do Oeste da Bahia, UFOB – Campus Bom Jesus da Lapa-BA

³Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia da Bahia, Salvador-Ba

⁴Instituto de Química, Universidade Federal da Bahia, Salvador-Ba

⁵Universidade Federal do Espírito Santo, UFES - Campus Alegre-ES.

Keywords: *thallium, contamination, geoenvironmental, health hazard*

Highlights

- Natural occurrence of thallium associated with manganese ore in the West Bahia Brazil;
- Contamination of soil and river sediments by the dispersion of ore tailings;
- More studies are needed on the chemical speciation of Tl in environmental samples.

Abstract

The present work intends to demonstrate an environmental concern and to draw attention to the need of an efficient geoenvironmental management in an area of manganese deactivated in the West of Bahia-Brazil, to avoid the enrichment of Tl in the surface environment (rock bed, surface waters and soils). Thallium is considered to be toxic to the human and environmental organism and its toxicity is higher compared to mercury, cadmium and lead (maximum permissible concentration at 0.1 mg mL⁻¹). Thallium is well absorbed by the skin, gastrointestinal and respiratory tract, if accumulation in the bones, kidneys and central nervous system, and carcinogenic, genotoxic and neurotoxic effects are mainly reported. The discovery of a thallium deposit associated with manganese ore in the city of Barreiras BA (Brazil) was reported in 2011, with a production capacity estimated at 10 tons/year (IBRAM, 2011). Preliminary studies by Bonfim et al. (2016) demonstrated geological similarities of the Mn ore from the city of Barreiras with the ore from an Mn extraction area, the Perdizes mine, located in the city of São Desidério. The Perdizes mine was the largest manganese mined area in the West of Bahia, Brazil, with production destined for the Brazilian steel industry. Extraction operations ended in the last decade of the twentieth century, but the area was not environmentally recovered, presenting piles of ore tailings, erosion, gullies and ravines in the mining cavas. In the present work, the contents of Tl, Mn, Fe and organic matter in soil, sediment and water samples from the mining area of the Perdizes Mine and its surroundings were evaluated using electrochemical (DPASV) and spectrometric techniques (FAAS), after preparation of sample opening. The mean value of the thallium content observed in the soil of the mining area, central pit of the mine, (Samples n, n = 1,2,3,4,5,6 and 7) was approximately 6.1 mg kg⁻¹, 6 times above the indicated limit for arable land. Samples collected along roadsides that give access to the mining area and to the village of Perdizes (Samples p, p = 1-2) presented high Tl contents, around 90 mg kg⁻¹, which indicates the (with the highest levels of Tl = 473 mg kg⁻¹), which represents a significant threat to the environment and the surrounding population. Tl levels between 3.4 to 31mg kg⁻¹ were also observed in samples of sediments from the Fêmeas River, located approximately 1.2 km from the central pit of the mine, indicating contamination of the aquatic body, leaching of sediments and/or minor ore particles (result of mechanical mixing of mining tailings for terracing roads around the mine). Water samples from the River of Females, Tl⁺ concentrations were below the detection limit (0.89 µg L⁻¹) of the analytical method (DPASV). In this work, the occurrence of thallium in a mining area of Mn, Mina Perdizes, was investigated and its environment showed significant levels of concentration (6.1 to 473 mg kg⁻¹) at the site and surroundings of the mining area, indicating the need of attention, monitoring and further scientific investigations of this geoenvironment, liable to the dispersion of natural Tl, its influences and risks to environmental health.

Acknowledgments

We thank the financial support of the National Institute of Science and Technology for Energy and Environment (INCT-E&A), the State of Bahia Research Foundation (PRONEX ÁGUA and PPP 049/2011), CNPq, CAPES, UFBA, UFOB and UTFPR.

Área: BEA

(Inserir a sigla da seção científica para qual o resumo será submetido. Ex: ORG, BEA, CAT)

Nº de Inscrição: 01589

(Inserir o número de inscrição do autor que fez a submissão)

Oleogels: Trends and Challenges for Food Industry

Sara A.B. Guebara (PG),¹ Juliana N.R. Ract (PQ),² Luciano A. Bueno (PQ)³.

sara.guebara@ufabc.edu.br; avallonebueno@gmail.com

¹*Biotechnology Program, UFABC;* ²*Department of Biochemical Pharmaceutical Technology, USP;* ³*Center of applied engineering and social sciences (CECS), UFABC.*

Palavras Chave: *Oleogels, Food technology, Carnauba wax, Ethylcellulose, Tocopherol, Oxidation.*

Highlights

Oleogels have a promising future for the food industry.

Oleogels have been studied as a possible substitute for saturated and trans fatty acid.

Few studies have evaluated the oxidative behavior of oleogels

Formulations with carnauba wax, ethylcellulose, canola oil and vitamin E were suggested as an alternative for this challenge.

Resumo/Abstract

Oleogels have a promising future in the food industry in the process of simultaneous substitution of saturated and trans fatty acids. They are defined as a gel in which the liquid and continuous phase is an oil that may contain high levels of unsaturated fatty acids structured by a three-dimensional network comprising a structuring agent such as waxes, lecithin, long chain alcohols and ethylcellulose. This structure system of liquid oils can present typical technological properties of fats, such as plasticity and the consequent resistance to stress, improving nutritional properties and keeping technological ones in certain foods. Despite the great advantages that this type of system presents, increasing the proportion of fatty acids in food, however, may make them more vulnerable to lipid oxidation reactions. In addition, it is known that lipid rancidification is one of the main reactions of deterioration of food, implying in the appearance of flavors and odors that often mischaracterize the product. This deterioration reaction causes loss of quality and reduction in the nutritional value of the food. For this reason, the industry uses antioxidants, which are defined as substances capable of retarding oxidation reactions and are classified according to their origin (synthetic or natural) and mechanism of action (primary or secondary). In this context, few studies have sought to correlate the oxidative process of oleogels with the type of structuring agent used, the fatty acid profile of the continuous phase and the effect of the addition of antioxidants in this system, and there is some evidence that the oxidation products can increase the mechanical strength of the gels due to the increased polarity of the medium. Thus, little is known about the relation between its composition and the oxidative process, being this one of the most important causes of deterioration of foods rich in unsaturated lipids. Therefore, the objective of this work was to evaluate the influence of ethylcellulose, carnauba wax, canola oil and tocopherol in the process of formation of the oleogel as well as to evaluate the oxidative behavior of these raw materials during a shelf life of one month. Accordingly, the main objective of this research was to suggest formulations that meet the technological prerequisites and also oxidative stability.

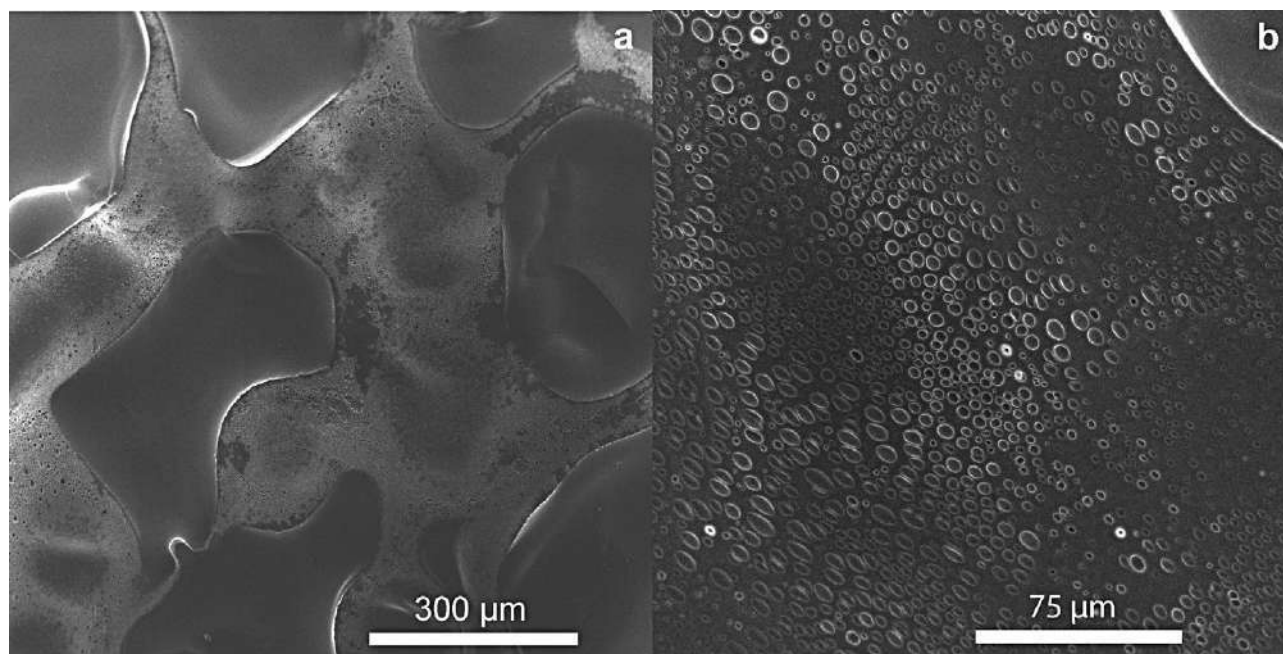


Fig.1 Cryo-scanning electron micrographs of an oleogel formulated with 10% (wt/wt) of ethylcellulose in soybean oil after exposure to a fixed volume of solvent. a) 2.2 mL of isobutanol dripped over the surface of the gel to remove surface oil. Smooth, featureless areas appear where oil extraction was not successful, however, between these regions, the oil extraction process has exposed the internal network. (b) 2.8 mL of isobutanol dripped over the surface, showing hundreds of similarly shaped round pores, where oil would have been found within the polymer matrix. Reprinted from Zetzi et al. Microstructure of ethylcellulose oleogels and its relationship to mechanical properties. *Food Structure*, v.2, p.27-40, 2014.

References: 1.Hwang et al. Oxidation of fish oil oleogels formed by natural waxes in comparison with bulk oil. *European Journal of Lipid Science and Technology*. v, 120, n.5, p.1-10, 2018.

2.Park et al. Oxidative Stability of Rice Bran Wax Oleogels and an Oleogel Cream Cheese Product. v.95, p.1267-75, 2018.

3.Zetzi et al. Microstructure of ethylcellulose oleogels and its relationship to mechanical properties. *Food Structure*, v.2, p.27-40, 2014.

Agradecimentos/Acknowledgments

The authors would like to thank CAPES (Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior) and UFABC (Universidade Federal do ABC) for the financial support.

Área: BIO

Nº de Inscrição: 01590

Influência de solventes orgânicos e sais de cloreto sobre a atividade da lipase de *Aspergillus niger* 11T53A14

Marcely C.C da Costa (IC)^{1*}, Guilherme A. Coelho (IC)², Laís G. Lopes (IC)², Jaqueline D. Senra¹, Sônia Couri (PQ)² e Gizele C. Fontes-Sant'Ana (PQ)².

marcelycris@hotmail.com

¹ Departamento de Química Geral e Inorgânica, Universidade do Estado do Rio de Janeiro - Instituto de Química. Rua São Francisco Xavier, 524 - Maracanã, Rio de Janeiro - RJ; CEP: 20550-900

² Departamento de Tecnologia de Processos Bioquímicos, Universidade do Estado do Rio de Janeiro - Instituto de Química. Rua São Francisco Xavier, 524 - Maracanã, Rio de Janeiro - RJ; CEP: 20550-900

Palavras Chave: Lipase, solvente orgânico, sais de cloreto, fermentação em estado sólido, *Aspergillus niger*.

Highlights

Influence of organic solvents and chloride salts on lipase activity of *Aspergillus niger* 11T53A14. High catalytic activity of lipase from *A. niger* was obtained by solid-state fermentation using wheat bran as carbon source. The lipase activity increased with zinc chloride and potassium chloride.

Resumo

As lipases, classificadas como hidrolases (triacilglicerol esteracilhidrolases EC 3.1.1.3), são enzimas que catalisam a hidrólise de triacilgliceróis, além de reações de síntese¹. Dentre os principais microrganismos utilizados na produção da lipase, o *A. niger* vem sendo amplamente empregado, bem como a FES, principalmente pelo fato da aplicação de resíduos agroindustriais durante a produção¹. O presente trabalho tem como objetivo avaliar a influência de sais e solventes orgânicos na atividade da lipase de *A.niger* 11T53A14 produzida por FES utilizando farelo de trigo como matéria-prima. O fungo utilizado foi a linhagem mutante *Aspergillus niger* 11T53A14, mantido, ativado e propagado segundo metodologia de Couri & Farias (1995). A produção da lipase se deu de acordo com procedimento proposto por Coelho *et al.* (2018). Os solventes orgânicos (4,8% v/v) ou os sais de cloreto (1 mmol.L⁻¹) selecionados foram adicionados ao meio reacional contendo emulsão de água/azeite (1:1), citrato de sódio 0,1 mol.L⁻¹ e extrato enzimático. A atividade lipásica foi determinada pelo método titulométrico descrito por Pereira *et al.* (2001). Os resultados (Figura 1) obtidos mostraram que as maiores atividades médias foram utilizando cloreto de zinco (251,30 U/g) e cloreto de potássio (281,50 U/g). Os solventes orgânicos causaram uma redução na atividade enzimática.

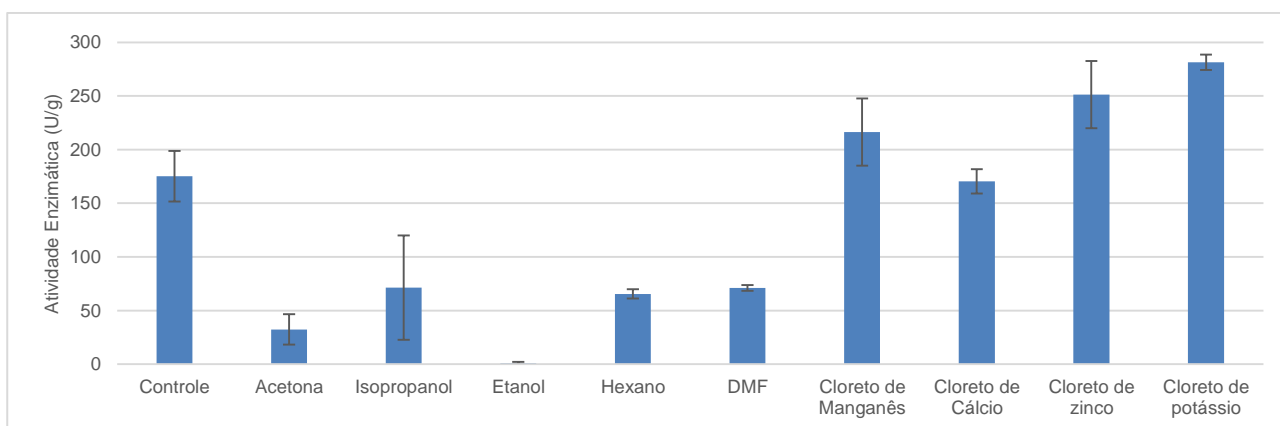


Figura 1 – Atividade lipolítica do extrato bruto em contato com diferentes solventes orgânicos e sais de cloreto. DMF (Dimetilformamida)

¹ CAVALCANTI, E.A.C; et al. *Braz. arch. biol. technol.*, v. 48, p. 79-84, 2005.

COELHO, G.A; et al. *Article from XXII Congresso Brasileiro de Engenharia Química*, v. 1, n. 5, 2018.

COURI S, FARIAS AX. *Rev. Microbiol.*, v. 26, p. 314-7, 1995.

PEREIRA, E.B; et al. *Article from Twenty-Second Symposium on Biotechnology for Fuels and Chemicals*, p. 739-752, 2001

Área: QPN

Nº de Inscrição: 01591

SEASONAL VARIATIONS OF BUTENOLIDES IN AERIAL PARTS OF *Piper malacophyllum*

Marina da Silva Machado (PQ)¹, Tailyn Zermiani (PG)², Matheus Corrêa dos Santos (IC)¹, Fabiane Machado Lobato (IC)¹, Mariana da Costa (IC)¹, Amanda Ellen de Athayde (IC)¹, Pedro Araldi de Mattos (TC)¹, Angela Malheiros (PQ)^{1,2}, Christiane Meyre-Silva (PQ)³.

c.meyre@ufsc.br; marinamachad@gmail.com

¹Curso de Farmácia, UNIVALI, Itajaí (SC), Brasil, ²Programa de Pós Graduação em Ciências Farmacêuticas UNIVALI,

³Programa de Pós-graduação em Farmácia, UFSC, Florianópolis (SC), Brasil.

Palavras Chave: *Piper malacophyllum*, Butenolides, HPLC, Piperaceae.

Highlights

4,6-dimethoxy-5-Z-diphenilbutenolide and 4,6-dimethoxy-5-E-phenilbutenolide as a chemical markers of *P. malacophyllum*.

The butenolides concentration was significantly influenced by seasonal variations.

Resumo/Abstract

In the plant kingdom the genus *Piper* (Piperaceae) stands out due to its economic, ecological and medicinal importance, and many species have been used therapeutically for various purposes, such as antineoplastic, antimicrobial (antibacterial, antifungal) and antiinflammatory. *Piper malacophyllum* has shown antimicrobial properties and 4,6-dimethoxy-5-Z-diphenylbutenolide (DFBZ) and 4,6-dimethoxy-5-E-phenylbutenolide (DFBE) butenolides are assigned as chemical markers. In order to elucidate the metabolism and to direct a better time of the year and part of the plant for the collection and processing of the species *P. malacophyllum*, a qualitative and quantitative analysis was carried out using High Performance Liquid Chromatography (HPLC). Extractive solutions (ES) of *P. malacophyllum* aerial parts (leaves and branches) collected at the different seasons were obtained by dynamic maceration at 330 rpm for 8 h, using ethanol 90°GL in the drug:solvent ratio 1:10. Analyzes by HPLC were performed on a Shimadzu® LC 20-AC chromatograph with C18 column (250 X 4.6 mm X 5 µm) Phenomenex®. The mobile phases were methanol: acetonitrile:water (with H₃PO₄ at pH 2.53), eluted in gradient mode: 0-2 min (50:10:40), 2-15 min (70:10:20), 15- 20 min (80:10:10), 20-25 (88:10:2), 25-30 (88:10:2), returning the initial conditions in 40 min. The flow rate was 1.0 mL/min, and the detection performed at λ= 310 nm. The validation of the analytical method was according to RE nº 899 and the analytical methodology was specific, linear (R> 0.999) in the range of 0.05 - 100 µg / mL, accurate, accurate and sensitive for both markers. DFBZ and DFBE were identified in the leaves collected in the summer, autumn and winter. On the branches, markers were found in the spring, summer, and fall seasons. The highest concentrations of 4,6-dimethoxy-5-Z-diphenylbutenolide (DFBZ) and 4,6-dimethoxy-5-E-phenylbutenolide (DFBE) butenolides were observed in the leaves collected in winter and summer, and the isomeric form E (DFBE) found in greater proportion. Through the quantitative seasonal analysis of extractive solutions, it can be concluded that the time of year and part of the plant influence the chemical composition of the species under study.

Agradecimentos/Acknowledgments

CNPq, FAPESC, Art 17- PropPPEC/UNIVALI.

Área: EDU

Nº de Inscrição: **49495**

QUÍMICA DAS DROGAS: AS FUNÇÕES ORGÂNICAS CONTIDAS NO ÁLCOOL

¹ Jose L. A. Ferreira (IC),² Diego G. de Sousa (IC),³ Priscila F. de Oliveira (IC),⁴ Rita de C. S. di Pace (IC),⁵ Jonatas M. da S. Rodrigues (IC),⁶ Wellina N. Santana ⁷ Alisson de Lima Xavier (IC), F Edvaldo A. S. Correia (PQ)¹

Flaleo2012@gmail.com; **diegogomees28@gmail.com;** **priscilaf03@gmail.com;**
ritinhadipace@gmail.com; **jonatasdaniel007@gmail.com;** **Wellinansantana@gmail.com;**
xdhamil13@gmail.com; **Edvaldo.amaro@gmail.com;**

¹Licenciatura em Química, IFPB; ²Licenciatura em Química, IFPB; ³Licenciatura em Química, IFPB; ⁴Licenciatura em Química, IFPB; ⁵Licenciatura em Química, IFPB; ⁶Licenciatura em Química, IFPB; ⁷Licenciatura em Química, IFPB; ^{1*} Doutor, IFPB.

Palavras Chave: Ensino de Química; Funções Orgânicas; Química das Drogas.

Highlights

DRUG CHEMISTRY: THE ORGANIC FUNCTIONS CONTAINED IN ALCOHOL. Chemistry teaching; Organic Functions; Chemistry of Drugs. The proposed action was an educational and interactive lecture entitled "Chemistry of Drugs: The organic functions contained in alcohol.

Resumo/Abstract

Desde sempre um grande desinteresse dos alunos pela disciplina de química é observado, uma vez que a mesma é considerada uma matéria de difícil compreensão e não se sabe a finalidade de estudá-la e aprendê-la. O trabalho foi desenvolvido na Escola Estadual de Ensino Fundamental e Médio Professor Orlando Cavalcante Gomes, em uma turma de 2º ano do turno da Manhã, tendo duração de quarenta e cinco minutos. A ação proposta foi uma palestra educativa e interativa, intitulada como "Química das Drogas: As funções orgânicas contidas no álcool". Após questionamentos, utilizou-se a fórmula estrutural de um álcool – etanol – com o intuito de saber como estava o conhecimento dos alunos em Química orgânica, e também de saber se seriam capazes de identificar algumas funções orgânicas, se sabiam a nomenclatura, se conseguiam identificar quais eram os elementos presentes naquela figura e por fim se aquela substância estava presente no seu dia-a-dia, incluindo sua finalidade. Identificou-se que, 36 alunos (80%), conseguiram identificar os átomos de hidrogênio, oxigênio e carbono, 40% conseguiram identificar o OH⁻ como a função álcool e 70% ressaltaram alguma utilidade da substância no cotidiano. Esta iniciativa permitiu que os alunos enxergassem a química orgânica de outra forma, mostrando que as habilidades e competências a serem promovidas no ensino de química, devem estar estreitamente vinculadas aos conteúdos a serem desenvolvidos.

Agradecimentos/Acknowledgments

IFPB

Área: BEA

Inscrição: 01593

Determination of metallic contaminants in chia seed oil using a greener sample preparation procedure based on RP-DLLME.

Eder L. M. Flores (PQ)¹, Murilo O. Beato (IC)¹, Oldair D. Leite (PQ)¹, Aline H. Ferreira (PG)^{2*}.

eder@utfpr.edu.br; alinehespanhol@hotmail.com.

¹Departamento de Química, UTFPR - Campus Medianeira; ²Programa de Pós-graduação em Processos Químicos e Biotecnológicos, UTFPR – Campus Toledo.

Palavras Chave: *sample preparation, microextraction, metallic contaminants, chia seed oil.*

Highlights

- Extraction and preconcentration of Cu, Fe, Mn and Ni from chia seed oil using RP-DLLME;
- Determination of metallic contaminants by F AAS in chia seed oil;
- A greener sample preparation procedure.

Resumo/Abstract

In this work, a procedure based on reversed-phase dispersive liquid-liquid microextraction (RP-DLLME) as sample preparation for the extraction and pre-concentration of Cu, Fe, Mn and Ni in chia seed oil was developed. For the proposed sample preparation procedure, a mixture of dispersant (n-propanol, 700 μL) and an extractant (1.0 mol L⁻¹ of HNO₃ or 2.0 mol L⁻¹ of HNO₃ 300 μL) were injected into the sample (10.0 g) preheated to 80 °C. After, flasks were stirred in vortex system and centrifuged (10 min at 5600 g). The sample phase was partially withdrawn using a pipette, and the aqueous phase was transferred to volumetric flask and volume was completed to 5.0 mL, for further determination of analytes by F AAS. Some parameters, such as volume of dispersant and extractant solutions and HNO₃ or HCl concentration (extractant solution), were evaluated. During the optimization of RP-DLLME, samples of chia oil were spiked with 1.0 $\mu\text{g g}^{-1}$ of the analytes using an oil standard (VHG-V21+K[®], 30 $\mu\text{g g}^{-1}$, LGC Standards, United Kingdom). The determination of was performed by F AAS (Varian 240FS AA, Australian) using external calibration with aqueous reference solutions. The accuracy was evaluated by recovery tests, which were close to 100 % for all analytes, with relative standard deviation lower than 4%. Very low limits of quantification were obtained (less than 0.1 mg kg⁻¹ for all analytes). The proposed RP-DLLME was considered a suitable sample preparation procedure for further determination of Cu, Fe, Mn and Ni by F AAS. Thus, comparing to conventional methods for metallic contaminants determination in edible oils, RP-DLLME combined to F AAS can be considered simple, low cost and low consumption of reagents, which is in according with green chemistry principles.

López-García, I; Vicente-Martínez, Y; Hernández-Córdoba, M. *Talanta*, 124 (2014) 106-110.

Farzin, L; Moassesi, ME; *Journal of Applied Chemical Research*, 8 (2014) 35-43.

Pehlivan, E; Arslan, G; Gode, F; Altun, T; Ozcan, M. *Grasas y Aceites*, 59 (2008), 239-44.

Acknowledgements

The authors are grateful to UTFPR – Campus Medianeira, Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior (CAPES), and Fundação Araucária de Apoio ao Desenvolvimento Científico e Tecnológico do Estado do Paraná for supporting this work.

Searching for a Novel Catalyst for Flow-based *Baeyer-Villiger* Oxidation of Lignin Models α -ether- β -hydroxy-Ketones

Kevin A. Dias (PG),¹ Leandro H. Andrade (PQ).¹

kevindias@usp.br

¹Institute of Chemistry, University of São Paulo, Av. Prof. Lineu Prestes, 748, 05508-000, São Paulo, SP, Brazil.

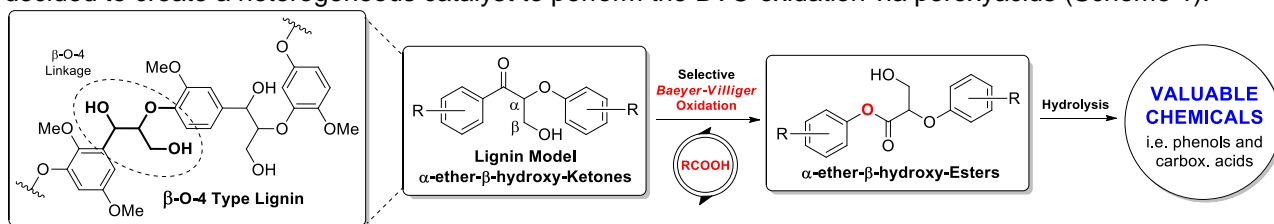
Keywords: *Baeyer-Villiger* Oxidation, α -ether- β -hydroxy-Ketones, Lignin, Selective Transformation.

Highlights

Efforts have been made for the development of a novel catalyst for flow-based *Baeyer-Villiger* oxidation of lignin models α -ether- β -hydroxy-ketones. The key component for this process is the application of peracid as oxidant, in combination with its regeneration using aqueous hydrogen peroxide.

Abstract

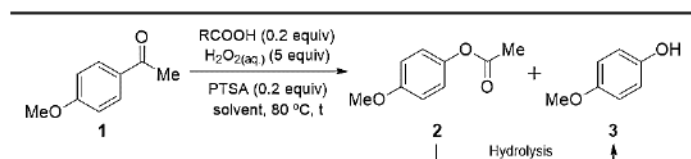
Lignin depolymerization is an important approach to develop new feedstocks for biofuels and fine chemicals. Recently, we have demonstrated that two different oxidative methodologies to promote selective transformations of lignin model compounds.¹ Despite the interesting results, we have faced a problem with our catalyst for the *Baeyer-Villiger* Oxidation (BVO) of α -ether- β -hydroxy-ketone. A side-product was not avoided. Considering the high importance of developing novel green methodologies for lignin depolymerization, we decided to create a heterogeneous catalyst to perform the BVO oxidation via peroxyacids (Scheme 1).



Scheme 1. Our approach for selective transformation of α -ether- β -hydroxy-ketones.

Peracetic and perbenzoic acids are commonly used for this transformation, however there are no reports about their catalytic processes.² We envisioned the use of polystyrene-bound carboxylic acids (PCA) as pre-catalysts to evaluate their use in *Baeyer-Villiger* oxidations. The PCA would be confined in a packed-bed reactor (PBR) for continuous flow operation.

Table 1. BVO of **1** employing different pre-oxidizing agents.



| Entry ^a | RCOOH | Solvent | t (h) | Conv (%) ^b | |
|--------------------|--------|---------|-------|-----------------------|--------|
| | | | | Ester | Phenol |
| 1 | | MeCN | 1 | 15 | 11 |
| 2 | MeCOOH | THF | 1 | 9 | - |
| 3 | | MeCN | 5 | 40 | 24 |
| 4 | | MeCN | 1 | 15 | 9 |
| 5 | PhCOOH | THF | 1 | 10 | - |
| 6 | | MeCN | 5 | 42 | 23 |

^aReaction Conditions: **1** (0.5 mmol), H₂O₂ (aqueous, w/w 30%) (2.5 mmol), carbox. acid (0.1 mmol), PTSA (0.1 mmol) in 3 mL of solvent. ^bDerived from GC-MS analysis

the sole product (~10% conv). The studies using 0.2 eq. with extended reaction time revealed that the peroxyacid is constantly formed (Entries 3 and 6). Based on these results, the synthesis and application of the envisioned polystyrene-bound carboxylic acids is promising and, we hope that this methodology would be a valuable tool to investigate the BVO over a wide range of substrate under continuous flow operation.

References

- [1] Santos, W. C. C.; Dias, K. A. *et al. Adv. Synth. Catal.* **2018**, *360*, 1376.
 [2] Bach, R. D. J. *Org. Chem.* **2012**, *77*, 6801.

Removal of emerging contaminants from oil produced wastewater by using vermiculite modified by Fe₃O₄

Mariana Bartilotti Garcia (PG)¹, Carlos A. Martínez-Huitile (PQ)² and Maria Valnice Boldrin (PQ)¹.
mbartilottig@gmail.com; miboldrin@gmail.com

¹Departamento de Química Analítica, Universidade Estadual Paulista (UNESP), Instituto de Química, Araraquara.

²LEAA-Laboratório de Eletroquímica Ambiental e Aplicada, Institute of Chemistry, Federal University of Rio Grande do Norte, P59078-970, Natal, RN, Brazil

Key words: *Emerging Pollutants, Oil Produced Water, Magnetic Vermiculite.*

Highlights

Magnetization of vermiculite by in-situ co-precipitation of Fe₃O₄ nanoparticles
Vermiculite/Fe₃O₄ promotes up to 97% of clean-up of organic compounds in oil produced water
Efficient removing of emerging pollutants including BTEX was reached with Vermiculite/Fe₃O₄

Abstract

The oil extraction is one of the most important practices for obtaining various types of products such as gases and fuels. Its worldwide importance is increasing, as is the concern with generated produced wastewater from petroleum, which contains toxic and mutagenic aromatic pollutants in both the aqueous and the hydrophobic phases¹. The analytical challenge for the determination of these compounds is based on the high concentration of CO₂, greases, salts and pollutants that make the sample highly complex. The present work aim the feasibility of vermiculite modified by magnetite nanoparticles (Fe₃O₄) as a simple way to clean-up the sample by sorption of aromatic hazardous compounds in oil produced water. The original vermiculite (expanded vermiculite from Agrometana) before and after modification by Fe₃O₄² showed differences of porosity, same lamellar morphological characteristics and loss of crystallinity when it is thermally treated and the modified material which had aggregated Fe₃O₄ nanoparticles and superparamagnetic properties as detected by BET (Brunauer-Emmett-Teller), SEM-FEG (Scanning Electron Microscopy), TEM (Transmission Electronic Microscopy), as well as VSM (Vibrating Sample Magnetometry). A fine powder suspension of 30 mg vermiculite (fine powder material) calcined at 900 °C before and after modification was treated with 2 mL of oil produced water sample and the supernatant analyzed by total dissolved organic carbon (DOC) removal and gas chromatography coupled to mass spectrometry (GC-MS).

The materials showed high adsorption capacity of DOC removal from oil produced water reaching 91% and 97% for the natural and magnetized material, respectively after 5 min of treatment according to total organic carbon measurement (TOC). In addition, is observed that by using magnetized vermiculite (VMT-mag) a higher organic adsorption, it was also more stable to desorption even after 1 hour of treatment. The magnetic material also acts as a clean-up of the BTEX pollutants identified by the GC-MS technique that identified the occurrence of Benzene, 1,1-Diethoxyethane, Toluene, 2-Methylthiolane, Ethylbenzene, 1,3-Dimethylbenzene (m-Xylene), 1,4-Dimethylbenzene (p-Xylene), (2R, 5R) -2,5-Dimethylthiolane, (2R, 5S) -2,5- 1,2-Dimethylbenzene (o-Xylene). After 5 min of treatment, decreasing of those from 15 to 85%, respectively, was observed.

Acknowledgments

Chemistry Institute/UNESP Araraquara, CNPq (143222/2017-1), and NATIONAL INSTITUTE FOR ALTERNATIVE TECHNOLOGIES OF DETECTION, TOXICOLOGICAL EVALUATION AND REMOVAL OF MICROPOLLUTANTS AND RADIOACTIVE (INCT-DATREM) (CNPq 465571/2014-0, FAPESP 2014/03679-7, CAPES 88877136426/2017/00).

¹ Yu, L et al. Arab. J. Chem. 10, S1913–S1922, 2017

² Zhou, Pet al. Phys. Rev. B47, 16486–16493, 1993

Área: MED

Nº de Inscrição: 1600

NEW INDOLE COMPOUNDS AS POTENTIAL ANTIMALARIALS

Bárbara Karina de Menezes Dias¹ (PG)*, **Maneesh K. Singh**¹ (PG),
Danielle Pagliaminuto Portella² (IC), **Alessandro Kappel Jordão**^{2,3}
(PQ), **Célia R. S Garcia**⁴ (PQ)

bkmdias@gmail.com

¹Department of Parasitology, Institute of Biomedical Science, University of São Paulo, São Paulo, Brazil ; ²Unit of Pharmacy, State University of West Zone- UEZO, Rio de Janeiro, Brazil ; ³Department of Pharmacy, Federal University of Rio Grande do Norte, Natal, Brazil; ⁴Department of Clinical and Toxicological Analysis, School of Pharmaceutical Sciences, University of São Paulo, São Paulo, Brazil

Palavras Chave: *Malaria, Plasmodium, Drugs, Indoles.*

Highlights

New indole compounds, analogues to melatonin, present potential antimalarial activity.

Resumo/Abstract

Malaria is an infectious disease estimated to affect millions of people around the world. The disease is caused by protozoan parasites from *Plasmodium* genus. Among the malaria causing parasites, *Plasmodium falciparum* is responsible for its most severe form. Due to emergence of parasites resistant to most available drugs currently used to treat the disease, it is urgent to find new antimalarials with different action mechanism. The host hormone melatonin has been shown to be involved in synchronization of parasite's intraerythrocytic cycle, and triggers a signaling cascade coupled with cytosolic Ca²⁺ increase (Hotta *et al*, 2000). Furthermore, treatment of parasite with melatonin changed the expression of 38 genes, involved in proliferation, cellular division, egress and ubiquitin-proteasome system (Lima *et al*, 2016). The hormone melatonin is a small indole compound produced by the host pineal gland, and has a central role in controlling parasite replication. We have previously reported the ability of some indole compounds to affect the parasite's erythrocyte cycle and also suggested a potential antimalarial activity related to addition of a bulky side chain at C-3 position of the indole ring (Shuck *et al*, 2014). In this study, five indole compounds analogues to melatonin, containing modifications in C-3 side chain of the indole ring (Triptenzil, Triptosil, Triptiofen, Trifuroila, and Tripcicloexil) were evaluated against *P. falciparum* intraerythrocytic development. Infected red blood cells were treated with different concentrations ranging from 0.1 µM to 110 µM of each compound for 72h. Final parasitemia was obtained by flow cytometry and IC₅₀ was determined. All the tested compounds exhibited potential antimalarial activity *in vitro*, and the lowest IC₅₀ obtained was 10.76 µM with Triptiofen. Further efforts are required to understand how these compounds affect the parasite proliferation, if it has any competitive agonistic or antagonistic correlation with melatonin and how the structure is related to the antimalarial activity.

Hotta *et al*, (2000) *Nat Cell Biol* **2**(7): 466-468.

Lima *et al*, (2016). *Genes Cancer* **7**(9-10): 323-339.

Schuck *et al*, (2014). *Eur J Med Chem* **78**: 375-382.

Agradecimentos/Acknowledgments

Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico -
CNPq

Fundação de Amparo a Pesquisa do Estado de São Paulo- FAPESP

Área: MAT

Nº de Inscrição: 01601

Highly ordered surface of electrospun PCL fiber decorated with a bioactive protein (BMP-7) for bone tissue engineering

Elayaraja Kolanthai (PQ),¹ Ana Claudia Oliveira Carreira (PQ),² Mari Cleide Sogayar (PQ),^{2*} Luiz Henrique Catalani (PQ)^{1*}

uspraja@iq.usp.br; ancoc@iq.usp.br; mcsoga@iq.usp.br; catalani@usp.br

¹Departamento de Química Fundamental, Instituto de Química, Universidade de São Paulo, São Paulo, SP, Brasil, 05508-000; ²NUCEL—Núcleo de Terapia Celular e Molecular, Faculdade de Medicina, Universidade de São Paulo, São Paulo, SP, Brasil, 05360-130

Keywords: Layer-by-Layer, PCL, BMP-7, Heparin, Chitosan, Polyelectrolytes

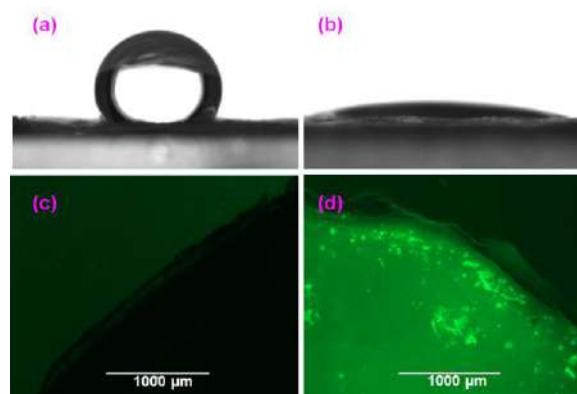
Highlights

A crucial step in our hypothesis is the generation of a multilayered system, laid up on top of a material with high specific surface area (SSA), where a protein can be deposited. The SSA material used in this study is an electrospun PCL mat. The multilayered system is constructed with bone morphogenetic protein 7 (BMP-7) in between heparin/chitosan pairs of layers (10 layers) via LbL technique. These reservoirs are efficient to store and release signaling proteins like BMP-7 for extended time on biomaterial surfaces. This reservoir can improve cell proliferation and attachment, induce bone cell differentiation from other cells and reform the bone at the damaged area after implantation of bioactive polymeric scaffolds.

Abstract

The combination of bioactive molecules and biodegradable scaffolds established a notable change at regeneration of tissues in the human body. These scaffolds not only provided physical support but also the release the biological signaling molecules to initiate the new tissue growth. The recombinant human bone morphogenetic protein 7 (BMP-7) was loaded onto biodegradable PCL fibers by Layer-by-Layer (LbL) technique, using heparin and chitosan as pair of polyelectrolytes. The physicochemical properties of these protein reservoirs scaffolds, like surface morphology, functional group, thermal properties and wettability were examined using different techniques, such as SEM, FTIR, TGA, contact angle measurement and immunofluorescent staining assay. There was no change in morphology and porosity of fiber mat after LbL growth. The hydrophobic PCL surface turned hydrophilic after coating the surface by addition of polyelectrolytes, containing or not a protein. The presence of BMP-7 at the surface was confirmed by immunofluorescent assay (Figure 1). Furthermore, *in vitro* BMP-7 release from reservoirs was examined at physiological temperature (37°C), while the amount of protein released from reservoirs was quantified using an ELISA kit. The reservoirs showed initial burst release, followed by controlled released at *in vitro* condition. C2C12 cells were cultured on scaffold constructed with reservoirs to check the cell attachment, proliferation, and osteogenic response at *in vitro* condition. This work is under progress. This study presents a new approach to control loading and release of signaling proteins from biodegradable implants for tissue regeneration.

Figure 1. The contact angle measurement and immunofluorescent staining were performed on pure and BMP-7 along with polyelectrolytes coated on PCL fiber mats by LbL technique. The water contact angle of pure PCL on surface (100°, a) and BMP-7 coated PCL fiber mat (9°, b). Fluorescence images of pure PCL (c) and BMP-7 coated sample (d) after immunofluorescent staining on PCL fiber mat. Intense green fluorescence on BMP-7 coated PCL fiber mat was observed which indicate the BMP-7 coated on fiber.



Acknowledgments

Authors acknowledges to the Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de São Paulo (FAPESP), Brazil for the award of thematic project and postdoctoral fellowship (Grant for fellowship file No.: 2011/21442-6 and 2015/19694-8).

Molecularly imprinted polymer electrochemical sensor for hydrochlorothiazide: experimental design based on carbon nanotube electrode

Gabriela F. de Oliveira (IC),¹ José L. da Silva (PQ),¹ Felipe F. Hudari (PG),¹ Maria V.B. Zanoni (PQ),^{1,3*}
maria.valnice@unesp.br; gabifonse@hotmail.com

¹Department of Analytical Chemistry, Institute of Chemistry, São Paulo State University (UNESP), Araraquara.

Palavras Chave: *Electrochemical sensor, Multi-walled carbon nanotubes modified electrode, Molecularly imprinted polymer, Multivariate optimization, Hydrochlorothiazide.*

Highlights

HCT sensor based on OPD as functional monomer was fabricated by electropolymerization and optimized by experimental design. MWCNTs exhibited good electrocatalytic effect to HCT oxidation and low detection limit.

Resumo/Abstract

Hydrochlorothiazide (HCT) is a widely used diuretic drug for the treatment of pulmonary and cardiac diseases, among others (1). This substance is controlled by the World Anti-Doping Agency (WADA) because of its masking effect on increased urine flow or body weight reduction (2). In addition, it may not exceed 250 ng mL⁻¹ in athletes' urine (3). Therefore, a molecularly imprinted polymers (MIP) electrochemical sensor on glassy carbon electrode surface modified with multi-walled carbon nanotubes (MWCNTs/GCE) was developed for hydrochlorothiazide (HCT) detection by experimental design. The MIP sensor was produced by electropolymerization of o-phenylenediamine (o-PD, functional monomer) containing HCT (template molecule) using cyclic voltammetry in the potential range of -0.40 to 1.0 V (vs. Ag/AgCl, KCl 3.0 M) on the surface of GCE modified with 2.5 µL of a suspension of MWCNTs 1.0 mg mL⁻¹ in n, n-dimethylformamide (oven dried at 50 ° C per 15 minutes). Thereafter, the template molecule was removed from the cavities formed in the MIP by slow stirring into methanol. The MIP sensor optimization was performed through the fractional factorial design 2⁸⁻⁴. The Microsoft Office Excel 2007 and Statistica 10 software were used for experimental design, statistical evaluation and model adjustment in this work. HCT showed an oxidation peak at 1.0 V with anode peak current (IPA) of 48 µA on MWCNT/GCE surface in Britton-Robinson buffer solution pH 4.0 in the potential range of 0.80 to 1.3 V with scan rate of 100 mV s⁻¹. An initial screening 2⁸⁻⁴ was used to evaluate the effects of variables: o-PD (V1: mM) and HCT (V2: µM) concentrations, number of cycles (V3), scan rate (V5: mV s⁻¹) and pH (V6) of electropolymerization, and analyte and monomer interaction times (V7: h), extraction of HCT (V4: min) and rebinding (V8: s) of the molecule to form the cavities of the MIP in the construction of the sensor. An experimental planning matrix of the electrode preparation with low (-1) and high (1) levels, together with the analytical response in duplicates was elaborated. The results obtained by cyclic voltammetry were analysed taking into account the IPA. Based on the results of the screening design, a central composite design (CCD) 2³ optimization procedure was performed with the remaining variables (V2, V6 and V8) to identify the best experimental conditions for manufacturing the MIP sensor. From the Pareto plot, the response surfaces and the contour plots yielded the optimized condition, whose optimal points were [HCT] 66 µM, pH 5.45 and incubation time of 45 seconds. After the optimization of the CDD, the superficial characterizations proved the success of the modifications of the sensor. The MIP sensor presented a linear concentration range of 5.0 to 100.0 µM with limits of detection and quantification of 2.1 and 6.3 µM, respectively, and sensitivity of 5.4×10⁵ A mol⁻¹ L by square wave voltammetry (f=10Hz, ΔE_p=60mV e ΔE_s= 12 mV). Interference experiments indicate that the MIP sensor is highly specific to HCT. Therefore, the developed electrochemical MIP sensor can be applied successfully for detection of HCT in real samples.

Acknowledgments

Chemistry Institute/UNESP Araraquara, CNPq (170176/2017-7), CAPES and INCT-DATREM (CNPq 465571/2014-0 and FAPESP 2014/03679-7)].

1 DEVENTER, K. et al. Journal of Chromatography A, 1216(12),2466–2473, 2009.

2 List of Prohibited Substances and Methods: Prohibited Substances (2018). www.wada-ama.org.

3 DEVENTER, K. et al. Journal of Chromatography A, 1216(31),5819–5827, 2009.

Área: _____ **Nº de Inscrição:** _____
 (Inserir a sigla da seção científica para qual o resumo será submetido. Ex: ORG, BEA, CAT) (Inserir o número de inscrição do autor que fez a submissão)

Eu³⁺ β-diketonate silica coated persistent luminescent materials

Leonardo H. C. Francisco(PG)^{1*}, Francine F. S. Salvador(PG)¹, Renan P. Moreira(PG)¹, Ian P. Machado(PG)², Leonnam G. Merizio (PG)², Everton Bonturim(PQ)¹⁻³, Hermi F. Brito(PQ)² and Maria C. F. C. Felinto(PQ)^{1*}.

mfelinto@ipen.br; leo.francisco@usp.br

¹Nuclear and Energy Research Institute, University of São Paulo, SP, Brazil; ²Institute of Chemistry, University of São Paulo, SP, Brazil; ³Mackenzie Presbyterian University

Keywords: Persistent luminescent, Silica-coating, β-diketonate.

Highlights

¥Persistent phosphor prepared via Pechini method.¥ Silica functionalization using microwave method.¥ Eu²⁺ emission observed on coated particles.¥ Eu³⁺β-diketonate complex influence persistent luminescence.

Abstract

Recently, research on persistent luminescent materials leans to high-quality nanoparticles with specific requirements on design methodology, morphology and functionalization [1,2]. In this work, the persistent phosphor SrAl₂O₄:Eu²⁺,Dy³⁺ was prepared via Pechini method annealing at 1100 °C using granular coal as reducing agent. Furthermore, the luminescent material and APTES were used for the synthesis of luminescent silica coated particles by the microwave method. Moreover, SrAl₂O₄:Eu²⁺,Dy³⁺ particles were also decorated with a silica coating and Eu(TTA)₃•2(4-picNO) complex. For the characterization of these materials XRPD, IR, UV-Vis, SEM, VUV-UV and photoluminescence spectroscopy were used. The luminescence spectra of these materials show a broad emission band centered around 504 nm, assigned to Eu²⁺ 4f⁶5d¹→4f⁷(⁸S_{7/2}) transition and narrow emission bands that were assigned to the intraconfigurational 4f⁶ Eu³⁺ transitions, ⁵D₀ → ⁷F_J (J = 1, 2 and 4). The reduction process Eu³⁺ to Eu²⁺ was not one hundred percent efficient, confirmed by the lines of Eu³⁺ observed in the spectrum of SrAl₂O₄:Eu²⁺,Dy³⁺ particles. Moreover, the silica coated materials exhibit a different spectral profile, suggesting that has an effective interaction between the inorganic host, the silica network and the β-diketonate complex.

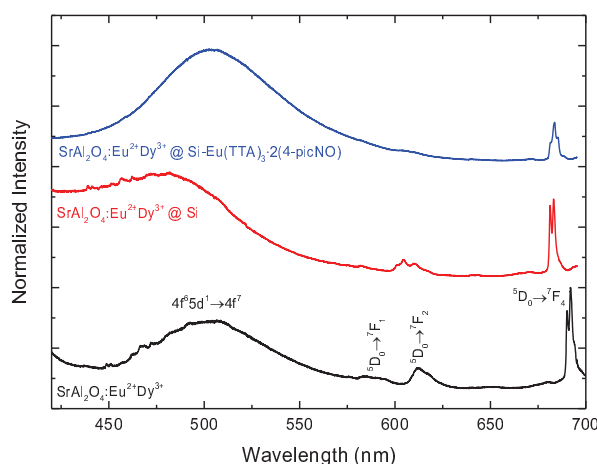


Fig.1: Emission spectra of SrAl₂O₄:Eu²⁺,Dy³⁺ compounds at λ_{exc}:377nm

Acknowledgments

The research was supported the funding agencies CNPq and CAPES and the authors acknowledge the TGM-line at LNLS laboratory by the technical support

References

- [1] E. Bonturim at all, *J Alloys Compd.*, **732**, 705-715 (2018)
- [2] A. Lourenço at all, *J Inorg Biochem.*, **123**, 11-17 (2013)

Área: INO

(Inserir a sigla da seção científica para qual o resumo será submetido. Ex: ORG, BEA, CAT)

Nº de Inscrição: 01606

(Inserir o número de inscrição do autor que fez a submissão)

Antibacterial Activity of the Nitrosyl Ruthenium Complexes with General Formula $[RuCl_3NO(N-N)]$ (N-N = phen and bpy)

Cid Pereira* (PQ), Denise O. Guimarães (PQ), Samantha M. Martins (PQ), Rodrigo de S. Melo (PQ).
cid.pereira@gmail.com

Universidade Federal do Rio de Janeiro – Campus Macaé Prof. Aloísio Teixeira

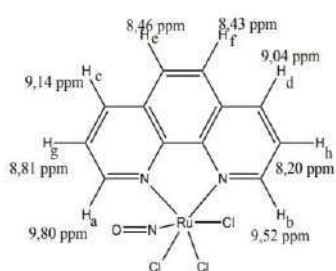
Palavras Chave: Antibacterial, Ruthenium, Nitrosyl

Highlights

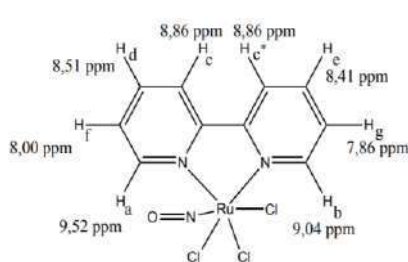
Nitrosyl Ruthenium Complexes with General Formula $[RuCl_3NO(N-N)]$ (N-N = phenanthroline and Bipyridine) were synthesized and their antibacterial activity against *Staphylococcus aureus* and *Escherichia coli* were evaluated.

Resumo/Abstract

Due to the great importance of the NO molecule in the biological system, nitrosyl ruthenium complexes have been studied. Here, we reported the antibacterial activity of two nitrosyl ruthenium (II) complexes: $[RuCl_3NO(phen)]$ [1] and $[RuCl_3NO(bpy)]$ [2] where phen = 1,10-phenanthroline and bpy = 2,2'-Bipyridine, that were synthesized using a simple and effective pathway. Both complexes were obtained from $RuCl_3NO$ in methanol solution and added the ligand. The compound [1]; yield 25.8%; $\nu(NO)$ 1876 cm^{-1} ; 1H (400 MHz, DMSO) δ (ppm) 9.80(d, J = 5.1 Hz, 1H, Ha), 9.52(d, J = 5.0 Hz, 1H, Hb), 9.14(d, J = 8.0 Hz, 1H, Hc), 9.04(d, J = 8.2 Hz, 1H, Hd), 8.46(d, J = 8.8 Hz, 1H, He), 8.43(d, J = 8.8 Hz, 1H, Hf), 8.33(dd, J = 8.0; 5.4 Hz, 1H, Hg), 8.20(dd, J = 8.1; 5.3 Hz, 1H, Hh); ^{13}C (400 MHz, DMSO) δ (ppm) 153.34(Ca), 150.83(Cb), 144.35(Cc), 143.85(Cd), 142.03(Ce), 140.82(Cf), 131.38(Cg), 130.71(Ch), 128.55(Ci), 128.45(Cj), 127.82(Ck), 126.96(Cl); Λ_M 200 μS . For the compound [2]; yield 28.4%; $\nu(NO)$ 1880 cm^{-1} ; 1H (400 MHz, DMSO) δ (ppm) 9.52(d, J = 5.5 Hz, 1H, Ha), 9.04(d, J = 5.5 Hz, 1H, Hb), 8.89 – 8.83(m, 2H, Hc, c*), 8.51(t, J = 6.6 Hz, 1H, Hd), 8.41(t, J = 7.9 Hz, 1H, He), 8.00(t, J = 6.6 Hz, 1H, Hf), 7.86(t, J = 6.6 Hz, 1H, Hg); ^{13}C (400 MHz, DMSO) δ (ppm) 153.53(Ca), 153.33(Cb), 152.24(Cc), 149.36(Cd), 142.57(Ce), 141.43(Cf), 128.81(Cg), 127.74(Ch), 125.21(Ci); Λ_M 205 μS . The antibacterial activity of compounds was evaluated against gram-positive *S. aureus* (ATCC 25925) and gram-negative *E. coli* (ATCC 25922) bacteria by microdilution method into 96-well plate according NCCLS protocol. Both compounds have their inhibition activity increased when compared to the related compounds without nitrosyl ruthenium ligand (table 1).



Compound 1



Compound 2

Table 1. *S. aureus* and *E. coli* inhibition values of evaluated compounds.

| Compounds | <i>S. aureus</i> inhibition ($\mu g/mL$) | <i>E. coli</i> inhibition ($\mu g/mL$) |
|--------------------|--|--|
| $[RuCl_3NO(phen)]$ | 2 | 4 |
| $[RuCl_3NO(bpy)]$ | 16 | 16 |
| (phen) | 32 | 16 |
| (bpy) | 32 | 128 |

Agradecimentos/Acknowledgments



Synthesis of cinnamic derivatives via click chemistry

Fabiola S. dos Santos (PG),^{1*} Róbson Ricardo Teixeira (PQ),² Rossimiriam P. de Freitas (PQ)¹

Fabiolasuelen92@hotmail.com

¹Departamento de Química- Universidade Federal de Minas Gerais; ²Departamento de Química- Universidade Federal de Viçosa.

Key words: Cinnamic acid, Triazole, Click chemistry.

Highlights

Synthesis of novel cinnamic acid derivatives connected to *para*-substituted aromatic rings through 1,2,3-triazole moiety.

Abstract

Cinnamic acid **1** belongs to the group of auxins, plant hormones responsible for regulating cell growth and differentiation. The cinnamic acid and derivatives present innumerable biological activities, highlighting anticancer, antioxidant, antifungal, anti-inflammatory, antimicrobial, among others.¹ An important tool for the synthesis of bioactive substances is the alkyne-azide cycloaddition, a prototype of "click chemistry". The 1,2,3-triazole ring formed in this reaction has great medicinal interest and has been extensively studied as a pharmacophore group.²

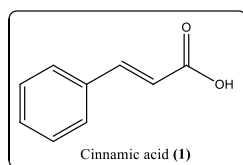
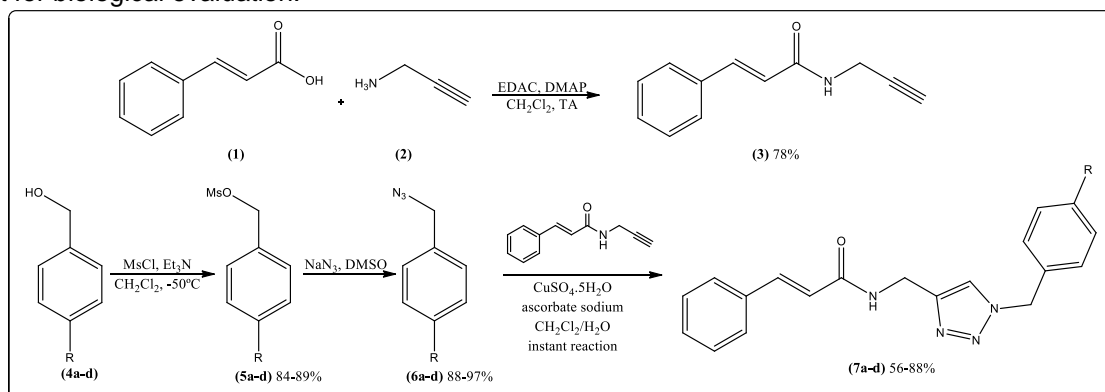


Figure 1: Chemical structure of the cinnamic acid (1).

The synthetic route used for the preparation of novel derivatives **7a-d** involved the initial synthesis of alkyne **3** by reaction between the cinnamic acid **1** and propargylamine **2** under classic coupling conditions. The azides **6a-d** were obtained in 2 steps from commercial benzylic alcohols. Finally, the 1,3-dipolar cycloaddition between azides **6a-d** and alkyne **3** catalyzed by Cu(I) provided the products **7a-d** in yields ranging from 56 to 86%. This strategy allowed the preparation of novel heterocyclic compounds of great interest for biological evaluation.



Scheme 1: Synthetic route for the preparation of compounds **7a-d**.

1. Lima, G. D. A.; Synthesis and antimetastatic activity evaluation of cinnamic acid derivatives containing 1,2,3-triazolic portions. *Toxicol. in Vitro*, **2018**, *53*, 1–9
2. Dheer, D.; Medicinal attributes of 1,2,3-triazoles: Current developments. *Bioorganic Chemistry*, **2017**, *71*, 30-54.

Acknowledgments

CAPES, FAPEMIG, CNPq

42ª Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química: Eixos Mobilizadores em Química

Área: INO

Nº de Inscrição: 01617

Preparation and characterization of new gadolinium complexes with ligands tetrazoles derivatives to act as contrast agents and antitumor

Darlane da Silva Lopes (IC)¹, Simone Rodrigues Silva (PQ)¹

darianelopes3@gmail.com; simone.rodrigues@ufrr.br

¹Departamento de Química, UFRR;

Keywords: complexes, tetrazoles, gadolinium

Highlights

Lanthanides have therapeutic properties. Thus, lanthanide complexes with tetrazoles ligands can contribute more information to these for action as contrast agents and antitumor agents.

Resumo/Abstract

The gadolinium complexes were synthesized from the methanol solution containing 1 mole of ligand (two derivatives of tetrazoles), C₇H₅N₄Br e C₁₃H₈N₄O to 1 mol of the metal (GdCl₃.6H₂O), forming a colorless solution. The precipitates were obtained by slow evaporation of the solution. The complexes were obtained and characterized by the techniques of melting point, conductimetry and UV-Vis spectroscopy. From the melting point obtained for the synthesized compounds, it was observed that the complexes have decomposition at 282 e 245 °C, respectively, differently from binders derived from tetrazoles (C₇H₅N₄Br) and (C₁₃H₈N₄O) having a melting temperature below the decomposition of the compounds. Another technique used to verify the formation of complexes is the electrolytic conductivity that was performed in order to observe the presence or absence of counterions in the structure of the complexes. Through conductivity, the GdC₇H₅N₄Br and GdC₁₃H₈N₄O complexes were found to be neutral and 1: 1, respectively, in methanolic solution, when compared to the reference values for electrolytes cited by Geary (1971).

Tabela 1. Melting range and/or decomposition temperature and the values of electrolytic conductance in methanol solution for the ligands C₇H₅N₄Br and C₁₃H₈N₄O and the complexes of GdC₇H₅N₄Br and GdC₁₃H₈N₄O

| Compound | Melting temperature and / or decomposition point (°C) | Study conductometric (ohm ⁻¹ cm ² mol ⁻¹) |
|---|---|---|
| C ₇ H ₅ N ₄ Br | 256 | 8.77 |
| C ₁₃ H ₈ N ₄ O | 170 | 4.1 |
| GdC ₇ H ₅ N ₄ Br | 282* | 72.82 |
| GdC ₁₃ H ₈ N ₄ O | 245* | 99.74 |

Decomposition temperature *

Through the analysis of the absorbance spectra of the ligands and the complexes it was possible to observe significant differences, in which the absorption bands in the spectra of the complexes moved to a longer wavelength in comparison with the free ligands. The electronic spectrum clearly shows the influence of the metal center. From the obtained results we conclude that Gd(III) complexes were formed with the tetrazoles ligands due to the alterations presented in the melting temperature studies, conductimetric and spectroscopic analyzes. New analyzes are being carried out in order to obtain new structural and therapeutic information on these complexes.

Geary, W.J. (1971) The Use of Conductivity Measurements in Organic Solvents for the Characterisation of Coordination Compounds. Coordination Chemistry Reviews, 7, 81-122.

Agradecimentos/Acknowledgments

CNPq and UFRR for financial support.

Estudo da qualidade da água do rio Macacu, Rio de Janeiro

Isabela Felix de Oliveira Silva (TM),¹ Juliana Aben Athar do Nascimento (TM),¹ João Victor Guidone da Silveira Travassos Gonçalves (TM),¹ Ana Beatriz da Franca Foradini Magalhães (TM),¹ Julianna Maria de Almeida Martins (PQ), Cristiane Ribeiro Mauad (PQ).^{1*}

jujubaathar@gmail.com; cristiane.mauad@ifrj.edu.br

¹Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia do Rio de Janeiro

Palavras Chave: Rio Macacu, Índice de Qualidade da Água, Eutrofização

Highlights

Water quality study of Macacu river, Rio de Janeiro. Determination of the Water Quality Index in five sample points. The water quality obtained for the Macacu river were reasonable, bad and vary bad.

Resumo/Abstract

Introdução

O Índice de Qualidade das Águas (IQA) avalia parâmetros biológicos, químicos e físico-químicos classificando as águas de um corpo hídrico em ótima, boa, razoável, ruim ou péssima⁽¹⁾. O rio Macacu, possui nascente dentro do Parque Estadual de Três Picos no município de Cachoeiras de Macacu e foz na APA de Guapimirim, nordeste da Baía de Guanabara, abastecendo aproximadamente 2,5 milhões de habitantes nos municípios de Cachoeira de Macacu, Guapimirim, Itaboraí, São Gonçalo e Niterói. Em setembro de 2018 coletou-se amostras de água em 5 pontos do rio Macacu com garrafa Van D'orn para avaliação dos parâmetros componentes do IQA (Tabela 1).






Resultados e discussão

Todos os valores de OD obtidos foram acima de 5 mg L⁻¹ (Tabela 1), que é o mínimo para rios de classe 2 de acordo com a resolução CONAMA 357. P1, mais próximo a nascente, apresentou qualidade da água razoável, assim como P3 e P4. Embora P5 esteja localizado na APA de Guapimirim, por se tratar do ponto mais próximo a foz, apresentou péssima qualidade da água visto acumular o impacto de atividades antrópicas ao longo do rio. Os principais parâmetros que contribuíram para essa classificação foram OD, ST, CT e Tur.

Tabela 1: Resultados do cálculo de IQA para os pontos amostrais do rio Macacu, assim como suas coordenadas geográficas e resultados dos parâmetros individuais analisados.

| Ponto | Latitude | Longitude | IQA ^b | Parâmetros individuais ^a | | | | | | | | | |
|-------|--------------|--------------|------------------|-------------------------------------|------------------------------|-----------------------------|-----------------------------|-----------------------------|--------------------|--------------|-----|-------------------|-------------------|
| | | | | OD (mg L ⁻¹) | DBO (mg L ⁻¹) | PT (mg L ⁻¹) | NT (mg L ⁻¹) | ST (mg L ⁻¹) | CT (NMP/100 mL) | Tur (UNT) | pH | T água (°C) | T atm. (°C) |
| P1 | 22°26'31"S | 42°38'12"O | 59 | 9,12 | 0,00 | 0,05 | 9,56 | 34 | 4300 | 0,53 | 6 | 18,5 | 26,0 |
| P2 | 22°28'45,5"S | 42°39'26,5"O | 47 | 9,34 | 0,00 | 0,08 | 6,75 | 31 | 15000 | 1,24 | 6,5 | 20,0 | 25,0 |
| P3 | 22°31'38,4"S | 42°41'21"O | 53 | 10,06 | 1,04 | 0,06 | 12,87 | 96 | 7500 | 2,04 | 7 | 22,0 | 24,0 |
| P4 | 22°35'38,5"S | 42°44'47"O | 55 | 9,77 | 2,10 | 0,12 | 25,26 | 45 | 24000 | 4,63 | 7 | 24,0 | 27,0 |
| P5 | 22°40'34"S | 42°58'26"O | 28 | 5,25 | 1,54 | 0,10 | 16,67 | 252 | 24000 | 18,6 | 7 | 23,0 | 24,5 |

^aOD (oxigênio dissolvido); DBO (demanda bioquímica de oxigênio), PT (fósforo total), NT (nitrogênio total), ST (sólidos totais), CT (coliformes termotolerantes), Tur (turbidez) T (temperature).

^b  Ótima  Boa  Razoável  Ruim  Péssima

Conclusão

O Rio Macacu apresenta trechos de qualidade da água entre razoável, ruim e péssima, mostrando a necessidade de investimentos em saneamento básico para a melhoria da qualidade da água e seu uso para abastecimento público.

Referências

¹LIBÂNIO, M. **Fundamentos de qualidade e tratamento de água**. 3ª edição. Campinas, SP: Editora Átomo, 2010. 496 p.

Área: ELENº de Inscrição: 01658

Cobalt Phthalocyanine Modified Carbon Paste Electrode for the Determination of Carbenzim in Oranges

Flaviana J. R. Severo (PG),^{1*} Anabel S. Lourenço (PG),¹ Edilene T. D. Moreira (PQ),² Mário C.U. Araújo, (PQ)¹, Kátia M. Bichinho (PQ)¹.

katia.bichinho@gmail.com; flavianajust@yahoo.com.br

¹Departamento de Química, UFPB; ²Departamento de Química Fundamental, UFPB

Keywords: Carbendazim, Modified Carbon Paste Electrode, Cobalt Phthalocyanine, Oranges.

Highlights

Simplified and low cost instrumentation for the determination of carbendazim in oranges.
A promising sensitive method for application in other food matrices.

Abstract

Pesticides are widely used to control agricultural pests, ensuring productivity in the industry worldwide. In this context, carbendazim (methyl benzimidazol-2-yl carbamate – MBC) is among the most used for citrus cultivation^[1], and has foliar application regulated in Brazil by ANVISA, which establishes as the acceptable daily intake (ADI) the maximum value of 0.02 mg kg⁻¹ of MBC by body weight^[2]. Chromatographic techniques are the most used for the determination of pesticides in food matrices^[3]. Despite the unquestionable advantages, they are still expensive to food quality control purposes. In this context, the electroanalytical techniques have the advantage of presenting low acquisition cost and high analytical sensitivity. In this work, a cobalt phthalocyanine-modified carbon paste electrode for the determination of carbendazim in oranges was manufactured, a pioneering study of the MBC electrochemical oxidation processes on CoPC-CPE solid surface. The preparation of the work electrode involved the mixing of graphite powder, mineral oil and cobalt phthalocyanine in 1, 3, 5, 7 and 9 % m m⁻¹. The voltammetric techniques used were cyclic (CV) and square wave (SWV) in Britton Robinson buffer electrolyte (pH 4.5). Ag/AgCl and platinum wire were used as reference and auxiliary electrodes, respectively. The linearity range obtained was 95.11 to 667.9 µg L⁻¹, R² = 0.9987, with LOD = 12.0 µg L⁻¹ and LOQ = 40.1 µg L⁻¹. Accuracy studies showed recovery values of 102 %, 93.8 % and 98.2 % of MBC for three different concentration levels, corroborating with the results obtained by the reference method (HPLC-DAD).

[1] Portal ANVISA. Disponível em <http://portal.anvisa.gov.br/programa-de-analise-de-registro-de-agrotoxicos-para>. Acesso em 15/04/2019.

[2] Portal ANVISA. Disponível em <<http://portal.anvisa.gov.br/duvidas-sobre-agrotoxicos-em-alimentos>>. Acesso em 15/04/2019.

[3] Sousa, E. S.; Pinto, L.; Araújo, M. C. U. A chemometric cleanup using multivariate curve resolution in liquid chromatography: quantification of pesticide residues in vegetables. *Microchemical Journal* 134 (2017) 131–139.

Acknowledgments

INCTAA/CNPq (financial support and fellowships); CAPES; PPGQ/CCEN/UFPB; LAQA/DQ/CCEN/UFPB.