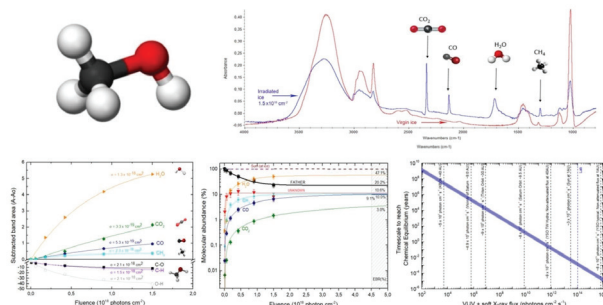


Artigo

- 521 Laboratory investigation of X-ray photolysis of methanol ice and its implication on astrophysical environments

Fabricio M. Freitas and Sérgio Pilling

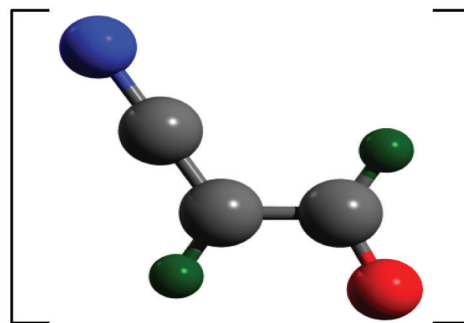
Investigation of X-ray photolysis of methanol ice with identification of produced species, determination of Equilibrium Branching Ratio (EBR) and timescale to reach chemical equilibrium.



- 528 Dinâmica molecular reativa da abertura do anel epóxi em reações com poliamina

Ellen C. A. Rosa, Rene F. B. Gonçalves, Marcela G. Domingues e José A. F. F. Rocco

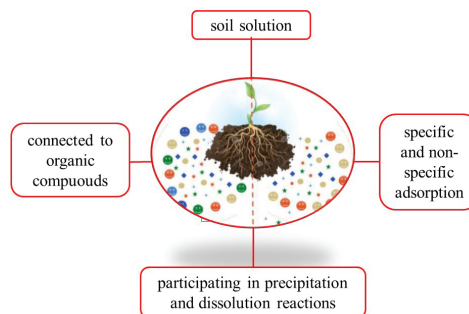
The epoxy ring-opening was studied by molecular dynamics simulations with ethylene oxide and methanediamine. The intermediate product (C_2H_5NO) is shown in the figure above, in which carbon, hydrogen, nitrogen and oxygen atoms are represented in gray, green, blue and red, respectively.



- 534 Valores de referência da concentração de metais pesados em solos na Amazônia central

Ananda G. de M. Rebêlo, M^a Terezinha F. Monteiro, Sávio J. F. Ferreira, Eduardo A. Ríos-Villamizar, Carlos A. N. Quesada e Sergio Duvoisin Junior

Trace metals accumulate in various geochemical phases of the sediment through adsorption, co-precipitation and complexation and can be found in the soil in the forms described in the scheme above.



- 540 Aplicação da fluidodinâmica computacional (CFD) e análise de acelerantes na investigação de incêndio

Igor O. P. da Cunha, Wanderson Romão e Valdemar Lacerda Junior

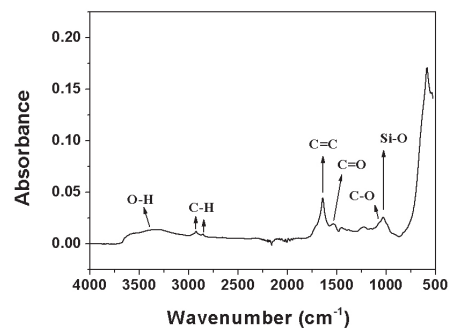
The use of GC-MS in the identification of arson-derived accelerants and computer simulation using FDS to verify whether fire damage is compatible to occur naturally or only with the use of accelerant.



552 Análise espectroscópica da matéria orgânica no sedimento superficial da Baía de Sepetiba, Rio de Janeiro, Brasil

Angelo C. B. Carvalho, Libério J. Silva, Déborah P. Dick, Vanessa de A. Moreira, Murilo de C. Vicente, Antoni F. O. de Andrade, Edison D. Bidone e Elisamara Sabadini-Santos

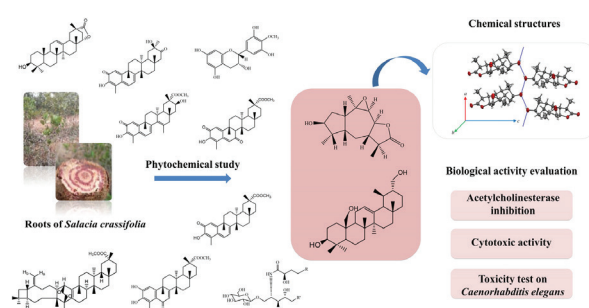
Infrared spectral absorption locations are indicative of functional groups bonds (e.g., aliphatic, amidic, aromatic and carboxylic) which provide important information about organic matter composition of coastal sediments.



558 Phytochemical and biological studies of constituents from roots of *Salacia crassifolia* (Celastraceae)

Josana P. dos Santos, Willian X. C. Oliveira, Sidney A. Vieira-Filho, Rafael C. G. Pereira, Grasiely F. de Souza, Viviane A. Gouveia, Adriano de P. Sabino, Fernanda C. G. Evangelista, Jacqueline A. Takahashi, Marília A. F. Moura, Filipe B. Almeida and Lucienir P. Duarte

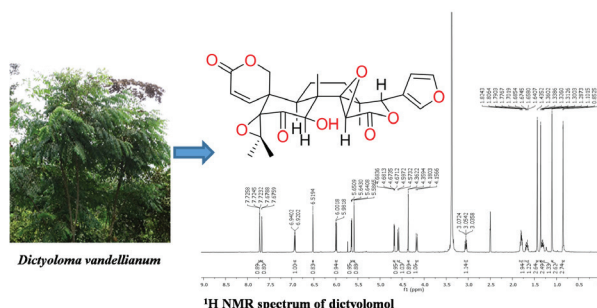
The phytochemical study of the *S. crassifolia* roots led to the isolation of thirteen compounds. Their chemical structures were determined by IR and 1D/2D NMR together with X-ray diffractometry. Extracts of *S. crassifolia* and some of the compounds were evaluated on acetylcholinesterase inhibition, *in vitro* cytotoxic activity and *in vivo* toxicity tests using *Caenorhabditis elegans* model. All tested compounds inhibited acetylcholinesterase. The tested compounds showed low cytotoxicity against the THP-1, K562 and MDA-MB-231 cancer cell lines. None of the tested compounds and extracts were toxic against *C. elegans*.



568 A new *seco*-limonoid from the inflorescences of *Dictyoloma vandellianum*

Laiane C. O. Pereira, Lucas S. Abreu, Mayra B. Silveira, Yuri M. do Nascimento, Thalisson A. de Souza, Mireille Le Hyaric, Thaís M. H. Lisboa, Marianna V. Sobral, Eudes da S. Velozo, Josean F. Tavares e Marcelo S. da Silva

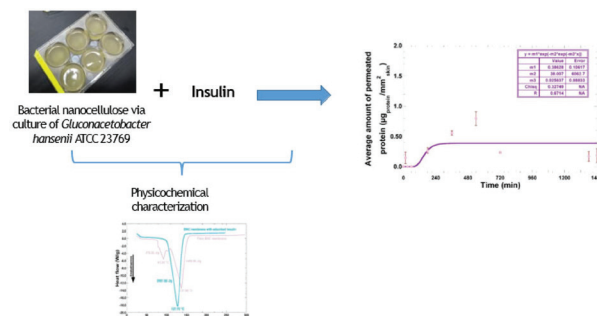
A new A-*seco*-limonoid, dictyolomol, isolated from the inflorescences of *Dictyoloma vandellianum*.



572 Bacterial nanocellulose biomembrane as a support for human insulin aiming at transdermal permeation

Ludmilla R. Jorge, Liliam K. Harada, Erica C. Silva, Welida F. Campos, José M. Oliveira Jr., Marta M. D. C. Vila, Matthieu Tubino and Victor M. Balcão

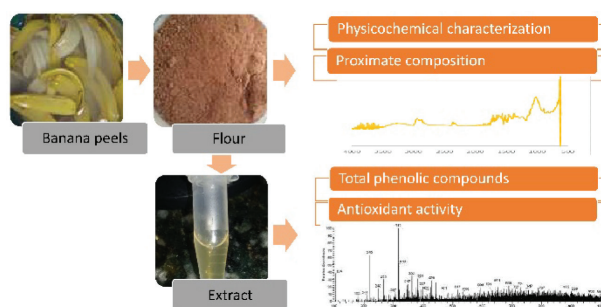
Microbial nanocellulose was utilized as a biomatrix for the physical adsorption of human insulin and, after a full physicochemical characterization, was used in transdermal permeation studies aiming at developing a new route for insulin delivery.



- 579 Use of paper spray-mass spectrometry to determine the chemical profile of ripe banana peel flour and evaluation of its physicochemical and antioxidant properties

Viviane D. M. Silva, Priscila B. F. Arquelau, Mauro R. Silva, Rodinei Augusti, J lio O. F. Melo and Camila A. Fante

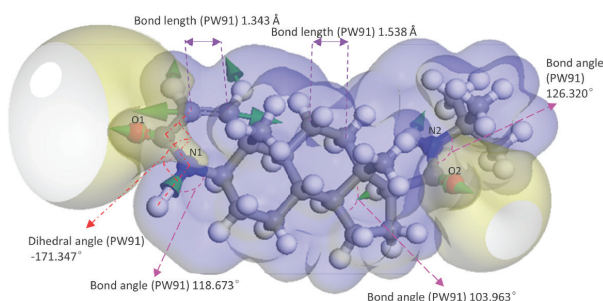
Evaluation of the composition, physicochemical and antioxidant characteristics, and chemical profile of ripe "Prata" banana peel flour.



- 586 Vibrational spectroscopic investigation and molecular structure of a 5 -reductase inhibitor: finasteride

Lin-Jie Wang, William B. Zeng and Song Gao

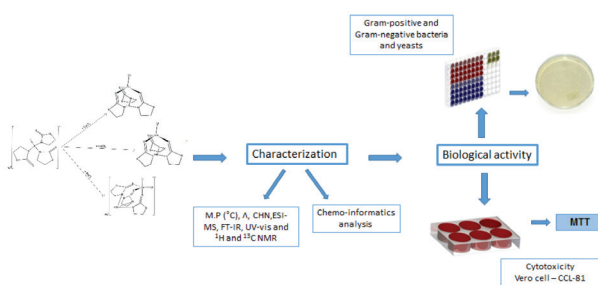
The geometric parameters, vibrational frequencies and frontier molecular orbitals are calculated with PBE, RPBE, HCTH, PW91 and BLYP functionals. Electron density isosurface and atomic charge distribution are calculated to demonstrate the active-site of finasteride.



- 593 Synthesis, characterization and antimicrobial activity of new Cu (II), Co (II) and Sn (II) complexes with the sodium hydrotris(2-mercaptothiazolyl)borate ligand

Lorena S. Ferreira, J ssica T. Andrade, William G. Lima, Juliano de P. Souza, Rafael C. R. Chagas, Camyla A. Leonel, La s C. Cunha, Karina M. S. Herrera, Alysson V. Braga, Lu s F. Soares and Jaqueline M. S. Ferreira

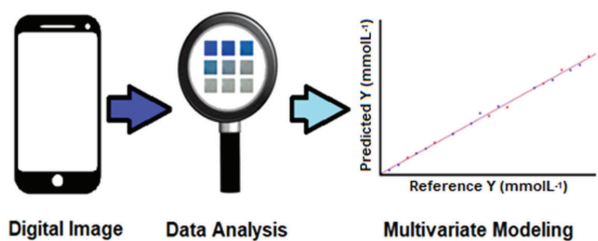
Design, synthesis, characterization and determination of biological activity of scorpionate ligand coordinated with copper (Cu), cobalt (Co), and tin (Sn).



- 599 Multivariate analysis of digital images as an alternative to monitor dye degradation by the Fenton process

Victor H. J. M. dos Santos, Darlan Pontin, Gabriele S. Oliveira, Tiago de A. Siqueira and Marcus Seferin

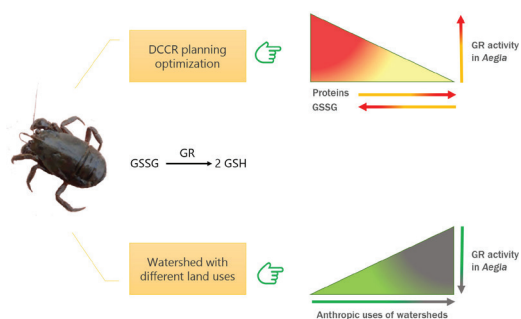
A multivariate method based on the color histogram of digital images can be applied to monitor the degradation of dyes.



607 Padronização da quantificação de glutathiona redutase em *Aegla singularis* (Anomura, Crustacea) utilizando planejamento experimental DCCR

Sabrina M. Albani, Ana P. Borges, Monik C. Martins, Rozane M. Restello, Fernanda D. Camera, Natália Paroul, Rogério L. Cansian e Albanin A. Mielniczki-Pereira

DCCR planning optimization showed that GR activity from *Aegla* increases as function of higher GSSG and lower protein concentration in the reaction. In environmental validation, GR activity was lower in watersheds that presented higher percentage of anthropogenic uses.

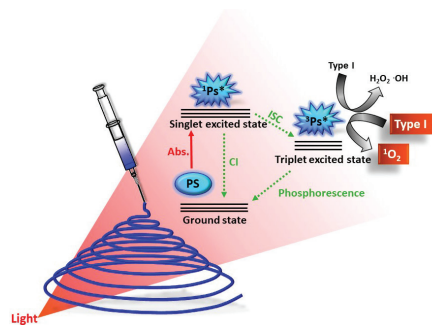


Revisão

613 Terapia fotodinâmica em eletrofiação: revisão de técnicas e aplicações

Ariane R. de S. Rossin, Évelin L. de Oliveira, Flavia A. P. de Moraes, Ranulfo C. da S. Júnior, Desirée T. Scheidt, Wilker Caetano, Noboru Hioka e Douglas C. Dragunski

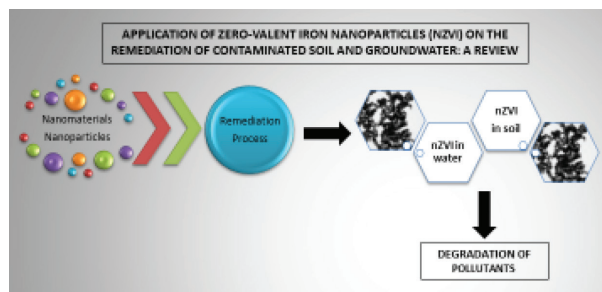
The electrospinning technique can be used in conjunction with photodynamic therapy for the manufacture of materials for medical use. A systematic review of the union of the two techniques is presented.



623 Aplicação de nanopartículas de ferro zero-valente (nFeZ) na remediação de solos e águas subterrâneas contaminadas: uma revisão

Sidiane Manfron, Antonio Thomé, Iziquiel Cecchim e Krishna R. Reddy

Nanotechnology has become an important innovation to be used in soil and contaminated water remediation processes. The zero-valent iron (nZVI) is considered an efficient nanomaterial capable of degrading various types of pollutants.

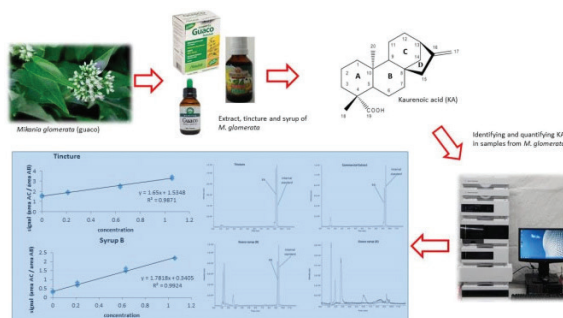


Nota Técnica

632 Kaurenoic acid determination in extract, tincture and syrup of *Mikania glomerata* by HPLC-QQQ-MS/MS

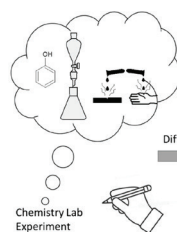
Alan F. C. Moreira, Victor R. Alves, Gustavo A. Micke, Lucas M. Duarte, Nerilson M. Lima and Marcone A. L. de Oliveira

A rapid and reliable method by HPLC-QqQ-MS/MS for identification and quantification of Kaurenoic acid (KA) in extract, tincture and syrup from *Mikania glomerata*. The developed method represents an excellent alternative for agile and efficient analysis of the KA in complex matrices from simple dilution.



Educação

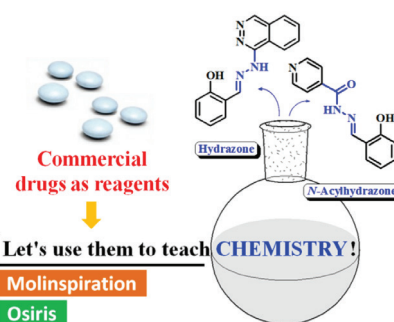
- 636 Avaliação das dificuldades dos estudantes de graduação na elaboração de relatórios de Química Experimental
Klenicy K. L. Yamaguchi, Hudinilson K. de L. Yamaguchi e Jath da S. e Silva



Resultados - 1º Período	Resultados - 2º Período	Resultados - 3º Período	Normas - 1º Período	Normas - 2º Período	Introdução - 1º Período	Referências - 1º Período
Resultados - 4º Período	Resultados - 5º Período	Resultados - 6º Período	Normas - 4º Período	Normas - 5º Período	Introdução - 2º Período	Referências - 2º Período
Resultados - 7º Período	Resultados - 8º Período	Resultados - 9º Período	Normas - 7º Período	Normas - 8º Período	Introdução - 3º Período	Referências - 3º Período
Resultados - 10º Período	Resultados - 11º Período	Resultados - 12º Período	Normas - 10º Período	Normas - 11º Período	Introdução - 4º Período	Referências - 4º Período
Referencial teórico - 1º Período	Referencial teórico - 2º Período	Referencial teórico - 3º Período	Metodologia - 1º Período	Metodologia - 2º Período	Conclusão - 1º Período	Objetivo - 1º Período
Referencial teórico - 4º Período	Referencial teórico - 5º Período	Referencial teórico - 6º Período	Metodologia - 4º Período	Metodologia - 5º Período	Conclusão - 2º Período	Objetivo - 2º Período
Referencial teórico - 7º Período	Referencial teórico - 8º Período	Referencial teórico - 9º Período	Metodologia - 7º Período	Metodologia - 8º Período	Conclusão - 3º Período	Objetivo - 3º Período
Referencial teórico - 10º Período	Referencial teórico - 11º Período	Referencial teórico - 12º Período	Metodologia - 10º Período	Metodologia - 11º Período	Conclusão - 4º Período	Objetivo - 4º Período
					Justificativa - 1º Período	Justificativa - 2º Período
					Justificativa - 3º Período	Justificativa - 4º Período

Evaluating of difficulties of undergraduate on the report of Chemistry Lab Experimental.

- 642 Preparação de hidrazona e *N*-acilidrazona usando fármacos comerciais como reagentes: aulas práticas de síntese de compostos bioativos
Isabella E. Arruda, Brendo V. S. Macedo, Joseane da C. Macedo, Wesley R. A. Campos, Cleônia R. M. Araújo e Arlan de A. Gonsalves



This work shows the application of commercial drugs as alternative reagents for organic chemistry and medicinal chemistry education.

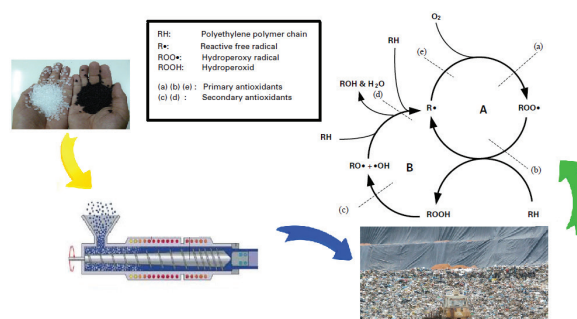
- 649 Sequência didática para a promoção de estudo prático e multidisciplinar com materiais acessíveis
Sharise B. R. Berton, Milena P. Ferreira, Edmilson A. Canesin, Rúbia M. Suzuki, Alessandro F. Martins, Elton G. Bonafé e Makoto Matsushita



A didactic sequence for the study of the environment, extremely important subject and very useful for both academic and personal life.

Assuntos Gerais

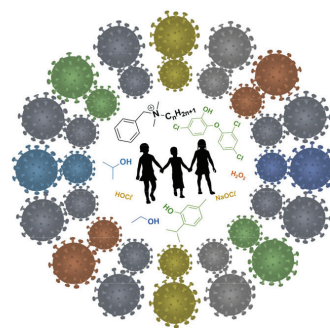
- 656 Durability of HDPE geomembranes: an overview
Fernando L. Lavoie, Marcelo Kobelnik, Clever A. Valentin and Jefferson L. da Silva



This paper summarizes the mechanisms and concepts involved in the HDPE geomembrane aging and describes the important contributions of laboratory and field studies over the years around the world.

- 668 A química dos saneantes em tempos de COVID-19: você sabe como isso funciona?

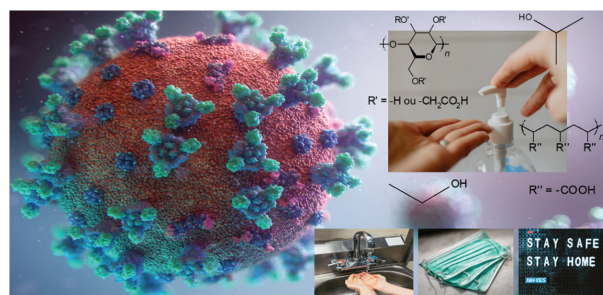
Maria L. S. O. Lima, Ramon K. S. Almeida, Francine S. A. da Fonseca e Caroline C. S. Gonçalves



According to leading global health organizations, sanitizers play an important role in containing COVID-19. With different modes of action, each chemical compound has its particular contribution to protect people and eradicate the pandemic.

- 679 Soluções a base de álcool para higienização das mãos e superfícies na prevenção da COVID-19: compêndio informativo sob o ponto de vista da química envolvida

Rodrigo Sequinel, Guilherme F. Lenz, Francis J. L. B. da Silva e Fabiano R. da Silva



Hand and surface hygiene, associated with social distance and the use of masks, are the most effective measures to prevent the spread of coronavirus and worsening the pandemic.