



# XXXIX Semana da Química e IX Jornada de Pós-Graduação

REFLETINDO OS PRÓXIMOS 50 ANOS: NOVOS HORIZONTES  
PARA O PROFISSIONAL DA QUÍMICA

## ANAIS DA XXXIX SEMANA DA QUÍMICA E IX JORNADA DE PÓS-GRADUAÇÃO

*LONDRINA, PR*

*29 DE OUTUBRO A 01 DE NOVEMBRO DE 2024*

### REALIZAÇÃO



XXXIX SEMANA DA QUÍMICA E IX JORNADA DE PÓS-GRADUAÇÃO

**ANAIS DA XXXIX SEMANA DA QUÍMICA E IX JORNADA DE  
PÓS-GRADUAÇÃO**

Mariana Gava Segatelli (Coordenadora Geral)

Catálogo na publicação elaborada pela Divisão de Processos Técnicos da Biblioteca Central da Universidade Estadual de Londrina

Dados Internacionais de Catalogação-na-Publicação (CIP)

S471a Semana da Química (39. : 2024 : Londrina, PR).  
Anais da XXXIX Semana da Química e IX Jornada de Pós-graduação [recurso eletrônico] : refletindo os próximos 50 anos : novos horizontes para o profissional da química / Mariana Gava Segatelli (coordenadora geral). – Londrina : UEL, 2024.  
1 Livro digital.

Inclui bibliografia.

Disponível em:

<https://www.cbldservicos.org.br/servicos/meus-livros/>  
ISBN 978-65-01-25994-9

1. Química – Congressos. 2. Química – Profissionais – Congressos. 3. Meio ambiente – Congressos. I. Segatelli, Mariana Gava. II. Jornada de pós-graduação (9. : 2024 : Londrina, PR). III. Universidade Estadual de Londrina. IV. Título.

CDU 54

Bibliotecário: Wilson de Souza – CRB 1594/9

## REALIZAÇÃO



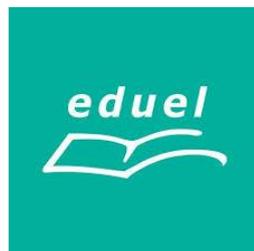
## APOIO



## PATROCÍNIO



## PARCERIA



**COMISSÃO ORGANIZADORA DA XXXI SEMANA DA QUÍMICA E  
IX JORNADA DE PÓS-GRADUAÇÃO**

**Editores:**

Gustavo Fix

Odair Pastor Ferreira

Mariana Gava Segatelli

**Coordenação Geral:**

Mariana Gava Segatelli

**Comissão Científica:**

Odair Pastor Ferreira (Coordenador)

Alexandre Orsato

Camila Suemi Inagaki Ichikawa

Carla Cristina Perez

César Ricardo Teixeira Tarley

Felipe de Almeida La Porta

Fernando César de Macedo Júnior

Gizilene Maria de Carvalho

Jaqueline Tobias de Moraes Pozenato

João Carlos Alves

Josiane Letícia Hernandes

Karina Benassi Angilelli

Luiz Henrique Dall'Antonia

Marcelle de Lima Ferreira Bispo

Marcelo Maia Cirino

Maria Luiza Zeraik

Mariete Barbosa Moreira

Miriam Cristina Covre de Souza

Roberto de Matos

Thiago Nogueira Marques Cervantes

**Trabalhos Apresentados na XXXIX Semana da Química e IX Jornada de Pós-Graduação**

**QUÍMICA ANALÍTICA**

**ANA\_01 – Extração e purificação de hidrocoloide presente no Quiabo**

Amanda Marcelo (AF), Ana Bianco (AF), Clara Daroz (AF), Isabele Almeida (AF), Júlio Costa (AF), Lara Santos (AF), Daniel Bomfim (PG), Leticia A. Bertoldo (PQ)

**ANA\_02 – Sistema de análise por injeção em batelada com detecção amperométrica aplicado à determinação do antidepressivo citalopram**

Ana Carolina M. Fraga (IC), Mayara S. Araújo (PG), César R. T. Tarley (PQ), Roberto de Matos (PQ), Roberta A. Medeiros (PQ)

**ANA\_03 – Desenvolvimento de um método de pré-concentração de  $Hg^{2+}$  em carvão ativado magnetizado com  $Fe_3O_4$  utilizando DMSS-FF-AAS**

Maria F. Brogiato (IC), Diego P. dos Santos (PG), César R. T. Tarley (PQ)

**ANA\_04 – Sensor fotoeletroquímico baseado em  $WO_3$  e polímero molecularmente impresso sobre GO para determinação de protioconazol**

Diego N. G. dos Santos (IC), Maria de A. Silva (PG), Leticia M. Effiting (PG), César R. T. Tarley (PQ)

**ANA\_05 – Determinação de Atividade Antiglicante em Derivados de Cumarinas**

Grazielle J. dos Santos (PG), Maria F. Alvani (GD), Ana H. Ayala (PG), Marcieli Fabris (PG), Marcelle L. F. Bispo (PQ), Carla C. Perez (PQ), Maria L. Zeraik (PQ)

**ANA\_06 – Uso da voltametria aliada ao eletrodo de diamante dopado com boro como alternativa mais verde para determinação de antidepressivo**

Gustavo Fix (PG), Sara C. dos S. Silva (IC), Bruna Coldibeli (PG), Elen R. Sartori (PQ)

**ANA\_07 – Eletrodo de diamante dopado com boro aplicado à determinação nanomolar de agente anti-hipertensivo em diferentes amostras**

Gustavo Fix (PG), Bruna Coldibeli (PG), Elen R. Sartori (PQ)

**ANA\_08 – Análise Exploratória de Produtos Resultantes da Descarga de Pilhas de Zn/ $MnO_2$  por Difração De Raios X e Métodos Quimiométricos**

Gustavo S. Dias (IC), Jair Scarminio (PQ), Paulo R. C. da Silva (PQ), Ieda S. Scarminio (PQ)

**ANA\_09 – Estudo da Adulteração de Cafés Comerciais com Borrás e Classificação por Regressão por Mínimos Quadrados Parciais (PLS)**

Isabely S. Amadeu (PG), Lycio S. Watanabe (PQ), Jaqueline M. G. da Silva (PQ), Maria L. Zeraik (PQ), Suzana L. Nixdorf (PQ)

**ANA\_10 – Avaliação de formaldeído, acetaldeído e acroleína em ambientes impactados por emissões da combustão de misturas diesel/biodiesel**

Isadora Bieleski (PG), Vitor Bonilha (PG), Igor Mantovani (PG), Maria C. Solci (PQ)

**ANA\_11 – Análise metabolômica e evolutiva de vinte e três espécies de Stigmaphyllon (Malpighiaceae)**

Jaqueline M. G. da Silva (PG), Rafael F. de Almeida (PQ), Maria L. Zeraik (PQ)

**ANA\_12 – Identificação de compostos bioativos em quatro espécies de Hiraea (Malpighiaceae)**

Jaqueline M. G. da Silva (PG), Rafael F. de Almeida (PQ), Maria L. Zeraik (PQ)

**ANA\_13 – Desenvolvimento de sensores eletroquímicos utilizando Quantum Dots de Grafeno obtidos por diferentes rotas de síntese: estudo comparativo**

Juliana C. Rolim (PG), Bruno C. Janegitz (PQ), Roberto de Matos (PQ) Roberta A. Medeiros (PQ)

**ANA\_14 – Desenvolvimento de método de derivatização para determinação de esteróis por HPLC-DAD**

Letícia M. Effting (PG), César R. T. Tarley (PQ)

**ANA\_15 – Determinação eletroquímica de íons  $Pb^{2+}$  em micro-cela após pré-concentração em óxido misto  $SiO_2/Sb_2O_5/TiO_2$**

Diego P. dos Santos (PG), Letícia M. Effting (PG), César R. T. Tarley (PQ)

**ANA\_16 – Microextração líquido-líquido de herbicidas em material particulado fino atmosférico: uma alternativa quimicamente sustentável**

Rafael J. Leal (PG), Mayara Araujo (PG), Maikon T. Nascimento (PG), César R. T. Tarley (PQ), Maria C. Solci (PQ)

**ANA\_17 – Avaliação de diferentes pré-tratamentos eletroquímicos para ativação dos eletrodos impressos 3D de GR-PLA**

Mayara Araujo (PG), Maria Oliveira (IC), Roberto Matos (PQ), Cesar Tarley (PQ) Roberta Medeiros (PQ)

**ANA\_18 – Quimiometria aplicada à impressão digital voltamétrica de folhas de erva mate quimicamente modificada**

Mayara M. Fonseca (PG), Bruna Coldibeli (PG), Gustavo G. Marcheafave (PQ), Elen R. Sartori (PQ)

**ANA\_19 – Desenvolvimento e validação de método voltamétrico para a determinação de anti-hipertensivo**

Renan N. Santos (GD), Gustavo Fix (PG), Bruna Coldibeli (PG), Elen R. Sartori (PQ)

**ANA\_20 – Sensor fotoeletroquímico (PEC) baseado em compósito impresso de WO<sub>3</sub> e óxido de grafeno/MIP-iniferter para determinação de creatinina em amostras de urina**

Maria de A. Silva (PG), Leticia M. Effting (PG), Mariana G. Segatelli (PQ), Luiz H. Dall’Antonia (PQ), César R. T. Tarley (PQ)

**ANA\_21 – Potencialidade do eletrodo de carbono vítreo para a determinação de fármaco empregado no tratamento de displasia prostática benigna**

Yasmin M. Silva, (GD), Erica B. Scherlowsk (GD), Renan N. Santos (GD), Bruna Coldibeli (PG), Gustavo Fix (PG), Elen R. Sartori (PQ)

**ANA\_22 – Comportamento e ocorrência de aminas e aminoácidos em partículas atmosféricas: Uma revisão**

Thais F. Alves (PG), Maria C. Solci (PQ)

**ANA\_23 – Qualidade do ar em ambientes escolares: contribuindo para a conscientização e ações mitigatórias de acordo com os ODS**

Franke M. Teste (PG), Maria C. Solci (PQ)

**ANA\_24 – Avaliação Do Uso De Zeólitas Para a Remoção De Contaminantes Emergentes Em Águas Residuais**

Gabriel P. de Moraes (PG), Diana N. R. de Sousa (PQ)

**ANA\_25 – Perfil de poluentes emitidos pela combustão da mistura diesel/biodiesel**

Leticia G. Manzato (PG), Maria C. Solci (PQ)

## **ENSINO EM QUÍMICA**

**ENS\_01 – Menstruação e ciências: relações de poder e papéis de gênero**

Ana C. Hyrycena (PG), Moisés A. de Oliveira (PQ)

**ENS\_02 – A criação e validação de um jogo didático para o ensino da tabela periódica – O nascimento de DMITRI**

Eduardo G. de Sousa (PG), Diana N. R. de Sousa (PQ), Josiane L. Hernandez (PQ), Paulo S. C. Filho (PQ)

**ENS\_03 – Concepções de futuros professores de Química acerca das dimensões da docência**

Eduardo S. da Silva (GD), Fabiele C. D. Broietti (PQ)

**ENS\_04 – Separação de Polímeros em Resíduos Plásticos: Um Estudo Experimental envolvendo o conceito Densidade**

Eduardo S. da Silva (GD), Genivaldo R. P. Lelis (GD), Fabiele C. D. Broietti (PQ)

**ENS\_05 – Relatos de uma aula experimental realizada no estágio de regência do curso de Licenciatura em Química da UEL**

Genivaldo Lelis (GD), Josiane Hernandes (PG), Miriam Souza (PG)

**ENS\_06 – Ações docentes em aulas remotas de Química no Ensino Superior**

Isadora P. Barbosa (PG), Fabiele C. D. Broietti (PQ)

**ENS\_07 – Interações entre as ações docentes e discentes em uma aula experimental de Química no Ensino Superior**

Isadora P. Barbosa (PG), Fabiele C. D. Broietti (PQ)

**ENS\_08 – Eletrodos compósitos à base de grafite-epóxi e coloides de nanopartículas de Ag para demonstrações práticas de ensino de eletroquímica**

Lohan R. Ychisawa (IC), Pablo C. Soto (PG), Gabrielle Sarto (PG), Gabriela V. de Mello (IC), João Vitor Martins (PG), Thiago N. M. Cervantes (PQ), Lucio C. de Almeida (PQ)

**ENS\_09 – A concepção infantil sobre a Ciência e cientista: uma pesquisa de campo em escolas londrinenses**

Isadora V. Quimentoni (GD), Lívia M. G. Delvechio (GD), Jaqueline M. G. da Silva (PG), Daiane de J. G. Horas (GD), Daniel A. Alves (GD), João H. de O. Altieri (GD), Carla C. Perez (PQ), Fabiele C. D. Broietti (PQ), Roberta A. Medeiros (PQ), Maria Luiza Zeraik (PQ)

**ENS\_10 – Mutação climática: uma análise de Love Death & Robots**

Matheus E. D. de Godoy (PG), Matheus R. da Silva (PG), Moisés A. de Oliveira (PQ)

**ENS\_11 – (Des)Afetos à produção científica promovidos pelas Operações Psicológicas no Brasil**

Matheus R. da Silva (PG), Moisés A. de Oliveira (PQ)

**ENS\_12 – Adaptação de embalagens de medicamentos para aplicação em experimentos de química nas escolas**

Mayara M. Fonseca (PG), Renan N. Santos (IT), Thaianie L. Aleluia (GD), Lohan R. Ychisawa (IC), Bruna Coldibeli (PG), Elen R. Sartori (PQ)

**ENS\_13 – Conectando o conteúdo teórico com problemas reais no ensino da Química Aplicada ao Meio Ambiente**

Milene G. de Almeida (PG), Marcelo M. Cirino (PQ)

**ENS\_14 – Abordagem Multimodal no Ensino de Cinética Química: Rotações por Estações de Aprendizagem**

**Nathan Silva (GD), Josiane Hernandes (PQ)**

**ENS\_15 – Desafios e Contribuições das Redes Sociais no Ensino de Química**

Raí M. Santos (GD), Diana N. R. Sousa (PQ)

**ENS\_16 – Indicador ácido-base natural e substâncias do cotidiano para o ensino de Ciências na Educação Infantil**

Bruna S. Araújo (GD), Agata V. de Sousa (GD), Jaqueline M. G. da Silva, Ana L. S. Pacheco (GD), Isabele S. B. Oliveira (GD), Carla C. Perez (PQ), Fabiele C. D. Broietti (PQ), Roberta A. Medeiros (PQ), Maria Luiza Zeraik (PQ)

**ENS\_17 – Ensino de Biotecnologia a partir de uma abordagem investigativa**

Jefferson S. A. Hachiya (PQ), Dão Pedro C. Neto (PQ), Flavia Trzeciak (PQ), Maria Clara Pierolli (IC), Octávio M. Nishikawa (IC)

**ENS\_18 – Recursos Educacionais Abertos (REA) como ferramenta mediadora no processo do ensino e aprendizagem de Química**

Milene G. de Almeida (PG), Marcelo M. Cirino (PQ)

**FÍSICO QUÍMICA**

**FIS\_01 – Influência dos Precursores de  $g\text{-C}_3\text{N}_4$  na Adsorção do Azul de Metileno**

Daina Buelvas (PQ), Alexandre Urbano (PQ), Ricardo Vignoto (PQ), Felipe La Porta (PQ)

**FIS\_02 – Desenvolvimento de membranas porosas de celulose vegetal/PVP**

Francisnara Tonholi (PG), Paula Silva (PG), Julia E. S. Gouveia (PG), Sara Novak (PQ), Gizilene Carvalho (PQ)

**FIS\_03 – Influência do solvente hidróxido de bis(etilenodiamina)cobre (II) nas propriedades físicas e químicas da celulose**

Francisnara Tonholi (PG), Julia E. S. Gouveia (PG), Paula Silva (PG), Gizilene M. de Carvalho (PQ)

**FIS\_04 – Efeito do tautomerismo nas propriedades eletrônicas do Yariv**

Rafael G. de Pádua (PG), João P. A. de Jesus (PG), Ana C. S. Camargo (IC), Sidney A. Lourenço (PQ), Felipe A. La Porta (PQ), Renato M. R. Viana (PQ), Marco A. T. da Silva (PQ)

**FIS\_05 – Efeito do metabolismo de fármacos no tratamento de SARS-CoV-2 a partir de uma perspectiva inteiramente computacional**

João P. A. de Jesus (PG), Letícia C. Assis (PQ), Alexandre A. de Castro (PQ), Elaine F. F. da Cunha (PQ), Eugenie Nepovimova (PQ), Kamil Kuca (PQ), Teodorico C. Ramalho (PQ), Felipe A. La Porta (PQ)

**FIS\_06 – Produção de carvão ativado a partir da polpa de caju e sua modificação com vanadato de bismuto**

João V. P. de Carvalho (IC), Justem C. Có (PG), Luan P. Camargo (PG), Odair P. Ferreira (PQ), Luiz H. Dall'Antonia (PQ)

**FIS\_07 – Efeitos da dissolução em ácido trifluoroacético nas características da celulose**

Julia E. S. Gouveia (PG), Franciscara Tonholi (PG), Gizilene M. de Carvalho (PQ)

**FIS\_08 – Produção e caracterização de blendas de poli(ácido láctico)/Triacetato de celulose**

Letícia C. Bacon (PG), Gizilene M. Carvalho (PQ)

**FIS\_09 – Heteroestrutura de trióxido de tungstênio e vanadato de ferro: fortalecimento sinérgico para aplicações fotoeletroquímicas**

Luan P. Camargo (PG), Marcelo R. S. Pelissari (PQ), Paulo R. C. da Silva (TC), Luiz H. Dall'Antonia (PQ)

**FIS\_10 – Esquema-Z utilizando  $\text{BiVO}_4/\text{Cu}_2\text{O}$  e  $\text{BiVO}_4/\text{Cu}_2\text{O}/\text{NiO}$  para reação de evolução de hidrogênio**

Maurício R. S. C. de Oliveira (PG), Roberta A. Medeiros (PQ), Alexandre Urbano (PQ), Roberto de Matos (PQ)

**FIS\_11 – Heterojunção  $\text{BiVO}_4/\text{NiO}$  produzida por RF magnetron sputtering para uso na reação de evolução de hidrogênio**

Maurício R. S. C. de Oliveira<sup>1</sup> (PG), Alexandre Urbano (PQ), Roberto de Matos (PQ)

**FIS\_12 – Aplicação de voltametria cíclica e espectroscopia de impedância eletroquímica para determinação da capacitância nanotubos de  $\text{TiO}_2$**

Pablo C. Soto (PG), Gabriela V. de Melo (GD), Lohan R. Ychisawa<sup>1</sup> (IC), João Vitor Martins (PG), Gabrielle Sarto (PG), Beatriz V. Duarte (PG), Thiago N. M. Cervantes (PQ), Lucio C. de Almeida (PQ)

**FIS\_13 – Detecção de adenina e adenosina por voltametria de pulso diferencial**

Tallita S. e Silva (PG), Luan P. Camargo (PG), Luiz Henrique Dall'Antonia (PQ), Dimas A. M. Zaia (PQ)

**FIS\_14 - Explorando Heterojunções  $\text{CuO}/\text{TiO}_2$ : Uma Abordagem Fotoeletrocatalítica para Produção de Hidrogênio**

Thifany M. T. Makita (IC), Gabriel de F. Borba (IC), Luiz H. Dall'Antonia (PQ), Roberta A. Medeiros (PQ), Roberto de Matos (PQ)

**FIS\_15 – Avaliando a hidrofiliabilidade do poliácido láctico modificado superficialmente com metacrilato de glicidil**

Vinicius A. M. Gomes (PG), Gizilene M. Carvalho (PQ)

**FIS\_16 – Influência da solução coletora no índice de intumescimento de hidrogéis de celulose e alginato**

Paula Silva (PG), Vinicius Gomes (PG), Franciscara Tonholi (PG), Gizilene Carvalho (PQ)

**FIS\_17 – Síntese e caracterização BiVO<sub>4</sub> ancorado em nanotubos de carbono (CNT) com foco na detecção eletroquímica de glicose**

Willian A. dos Santos (PG), Luiz Henrique Dall'Antonia (PQ)

**FIS\_18 – Nanoestruturas de TiO<sub>2</sub> decoradas com Ag e seu uso como substratos SERS recicláveis**

Beatriz V. Duarte (PG), Thiago N. M. Cervantes (PQ), Lucio C. de Almeida (PQ)

**FIS\_19 – Perspectiva das aplicações de nanotubos de TiO<sub>2</sub> aut dopados**

Gabriela V. de Melo (GD), Pablo C. Soto (PG), Gabrielle Sarto (PG), João V. Martins (PG), Lohan R. Ychisawa (GD), Beatriz Duarte (PG), Thiago N. M. Cervantes (PQ), Lucio C. de Almeida (PQ)

**FIS\_20 – Filmes de TiO<sub>2</sub> decorados com nanopartículas de Au para a determinação de amostras orgânicas por técnica SERS**

Gabrielle Sarto (PG), Pablo C. Soto (PG), João V. Martins (PG), Lohan R. Ychisawa (GD), Thiago N. M. Cervantes (PQ), Lucio C. Almeida (PQ)

**FIS\_21 – Influência de diferentes parâmetros no desempenho eletroquímico de supercapacitores**

João Vitor Martins (PG), Gabrielle Sarto (PG), Pablo C. Soto (PG), Beatriz V. Duarte (PG), Lohan R. Ychisawa (GD), Thiago N. M. Cervantes (PQ), Henrique de Santana (PQ), Lucio C. Almeida (PQ)

**FIS\_22 – Síntese, purificação e caracterização da celulose bacteriana provenientes de Scooby's de Kombucha**

Brunno F. S. Mussere (AF), Gizilene M. de Carvalho (PQ), Letícia A. Bertoldo (PQ)

**FIS\_23 – Investigação das Propriedades Estruturais e Funcionais do ZnCo<sub>2</sub>O<sub>4</sub> por DRX e FTIR**

Daina Buelvas (PQ), Alexandre Urbano (PQ), Felipe La Porta (PQ)

**FIS\_24 – Eletrofição de fibras de celulose/álcool polivinílico/sulfato de condroitina para aplicações biomédicas**

Julia E. S. Gouveia (PG), Franciscara Tonholi (PG), Gizilene M. de Carvalho (PQ)

**FIS\_25 – Origem da vida? A influência de minerais e bases nitrogenadas na seleção de aminoácidos proteicos**

Tallita S. e Silva (PG), Dimas A. M. Zaia (PQ)

**FIS\_26 – Síntese hidrotérmica de nanoestruturas de Co<sub>3</sub>O<sub>4</sub> para aplicações fotocatalíticas**

Tânia Iinuma (PG), Bruno R. Rodrigues (PG) e Felipe A. La Porta (PQ)

**FIS\_27 – Estudo da eficiência do tratamento de impregnação por meio de resina poliuretana à base de mamona nas propriedades mecânicas da madeira Pinus Taeda**

Carmen L. B. Guedes (PQ), Maria G. P. de Souza (IT), Marcos V. de Camargo (PQ)

## **QUÍMICA INORGÂNICA**

**INO\_01 – Extração sequencial de elementos potencialmente tóxicos de resíduo de mineração após o acidente de Mariana/MG**

Barbara L. Kroetz (PG), Letícia A. Bertoldo (PG), Angelita A. Ribeiro (PG), Cecília Sacramento (PQ), Emilli Frachini (PG), Taufik Abrão (PQ), Maria J. Santos (PQ)

**INO\_02 – Análise de risco ambiental na bacia hidrográfica do Rio Doce após o rompimento da barragem do Fundão em Mariana/MG**

Barbara L. Kroetz (PG), Letícia A. Bertoldo (PG), Angelita A. Ribeiro (PG), Cecília Sacramento (PQ), Emilli Frachini (PG), Taufik Abrão (PQ), Maria J. Santos (PQ)

**INO\_03 – Preparação de polímero precursor no sistema Si—C em diferentes condições de cura**

Cauan C. Lemes (GD), Karen L. B. Santos (PG), César R. T. Tarley (PQ), Mariana G. Segatelli (PQ)

**INO\_04 – Caracterização de cerâmicas de carbeto de silício (SiC) ricas em carbono em diferentes temperaturas de pirólise**

Karen L. B. Santos (PG), Cauan de C. Lemes (GD), César R. T. Tarley (PQ), Mariana G. Segatelli (PQ)

**INO\_05 – Desenvolvimento de adsorventes multifuncionais e processo de recuperação por fotocatalise**

Letícia Lakatos (IC), Eduardo C. V. Boas (PG), Renato S. G. de Oliveira (IC), Odair P. Ferreira (PQ)

**INO\_06 – Adsorventes Multifuncionais TiO<sub>2</sub>@carvão ativado e Recuperação por Fotocatalise**

Renato S. G. de Oliveira (IT), Eduardo C. V. Boas (PG) Letícia Lakatos (IT), Odair P. Ferreira (PQ)

**INO\_07 – Materiais carbonáceos para dispositivos de armazenamento de energia**

Pedro R. D. Pereira (PG), Luiz Henrique Dall'Antonia (PQ), Odair P. Ferreira (PQ)

**INO\_08 – Ancoragem de nanopartículas de macro e micronutrientes em (nano)biocarvão para aprimorar a fertilidade do solo**

Antonio Casaroto (PG), Odair P. Ferreira (PQ)

**INO\_09 – Nanoestruturas de BaSnO<sub>3</sub> para aplicações em fotocatalise**

Bruno Rodrigues (PG), Tânia linuma (PG) e Felipe A. La Porta (PQ)

**INO\_10 – Avaliação das propriedades estruturais, composicionais e do tamanho de partícula no desempenho eletroquímico de nanobiocarvões**

Eduardo C. V. Boas (PG), César R. T. Tarley (PQ), Odair P. Ferreira (PQ)

**INO\_11 – Desenvolvimento de nanopartículas de ZnSnO<sub>3</sub> para aplicações fotocatalíticas e biomédicas**

Gabriela A. Veloso (PG), Felipe A. La Porta (PQ)

**QUÍMICA ORGÂNICA**

**ORG\_01 – Abordagem in silico visando a identificação de potenciais inibidores da arginase de Leishmania amazonensis**

João G. A. Cavalcanti (GD), Mariana L. Silva (PG), Kaio M. S. Silva (PQ), Ana C. R. Gimenes (PG), Marcelle L. F. Bispo (PQ) 1

**ORG\_02 – Síntese de arilpirazóis e avaliação de interação com grupo heme**

Ana E. Zielinski (GD), Matheus Bordin (GD), Anna P. Butera (PQ)

**ORG\_03 – Síntese de Derivados Cumarina-Ácido Protocatecuico com Potenciais Antioxidante e Fotoprotetor**

Ana H. F. Ayala (PG), Gabriel F. S. Gomes (PG), Maria L. Zeraik (PQ), Marcelle L. F. Lima (PQ), Carla C. Perez (PQ)

**ORG\_04 – Otimização do Acoplamento CAlk-CAR para Reações Estratégicas de Síntese de Novos Canabinoides Bioativos**

Dimitri Costa (GD), Camila Bernardes (PQ), Henrique Esteves (PQ)

**ORG\_05 – Síntese de feniltriazóis e avaliação do potencial antiplasmodial**

Fabício Santos (PG), Gustavo R. Viana (PG), Renato R. Viana (PG); Anna P. Butera (PQ)

**ORG\_06 – Síntese de derivados triazólicos com potencial antimalárico**

Giovana Marcatto (IT), Anna Butera (PQ), Fabricio Santos (PG), Suzana Nixdorf (PQ)

**ORG\_07 – Formulação e Validação de Odorizante de Ambiente Utilizando o Marketing Olfativo**

Guilbert Gavioli1 (TC), Lucas Capello (TC), Steve Moise (TC), Daniel Bonfim (Orientador)

**ORG\_08 – Derivados cíclicos do aminoácido triptofano com potencial atividade antiviral**

Isadora Sales (IT), Alexandre Orsato (PQ)

**ORG\_09 – Formulação de Tintas à Óleo a partir do Pigmento de Repolho Roxo e Óleo Reutilizado**

Ana Ramos (TC), Emanuelle Ribeiro (TC), Emily Broniera (TC), Iago Santos (TC), Julya Silva (TC), Ygor Peres (TC), Daniel Bonfim (Orientador)

**ORG\_10 – Formulação de Batom Natural à Base de Extratos de Amora (Morus sp) e Beterraba (Beta vulgaris L.)**

Bárbara Xavier (TC), Beatriz Guadanhani (TC), Isabele Leme (TC), Marcela Vitória (TC), Natália Carvalho (TC), Rebeca Cristina (TC), Thayana Geovana (TC), Daniel Bonfim (Orientador)

**ORG\_11 – Descoberta de novos derivados híbridos de cumarina e ácido fenólico como agentes potenciais contra a influenza A**

Mariana L. Silva (PG), Ana H. F. Ayala (PG), Maria Laura G. Dário (PG), Mateus de S. Pedroza (IC), Priscila G. Camargo (PQ), Ligia Carla F. Galhardi (PQ)<sup>2</sup>, Carla C. Perez (PQ) e Marcelle de L. F. Bispo (PQ)

**ORG\_12 – Triagem virtual e síntese de iminoidantoínas frente a enzima diidroorotato desidrogenase de trypanossoma cruzi**

Mateus P. S. Alves (IC), Murilo S. L. Rodrigues (IC), Mariana L. Silva (PG), Marcelle L. F. Bispo (PQ)

**ORG\_13 – Formulação de Protetor Solar com incorporação de Camellia sinensis**

Luiza Lima (TC), Laura Montezin (TC), Gabrielly Oliveira (TC), Miguel Cristovão (TC), Daniel Bonfim (Orientador)

**ORG\_14 – Estudos de docagem molecular de potenciais inibidores da proteína nsP1 do vírus Chikungunya**

Miguel L. da Silva (PG), Luiz Henrique S. Martins (GD), Nathália V. do Amaral (IC), Marcelle L. F. Bispo (PQ)

**ORG\_15 – Determinação de cafeína em folhas de café por RMN**

Nayara Bergo (IC), Aline D. Batista (PQ), Fernando Macedo Jr. (PQ)

**ORG\_16 – Uso de Resido Industrial de Própolis em Possíveis Antimicrobianos Naturais**

Paulo S. R. Zaia (PG), Maria Carolina Carneiro (PG), Nilton S. Arakawa (PQ)

**ORG\_17 – Desenvolvimento e Avaliação de Sabonete Repelente**

Alice Cruz (TC), Daniela Mello (TC), Gabriel Paulino (TC), Gabrielly Alves (TC), Giovanna Dias (TC), Julie de Oliveira (TC), Raissa De Oliveira (TC), Tauany Dos Santos (TC), Daniel Bonfim (Orientador)

**ORG\_18 – Selenocianatos: em busca de seletividade citotóxica para agentes antiplasmodiais**

Amanda Figueiredo (IC), Gustavo Viana (PQ), Anna P. Butera (PQ)

**ORG\_19 – Síntese de polímero de manose e fucose para aplicação como componente de sistema lipossomal vetorizado para tratamento de tuberculose**

Carolina Kovelis (PG), Anna P. Butera (PQ), Renato R. Viana (PQ), Marcelle Bispo (PQ)

**ORG\_20 – Caracterização anatômica, histoquímica e fitoquímica das partes aladas de Baccharis myriocephala DC (Asteraceae)**

Isabela B. Piacenti (IC), Pedro A. Souza (PG), Cristiano Medri (PQ)

**ORG\_21 – Formulação e aceitação de perfume artesanal utilizando produtos naturais**

Alessandra Isidoro (TC), Asafe De Lucas (TC), Geovanna Beatriz (TC), Letícia Coelho (TC), Maria Beatriz (TC), Daniel Bonfim (Orientador)

**ORG\_22 – Biotransformação fúngica do ácido caurenóico pelo fungo Cunninghamella echinulata e investigação do mecanismo de ação molecular antimicrobiano de seus análogos**

Maria Carolina Carneiro (PG), Nilton S. Arakawa (PQ)

**ORG\_23 – Triagem virtual e síntese de híbridos indol-tiourea como potenciais inibidores de urease**

Maria Eduarda C. da Silva (IC), Mariana L. Silva (PG), Marcelle de L. F. Bispo (PQ)

**ORG\_25 – Bioprospecção de Produtos Naturais Obtidos da Resina de Araucaria columnaris (J.R.Forst.) Hook (Araucariaceae)**

Pedro A. de Souza (PG), Nilton S. Arakawa (PQ)

**ORG\_26 – Isolamento e Caracterização de Produtos Naturais Obtidos de Folhas de Dyckia walteriana Leme (Bromeliaceae)**

Pedro A. de Souza (PG), Cristiano Medri (PQ), Nilton S. Arakawa (PQ)

**ORG\_27 – Síntese e Avaliação de Derivados Cumarina-Pirazol com Potencial Atividade Antioxidante**

Ryan A. Santos (IC), Ana H. F. Ayala (PG), Carla C. Perez (PQ)

**ORG\_28 – Síntese de glicoconjugado e aplicação como componente de sistema lipossomal vetorizado para células tumorais**

Vitória Almeida (PG), Amanda Figueiredo (IC), Anna Butera (PQ), Renato Ribeiro (PQ) e Fernando Macedo (PQ)



Categoria: Trabalho Completo

## Extração e purificação de hidrocoloide presente no Quiabo

Amanda Marcelo<sup>1</sup> (AF), Ana Bianco<sup>1</sup> (AF), Clara Daroz<sup>1</sup> (AF), Isabele Almeida<sup>1</sup> (AF), Júlio Costa<sup>1</sup> (AF), Lara Santos<sup>1</sup> (AF), Daniel Bomfim<sup>1,2</sup>(PG) \*Leticia Alana Bertoldo<sup>1</sup> (PQ). [hansen.amanda.987@gmail.com](mailto:hansen.amanda.987@gmail.com)  
[daniel.mariano.bonfim@escola.pr.gov.br](mailto:daniel.mariano.bonfim@escola.pr.gov.br) [bertoldo.leticia@escola.pr.gov.br](mailto:bertoldo.leticia@escola.pr.gov.br)

<sup>1</sup> Curso Técnico em Química, Centro Estadual de Educação Profissional Professora Maria do Rosário Castaldi, Londrina, PR-Brasil.

<sup>2</sup> Departamento de Educação, Universidade Federal de São Carlos, São Carlos, SP-Brasil

Palavras-Chave: Mucilagem, Hidrocoloide, Quiabo

### Introdução

A espécie (*Abelmoschus esculentus*), conhecida popularmente como quiabo, é um alimento importante da culinária brasileira, biodegradável, biocompatível e não-tóxico. A mucilagem extraída da vagem (baba do quiabo) consiste em uma solução viscosa aquosa formada por um polissacarídeo<sup>(1)</sup>. É indicada para o emagrecimento, pois, após a ingestão, atua como flocculante no organismo, prendendo a gordura e auxiliando em sua eliminação por via das fezes. Adicionalmente, é rica em fibras que cooperam a prolongar a saciedade e auxilia na redução da absorção de gorduras, além de diminuir a velocidade de absorção dos carboidratos dos alimentos. A obtenção da mucilagem usualmente é feita cortando o fruto, triturando-o com água e passando pela filtração simples diversas vezes<sup>(2)</sup>. Diante do exposto, o objetivo deste projeto é extrair, purificar e encapsular o bioativo do quiabo.

### Resultados e discussão

Trituração do Quiabo usando liquidificador industrial



Extração de mucilagem em meio aquoso (proporção: 100 g de quiabo / 300 ml de água destilada)



Filtração simples



Precipitação com álcool etílico P.A. (proporção: 100 ml de solução de mucilagem / 200 ml de álcool) seguida de centrifugação



Pré – secagem do precipitado em estufa a 50°C



Pré – lavagem com acetona



Trituração usando almofariz e pistilo

**Tabela 1.** Testes da aplicabilidade do sólido extraído, simulando o processo digestivo do iogurte na presença e ausência do sólido extraído do quiabo.

Tubo	Água	0,10 Mol/L HCl	iogurte	Mucilagem
1	10ml	22ml	0,0g	2g
2	10ml	22ml	4,0g	2g
3-	10ml	22ml	4,0g	0g

A extração resultou em um hidrocoloide, conforme evidenciado pelos testes de simulação do sistema digestivo humano. No teste 3, a acidificação do meio provocou a separação das fases da do iogurte. Entretanto, no teste 2, as partículas presentes na fase inicial do processo agregaram-se, sedimentado no fundo do recipiente, caracterizando um processo de floculação, demonstrando o potencial do sólido extraído no auxílio do emagrecimento.



**Imagem 1.** Teste de aplicabilidade do sólido extraído

### Conclusões

Os dados apresentados indicam que a mucilagem extraída resultou no hidrocoloide, com potencial para auxiliar no emagrecimento. Dessa forma, estudos de caracterização por TGA, DSC e FT-IR podem ser realizados para compreender melhor o extrato.

### Agradecimentos

À Universidade Estadual de Londrina; Ao CEEP Maria do Rosário Castaldi.

### Referências e notas

- (1) Filho, C. J. A. S.; Estudo de Mucilagem. 2017, 14.
- (2) ZIMMET, P.; ALBERTI, K. G. M.; SHAW, J. Nature, 2001, v.414, p.782-787.



Categoria: Trabalho Completo

## Sistema de análise por injeção em batelada com detecção amperométrica aplicado à determinação do antidepressivo citalopram

Ana Carolina Maia Fraga<sup>1</sup> (IC), Mayara da Silva Araujo<sup>1</sup> (PG), Cesar Ricardo Teixeira Tarley<sup>1</sup> (PQ), Roberto de Matos<sup>1</sup> (PQ), Roberta Antigo Medeiros<sup>1\*</sup> (PQ).

\*ramedeiros@uel.br

<sup>1</sup>Departamento de Química, Universidade Estadual de Londrina, PR - Brasil.

Palavras-Chave: Eletroanalítica, Citalopram, Sistema BIA, BDDE.

### Introdução

O citalopram (CT) é um antidepressivo inibidor seletivo de recaptura de serotonina que se tornou um poluente emergente devido ao seu alto consumo.<sup>1</sup> O sistema de análise por injeção em batelada (BIA – *Batch Injection Analysis*) tem as vantagens de instrumentação simples, baixos volumes de amostra e altas frequência analítica e sensibilidade.<sup>2</sup> O eletrodo de diamante dopado com boro (BDDE – *Boron Doped Diamond Electrode*) possui as vantagens de robustez, ampla faixa de potencial eletroquímico e baixa corrente de fundo.<sup>3</sup> Dessa forma, o objetivo deste trabalho foi o desenvolvimento de método eletroanalítico para detectar eletroquimicamente e quantificar o CT utilizando o sistema BIA, o BDDE e a técnica amperométrica de múltiplos pulsos (AMP).

### Resultados e discussão

Os voltamogramas cíclicos mostraram que a oxidação do CT ocorre em, aproximadamente, 1,4 V. Foi feito um pré-tratamento eletroquímico (-1,5 V por 30 s), na superfície do BDDE, a cada medida voltamétrica, devido à adsorção do produto da reação de oxidação do CT, recuperando, assim, o sinal de corrente obtido no processo de oxidação do CT. Em seguida, os efeitos dos pré-tratamentos eletroquímicos anódico (189 mA.cm<sup>-2</sup> por 30 s) e catódico (-189 mA.cm<sup>-2</sup> por 180 s) sob a superfície do eletrodo foram avaliados, sendo que o pré-tratamento catódico proporcionou melhor efeito eletrocatalítico, indicando melhor interação entre o CT e a superfície do BDDE com terminações, preferencialmente, em hidrogênio. A AMP acoplada ao sistema BIA possibilita a aplicação sequencial de pulsos dos potenciais para detecção do CT e limpeza da superfície do eletrodo, resultando em maior intensidade de corrente e repetibilidade. Foram otimizados o pH do eletrólito suporte, o potencial aplicado para detecção do CT e os dois parâmetros do sistema BIA, chegando-se nos

valores de pH 7,0, potencial de 1,6 V, volume de injeção de 200 µL e speed 5 (123,2 µL s<sup>-1</sup>). A curva analítica (Figura 1) foi obtida na faixa de concentração de CT de 0,5 - 10,0 µmol L<sup>-1</sup>, com uma equação da reta de  $I(\mu\text{A}) = 0,26766 + 354679,5 \cdot [\text{CT}]$ ,  $R^2 = 0,9986$  e limites de detecção de 0,5 µmol L<sup>-1</sup> e de quantificação de 1,69 µmol L<sup>-1</sup>. Por fim, os estudos de repetibilidade intra-dia e inter-dias tiveram um desvio-padrão relativo abaixo de 3% para o intra-dia e abaixo de 6% para o inter-dias.

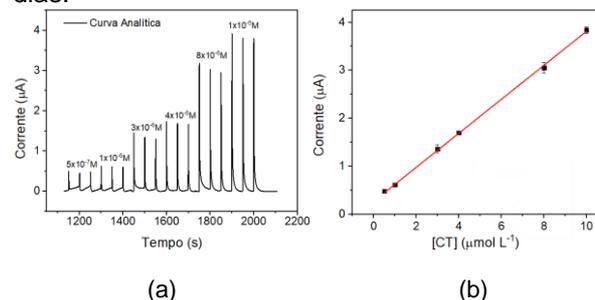


Figura 1. (a) Amperograma e (b) curva analítica obtidos para determinação do CT utilizando o sistema BIA, AMP e eletrólito suporte tampão BR 0,04 mol L<sup>-1</sup> pH 7,0.

### Conclusões

O sistema de análise por injeção em batelada acoplado a detecção amperométrica com o BDDE mostrou-se eficiente para a quantificação do CT, com baixos limites de quantificação e detecção. Como próximas etapas, serão realizadas análises de CT em amostras de medicamentos, urina e águas.

### Agradecimentos

À UEL pela bolsa concedida, à Fundação Araucária e ao CNPq.

### Referências e notas

- (1) JUNIOR, I. L. C.; PLÉTSCH, A. L.; TORRES, Y. R. *Revista Virtual de Química*, **2014**, 6, 5, 1408-1431.
- (2) GUEDES, T. J. et al. *Electroanalysis*, **2017**, 29, 2340-2347.
- (3) UÇAR, M.; LEVENT, A. *Diamond & Related Materials*, **2021**, 117, 108459, 1-7.



Categoria: Trabalho Completo

## Desenvolvimento de um método de pré-concentração de $Hg^{2+}$ em carvão ativado magnetizado com $Fe_3O_4$ utilizando DMSS-FF-AAS

Maria Fernanda Brogiato<sup>1</sup> (IC), Diego P. dos Santos<sup>2</sup> (PG), César R. T. Tarley<sup>2,3</sup> (PQ)\*

[tarley@uel.br](mailto:tarley@uel.br)

<sup>1</sup>Departamento de Ciências Farmacêuticas, Universidade Estadual de Londrina (UEL), PR, Brasil.

<sup>2</sup>Departamento de Química, Universidade Estadual de Londrina (UEL), PR, Brasil.

<sup>3</sup>Instituto Nacional de Ciência e Tecnologia de Bioanalítica, Universidade Estadual de Campinas (UNICAMP), SP, BR.

Palavras-Chave: Mercúrio, DMSS, MSPE, Carvão Magnético.

### Introdução

Atividades humanas e resíduos industriais acabam gerando uma quantidade enorme de mercúrio no ambiente, o que vem causando enorme preocupação devido ao alto consumo de mercúrio estar associado a diversas doenças graves como leucemia, doenças cardíacas e danos renais. A determinação de mercúrio vem sendo realizada por técnicas como Espectrometria de Absorção Atômica de Vapor Frio (CV-AAS), Espectrometria de Absorção Atômica em Forno de Grafite (GFAAS) e Espectrometria de Emissão Atômica com Plasma Acoplado Indutivamente (ICP-AES)<sup>1</sup>, porém são técnicas que apresentam algumas desvantagens como grande volume de amostra, utilização de solventes tóxicos, complexidade de operação além de um alto custo de operação. Recentemente nosso grupo de pesquisa desenvolveu uma nova técnica para pré-concentração de metais chamada Amostragem Direta de Sorventes Magnéticos em Forno Tubular por Espectrometria de Absorção Atômica (DMSS-FF-FAAS)<sup>1</sup>, que consiste em realizar a pré-concentração com nanopartículas magnéticas utilizando o procedimento da Extração Magnética em Fase Sólida (MSPE) sem realizar processos de eluição, inserindo diretamente as partículas magnéticas contendo o analito adsorvido no atomizador de um espectrômetro de absorção atômica em chama.

### Resultados e discussão

Nesse trabalho foi utilizado como adsorvente, carvão ativado magnetizado com  $Fe_3O_4$ . A otimização do método de pré-concentração foi realizada estudando os fatores de pH, massa do adsorvente e tempo de pré-concentração. No estudo do pH foram avaliados nos valores de 3, 4, 5, 6, 7 e 8, onde foi constatado que o melhor sinal era obtido quando utilizado pH 4, devido a maior

disponibilidade de  $Hg^{2+}$  livre presente em solução, favorecendo o processo de adsorção do íon à superfície do material. Massas de adsorvente variando de 1 a 5 mg foram avaliadas, sendo observado maior resposta ao se utilizar 4 mg. O último parâmetro a ser otimizado foi o tempo de pré-concentração onde foi observado um aumento do sinal até 120 segundos de agitação em vórtex mantendo um sinal constante em tempos maiores, o que indica que 120 segundos foi tempo suficiente para completa adsorção dos íons na superfície do material. Até o momento absorvâncias da ordem de 0,5 para uma concentração de mercúrio de  $5 \mu g L^{-1}$  foram obtidas, revelando um poder de detecção similar ao GF AAS. As próximas etapas consistem na realização do ponto de carga zero do material, obtenção da curva analítica, realização dos testes de precisão intra e interdia, análise de possíveis íons interferentes e aplicação do método em amostras reais de alimentos.

### Conclusões

Foi possível realizar de forma satisfatória a otimização do método, obtendo elevados valores de absorvância para baixas concentrações, permitindo se figura promissor e inovador para determinação de mercúrio com baixo custo e elevada sensibilidade.

### Agradecimentos

À UEL e os órgãos de fomento à pesquisa CAPES, CNPq e INCT-Bio.

### Referências e notas

- (1) Dos Santos, P. M., et al. Journal of Analytical Atomic Spectrometry, 38, 2023, 315-324.



**Categoria: Trabalho Completo**

## Sensor fotoeletroquímico baseado em $WO_3$ e polímero molecularmente impresso sobre GO para determinação de protioconazol

Diego N. G. dos Santos (IC)\*, Maria de A. Silva (PG), Leticia M. Effiting (PG), César R. T. Tarley (PQ)\*  
[diego.nascimento@uel.br](mailto:diego.nascimento@uel.br)\*

Departamento de Química, Universidade Estadual de Londrina, PR - Brasil.

Palavras-Chave: Fungicida, fotoatividade, band-gap, MIP.

### Introdução

O protioconazol é um fungicida pertencente à família dos triazóis, muito utilizado no combate de fungos em plantações de cereais, feijões e raízes. A técnica utilizada para a determinação de protioconazol é a cromatografia líquida de alta eficiência, porém a técnica envolve o uso de solventes, preparo de amostra complexo e alto custo de análise. O emprego de técnicas eletroanalíticas, possuem menor custo e tempo de análise e não utilizam solventes orgânicos. Dentre os sensores que podem ser utilizados nos métodos eletroanalíticos, destacam-se os fotoeletroquímicos (PEC), por sua sensibilidade, reprodutibilidade e fácil obtenção. Porém esses sistemas possuem limitações como a baixa seletividade, que pode ser melhorada ao associar tecnologia de impressão química e ainda intensificar a condutividade utilizando fases carbonáceas. Um outro desafio para a determinação do protioconazol está ligado ao fato dessa molécula ser inativa eletroquimicamente, dificultando a sua determinação direta por técnicas eletroanalíticas. Assim a determinação do mesmo por sensores PEC pode ocorrer via efeito de molécula antena, uma vez que o protioconazol apresenta grupos funcionais semelhantes as moléculas que apresentam esse comportamento. Esse estudo tem como objetivo o desenvolvimento de um novo sensor PEC baseado em  $WO_3$  com impressão química ( $WO_{3imp}$ ) e óxido de grafeno (GO)/polímero impresso (MIP) para determinação de protioconazol. Para a produção do GO/MIP foram avaliados dois processos de polimerização, *iniferter* e radicalar livre, com o intuito de verificar se uma polimerização controlada na superfície do GO favorece o desempenho do sensor em comparação a uma síntese não controlada. O processo de impressão química será utilizada uma síntese semi-covalente, inexplorada para o protioconazol como *template*.

### Resultados e discussão

O  $WO_3$  e  $WO_{3imp}$  foram obtidos a partir da dissolução do sal  $Na_2WO_3$  em meio ácido, na ausência e na presença do protioconazol. O óxido de grafeno (GO) foi sintetizado usando o método

Hummers<sup>[1]</sup>. Os GO/MIPs foram obtidos via síntese controlada *iniferter* e radicalar livre, como citado anteriormente. A interação entre *template* e monômero funcional (MF) foi realizada de forma semi-covalente, na qual o MF utilizado, 3-Isopropenil-alfa, alfa-dimetilbenzil isocianato (IPDMBI) estabelece com o Protioconazol uma interação covalente, garantindo ao MIP uma impressão sacrificial. A remoção do *template* é realizada por meio de clivagem química dissociando o grupo isocianato, convertendo-o à um grupo amino, responsável por estabelecer interações não covalentes com o protioconazol nos experimentos de religação. A ligação entre protioconazol e o IPDMBI pode ser confirmada pelo infravermelho do produto de reação, com o desaparecimento da banda de isocianato em  $2251\text{ cm}^{-1}$ . Inicialmente foi avaliado o comportamento da molécula de protioconazol em um sensor PEC também composto por  $WO_3$  e GO em eletrodo base de FTO com eletrólito de  $Na_2SO_3\text{ mol L}^{-1}$ , pH 7, para verificar a viabilidade da determinação de protioconazol via efeito antena. Essa avaliação foi realizada em laser com comprimento de onda de 532 nm. Os resultados foram promissores e para estudos posteriores serão avaliados sensores produzidos via *drop casting*, de todos os materiais impressos sintetizados nesse trabalho ( $WO_{3imp}$ , GO/MIP-*iniferter*, GO/MIP-RL) e com a mistura física do semicondutor e da fase carbonácea ( $WO_{3imp}/GO/MIP$ -*iniferter* e  $WO_{3imp}/GO/MIP$ -RL), além do desenvolvimento de um método analítico para o sensor com melhor resposta. Todos os materiais serão caracterizados estruturalmente, morfologicamente e eletroquimicamente.

### Conclusões

Os estudos iniciais para a determinação de protioconazol por um sensor PEC foram promissores, viabilizando estudos futuros para a quantificação desse fungicida em amostras reais.

### Agradecimentos

LADEMA, CAPES, CNPq, INCT-Bio

### Referências e notas:

- (1) M.C. Prete, et al., *Electrochim. Acta.* 462 (2023).  
<https://doi.org/10.1016/j.electacta.2023.142797>.



Categoria: Trabalho Completo

## Determinação de Atividade Antiglicante em Derivados de Cumarinas

Grazielle Jesus dos Santos<sup>2</sup> (PG), Maria Fernanda Alvani<sup>2</sup> (GD), Ana Heloísa Ayala<sup>2</sup> (PG), Marcieli Fabris<sup>2</sup> (PG), Marcelle de Lima Ferreira Bispo<sup>3</sup> (PQ), Carla Cristina Perez<sup>3</sup> (PQ), Maria Luiza Zeraik<sup>1</sup> (PQ)\*  
zeraikml@uel.br

Departamento de Química, Universidade Estadual de Londrina, Paraná, Brasil.

Palavras-Chave: (Glicação, produtos finais de glicação avançadas, cumarinas).

### Introdução

A reação de glicação é uma reação irreversível que ocorre entre os açúcares e proteínas, resultando na formação dos produtos finais de glicação avançada (AGEs)<sup>(1)</sup>. Os AGEs, quando acumulados na derme, comprometem o tecido, ocasionando alterações na estrutura, levando ao envelhecimento precoce da pele, assim como outras doenças relacionadas ao estresse oxidativo<sup>(2)</sup>. Compostos antiglicantes para o combate destas doenças ainda são escassos. Portanto, o objetivo do estudo foi avaliar a atividade antiglicante de derivados sintéticos de cumarinas.

### Resultados e discussão

A atividade antiglicante foi determinada pelo método adaptado de Ramkisson e colaboradores<sup>(3)</sup>. A Figura 1 apresenta os compostos analisados.



Figura 1. Estrutura química das moléculas testadas:  
(a) **PCUM09**: N-(4-Bromofenil)-2-oxo-2H-1-benzopirano-3-carboxamida e  
(b) **AHA16**: 6-Nitro-3-[3-(3,4-Dihidroxifenil)-Acrilóil]-Cromen-2-ona.

O Quadro 1 apresenta a ordem e volume de adição dos reagentes.

Quadro 1 - Ordem de ensaio para cada reagente, com concentração da amostra em 0,5; 0,1 e 0,05 mmol L<sup>-1</sup>.

	Tampão (μL)	BSA (μL)	Inibidor (μL)	MGO (μL)
Branco	2500	500	-	-
CN	2497,60	500	-	2,4
CP	997,60	500	1500	2,4
Amostra	997,60	500	1500	2,4
Branco A	1000	500	1500	-

As amostras foram incubadas por três dias na temperatura de 37 °C e agitação de 150 rpm. A leitura ocorreu no espectrofotômetro Perkin Elmer VICTOR. Os resultados são descritos na Tabela 1.

Tabela 1 - Tabela da porcentagem de inibição por amostras e seus respectivos desvios.

Amostra	% Inibição	Desvio
PCUM 09 (0,5 mmol L <sup>-1</sup> )	38,3%	8,20%
PCUM 09 (0,1 mmol L <sup>-1</sup> )	90,3%	2,53%
PCUM 09 (0,05 mmol L <sup>-1</sup> )	140,0%	0,90%
AHA 16 (0,5 mmol L <sup>-1</sup> )	82,5%	1,88%
AHA 16 (0,1 mmol L <sup>-1</sup> )	81,0%	6,56%
AHA 16 (0,05 mmol L <sup>-1</sup> )	107,8%	6,12%
Padrão aminoguanidina (10 mmol L <sup>-1</sup> )	52,0%	17,8%

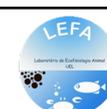
Resultados expressos como média ± desvio padrão (n=3).

A molécula PCUM-09 na concentração 0,05 mmol L<sup>-1</sup> foi a mais eficiente contra a glicação, apresentando inibição maior que o padrão. A PCUM-09 na concentração 0,5 mmol L<sup>-1</sup> não apresentou atividade, uma hipótese é que a baixa solubilidade em altas concentrações interfira no resultado.

### Conclusões

Com exceção da PCUM-09 0,5 mmol L<sup>-1</sup>, as demais amostras apresentaram atividades antiglicantes significativas, com destaque para as concentrações de 0,05 mmol L<sup>-1</sup>, que mostraram os maiores efeitos de inibição.

### Agradecimentos



### Referências e notas

- (1) CERVANTES-LAUREAN, D. et al. *The J. of Nutri. Biochem.* **2006**, 17, 531.
- (2) PAGEON, H. et al. *Cli. Chem. and Lab. Med.* **2014**, 52, 169.
- (3) RAMKISSOON, J. S. et al. *A. Pac. J. of Trop. Med.* **2013**, 6, 561.



Categoria: Trabalho Completo

## Uso da voltametria aliada ao eletrodo de diamante dopado com boro como alternativa mais verde para determinação de antidepressivo

Gustavo Fix (PG)<sup>1\*</sup>, Sara C. dos S. Silva (IC)<sup>1</sup>, Bruna Coldibeli (PG)<sup>1</sup>, Elen R. Sartori (PQ)<sup>1</sup>

[gustavo.londrina@uel.br](mailto:gustavo.londrina@uel.br)

<sup>1</sup> - Departamento de Química, Universidade Estadual de Londrina, PR - Brasil.

Palavras-Chave: Determinação de agomelatina, Validação intralaboratorial, Análise de verdura.

### Introdução

A agomelatina (AGO) é um antidepressivo usado para tratar sintomas de depressão e transtorno de ansiedade generalizada em adultos.<sup>1</sup> O elevado consumo de medicamentos em todo o mundo implica na necessidade de sua determinação para diferentes objetivos. Considerando a nova e necessária tendência mundial da Química Analítica Verde, a voltametria aliada ao eletrodo de diamante dopado com boro (EDDB) surge como uma excelente estratégia para análises de diferentes analitos, em especial os fármacos, apresentando simplicidade, rapidez, baixo custo e altos índices de verdura.<sup>2</sup> Nesse sentido, o presente trabalho tem como objetivo o desenvolvimento e validação intralaboratorial de um método voltamétrico para determinação de AGO em diferentes amostras usando o EDDB.

### Resultados e discussão

Os resultados mostraram que a AGO apresenta processo irreversível de oxidação sobre o EDDB próximo de +1,24 V (solução tampão BR pH 6,0). Estudos das condições experimentais para determinação de AGO foram realizados. O pré-tratamento catódico da superfície do eletrodo foi selecionado e a solução tampão fosfato (pH 3,0) definida como eletrólito suporte. A curva analítica foi construída usando a voltametria de onda quadrada (VOQ; parâmetros: SWV ( $\alpha = 40$  mV,  $f = 20$  Hz,  $\Delta E_s = 4$  mV)) na faixa de concentração de 0,099 – 3,846  $\mu\text{mol L}^{-1}$ , obtendo-se valores de LD e LQ iguais a 0,017 e 0,050  $\mu\text{mol L}^{-1}$ . A linearidade da faixa de concentração foi estudada por meio de análise de regressão linear e teste de falta de ajuste, que demonstraram boa adequabilidade do modelo linear aos dados, segundo a equação:  $I_{pa} / \mu\text{A} = -0,0134 + 0,267 \times [\text{AGO}] / \mu\text{mol L}^{-1}$ . A seletividade do método foi avaliada pela comparação da resposta voltamétrica da AGO ausência e presença dos possíveis interferentes e apresentou valores de DPR menores que 5%

demonstrando a adequada seletividade do método. A precisão do método foi atestada por meio de teste ANOVA em 3 níveis de concentração de AGO e apresentou valores de DPR menores que 8,36%. A exatidão do método para determinação de AGO em amostras farmacêuticas foi avaliada comparando estatisticamente (nível de confiança de 95%) o método desenvolvido com um método espectrofotométrico descrito na literatura<sup>3</sup>. O valor de  $t_{\text{observado}} (0,04) < t_{\text{crítico}}(0,025;2) (4,30)$  indica que não há diferenças significativas entre os métodos. Ademais, a exatidão do método para a determinação de AGO em amostras ambientais (água de torneira e água de rio) e biológicas (urina sintética) foi estudada por testes de recuperação (85,88 – 113,53%). O impacto ambiental do método desenvolvido foi avaliado por meio de uma métrica de verdura<sup>4</sup> apresentando índice de verdura de 0,66, o que demonstra que o método é uma excelente alternativa ambientalmente amigável para determinação de AGO.

### Conclusões

O método desenvolvido e validado apresentou precisão e exatidão para determinação de AGO em amostras farmacêuticas, ambientais e biológicas. Sendo assim, constitui uma alternativa mais simples, rápida, verde e econômica para análises de rotina.

### Agradecimentos

Os autores agradecem as instituições de fomento à pesquisa CAPES, CNPq e Fundação Araucária do Paraná.

### Referências e notas

- (1) D.P. Cardinali, M.F. Vidal, D.E. Vigo, *Clinical Medicine Insights: Psychiatry*, **2012**, 4.
- (2) B. Coldibeli, M.M. Fonseca, R.S. Mariano, C.A.R. Salamanca-Neto, E.R. Sartori, in: J.G. Manjunatha, C.M. Hussain (Eds.), *Recent Dev. Green Electrochem. Sensors Des. Performance, Appl.*, ACS, **2023**.
- (3) F.S. Barbosa, V.C. Rodrigues, N.M. Volpatoa, E.E.S. Schapovalva, M. Steppea, C. V. Garcia, A.S.L. Mendez, *Drug Anal. Res.*, **2017**, 1
- (4) F. Pena-pereira, W. Wojnowski, M. Tobiszewski, *Anal. Chem.*, **2020**, 92.



Categoria: Trabalho Completo

## Eletrodo de diamante dopado com boro aplicado à determinação nanomolar de agente anti-hipertensivo em diferentes amostras

Gustavo Fix (PG)<sup>1\*</sup>, Bruna Coldibeli (PG)<sup>1</sup>, Elen R. Sartori (PQ)<sup>1</sup>

gustavo.londrina@uel.br

1 - Departamento de Química, Universidade Estadual de Londrina, PR - Brasil.

Palavras-Chave: Telmisartana, Voltametria, Validação intralaboratorial, Química Analítica Verde

### Introdução

A hipertensão é uma condição clínica definida como uma pressão arterial persistentemente elevada nos vasos sanguíneos que acomete cerca de 1,28 bilhões de adultos mundialmente. Seu tratamento consiste na prática de uma vida saudável aliada a intervenção medicamentosa com os agentes anti-hipertensivos, como por exemplo a telmisartana (TEL). A TEL faz parte dos Bloqueadores dos Receptores da Angiotensina II, impedindo a ação da angiotensina II, responsável por estreitar os vasos sanguíneos.<sup>1,2</sup> Devido a sua importância farmacológica, muitos métodos analíticos são desenvolvidos para sua determinação em diferentes amostras, seja para controle de qualidade dos medicamentos, ou até mesmo análises de amostras biológicas e ambientais. O emprego da voltametria juntamente com o eletrodo de diamante dopado com boro (EDDB) surge como uma alternativa que vai de encontro com as necessidades atuais por análises mais verdes, simples, rápidas, econômicas, seguras e sensíveis.<sup>3</sup> Sendo assim, o presente estudo visa o emprego do EDDB no desenvolvimento e validação de um método voltamétrico para determinação de TEL em amostras farmacêuticas, biológicas e ambientais.

### Resultados e discussão

O comportamento voltamétrico da TEL foi estudado por voltametria cíclica em solução tampão acetato (pH 5,0) usando o EDDB pré-tratado anodicamente. Os resultados revelaram que a TEL está envolvida em um processo de oxidação irreversível em potencial próximo de +1,33 V controlado preferencialmente pela difusão das espécies. Após a otimização de todas as condições experimentais e parâmetros instrumentais, a curva analítica foi construída usando a voltametria de pulso diferencial ( $\alpha = 100$  mV,  $mt = 4$  ms,  $\nu = 30$  mV s<sup>-1</sup>) na faixa de concentração de 9,98 – 108,80 nmol L<sup>-1</sup>. Os valores de LD e LQ foram determinados em 0,167 e 0,506 nmol L<sup>-1</sup>,

respectivamente. Aos dados experimentais de calibração foi aplicado uma análise de regressão linear e teste de falta de ajuste, que indicaram que o modelo linear é adequado para explicar a relação entre a intensidade de corrente e a concentração da TEL de acordo com:  $I_{pa} / \mu A = 0,0753 + 0,0241 \times [TEL] / \text{nmol L}^{-1}$ . O estudo da precisão do método para dois níveis de concentração de TEL (59,64 e 99,01 nmol L<sup>-1</sup>) apresentou valores de DPR de 5,52 e 2,69% para repetibilidade, e 5,37 e 1,21% para precisão intermediária. O estudo da seletividade do método demonstrou que os compostos testados não exerceram efeito significativo na resposta voltamétrica da TEL (DPR < 8%). A exatidão do método (97,47% e 104,95%) foi demonstrada para amostras de água de torneira, água de rio, água de represa e urina sintética. O método também foi aplicado em amostras farmacêuticas obtendo resultados concordantes com os obtidos por espectrofotometria<sup>4</sup>, a um nível de confiança de 95%. Ainda, o impacto ambiental do método foi calculado em 0,66 e 0,73<sup>5</sup>, indicando o seu elevado índice de verdeza.

### Conclusões

Considerando os resultados obtidos é possível verificar que a voltametria em conjunto com o EDDB proporcionou uma determinação analítica ultrasensível de TEL em formulações farmacêuticas, amostras ambientais e biológicas.

### Agradecimentos

Os autores agradecem as instituições de fomento à pesquisa CAPES, CNPq e Fundação Araucária do Paraná.

### Referências e notas

- (1) WHO, Hypertension, Link: <https://www.who.int/news-room/fact-sheets/detail/hypertension>
- (2) S. Laurent, Pharmacol Res. **2017**, 124.
- (3) B. Coldibeli, M.M. Fonseca, R.S. Mariano, C.A.R. Salamanca-Neto, E.R. Sartori, in: J.G. Manjunatha, C.M. Hussain (Eds.), Recent Dev. Green Electrochem. Sensors Des. Performance, Appl., ACS, 2023.
- (4) F. Pena-pereira, W. Wojnowski, M. Tobiszewski, Anal. Chem., 2020, 92.
- (5) A. Pandey, H. Sawarkar, M. Singh, P. Kashyap, P. Ghosh, Int J Chemtech Res, **2011**, 3.



Categoria: Trabalho Completo

## Análise Exploratória de Produtos Resultantes da Descarga de Pilhas de Zn/MnO<sub>2</sub> por Difração De Raios X e Métodos Quimiométricos

Gustavo Soares Dias<sup>1\*</sup> (IC), Jair Scarminio<sup>2</sup> (PQ), Paulo Rogério Catarini da Silva<sup>2</sup> (PQ), Ieda Spacino Scarminio<sup>1\*\*</sup> (PQ)

1 - Departamento de Química, Universidade Estadual de Londrina, PR – Brasil

2 – Departamento de Física, Universidade Estadual de Londrina, PR – Brasil

\*[gustavo.soaresdias@uel.br](mailto:gustavo.soaresdias@uel.br), \*\*[ieda@uel.br](mailto:ieda@uel.br)

Palavras-Chave: Pilhas alcalinas, Difração de raios-x, Análise de componentes Principais

### Introdução

Segundo a Associação Brasileira de Indústria Elétrica e Eletrônica (ABINEE), no Brasil produz cerca de 800 milhões de pilhas ao ano, as quais 80% são do tipo secas e 20% alcalinas, sendo as alcalinas classificadas com maior vida útil e capacidade de carga dentre a sua célula<sup>1</sup>. Com tamanha produção em larga escala, torna-se de suma importância o descarte e processamento adequado de pilhas utilizadas, visto que os materiais utilizados para a composição das células são metais pesados, com alta capacidade de toxicidade, como chumbo, cádmio e mercúrio. Os metais presentes em seu interior podem vir a contaminar solos, lagos, lençóis freáticos e mares<sup>2</sup>.

Descoberta por Max von Laue em 1912, a Difração de Raios X baseia-se no espalhamento e difração da radiação mediante sua interação com a estrutura interna do sólido analisado. Permite o cálculo de distâncias interatômicas, ângulos de ligação e a descrição da geometria molecular presente (Diniz et al. 2021). Essa técnica é utilizada na pesquisa para que seja possível a observação de mudanças do arranjo cristalino no anodo e catodo da célula interna da pilha, como por exemplo a formação de hetaerolita (ZnMn<sub>2</sub>O<sub>4</sub>) e hausmanita (Mn<sub>3</sub>O<sub>4</sub>).

Portanto, torna-se de suma importância a maior compreensão de fases e estruturas no interior de pilhas alcalinas para a possibilidade de um processo de reciclagem barato e eficaz, além de enfatizar a necessidade de desenvolvimento de estruturas com maior rendimento e menor geração de produtos mediante a descarga.

### Resultados e discussão

Utilizou-se pilhas alcalinas comerciais modelo D 1300, com variação de tempo de descarga de 9 em 9 horas, sendo a descarga completa em 72 h (200mA). Com isso, realizou-se as leituras de amostras obtidas do anodo e catodo,

sendo o primeiro obtido com poucos resultados devido a dificuldade de leitura da amostra obtida.

Em seguida, os dados dos difratogramas obtidos foram utilizados em um modelo matemático de ACP (Análise de Componentes Principais), onde as amostras foram interpretadas com a utilização de três componentes principais, as quais foram interpretadas de acordo com os valores de *loadings*

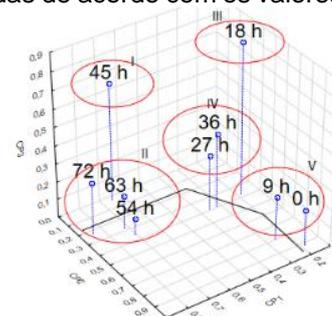


Figura 3. Gráfico dos escores das três componentes principais obtidas nos difratogramas, que explicam 87,23% das variações resultantes.

### Conclusões

Foi possível a diferenciação das amostras com relação aos compostos formados na descarga pela CP1 ( ZnMn<sub>2</sub>O<sub>4</sub> e Mn<sub>3</sub>O<sub>4</sub>), bem como a separação pela fase pura do material em CP2 (β-MnO<sub>2</sub>), com a CP3 separada com relação a concentração de γ-MnOOH.

### Agradecimentos

O autor agradece as instituições de fomento à pesquisa da CAPES, CNPq e Fundação Araucária do Paraná.

### Referências e notas

- (1) ASSOCIAÇÃO BRASILEIRA DA INDÚSTRIA ELÉTRICA E ELETRÔNICA (ABINNE). **Brasileiro consome em média 5 pilhas por ano.**
- (2) TRIGUEIRO, P. H. R. et al. **Disposição de pilha:** consumo sustentável e adequação do ciclo de vida. In: SIMPÓSIO LUSO-BRASILEIRO DE ENGENHARIA SANITÁRIA E AMBIENTAL, 11., Natal. 2004.



Categoria: Trabalho Completo

## Estudo da Adulteração de Cafés Comerciais com Borrás e Classificação por Regressão por Mínimos Quadrados Parciais (PLS)

Isabely S. Amadeu<sup>1</sup> (PG), Lycio S. Watanabe<sup>1</sup> (PQ), Jaqueline M. G. da Silva<sup>1</sup> (PQ), Maria L. Zeraik<sup>1</sup> (PQ), Suzana L. Nixdorf (PQ)<sup>1\*</sup>, snixdorf@uel.br.

1 - Departamento de Química, Universidade Estadual de Londrina, PR - Brasil.

Palavras-Chave: Quimiometria, Química Verde, PLS, NIR, Cafeína

### Introdução

A borra de café, gerada na extração da bebida e em indústrias de café solúvel, pode causar impactos ambientais se descartada incorretamente. Utilizada como fonte de energia via biomassa<sup>(1)</sup>, a qualidade do café é garantida por certificações como o selo ABIC, que classifica os cafés e assegura boas práticas.<sup>(2)</sup> No entanto, há poucos estudos focados na detecção da borra como adulterante nas categorias de café. Este estudo visa desenvolver um método para discriminação de borras de café.

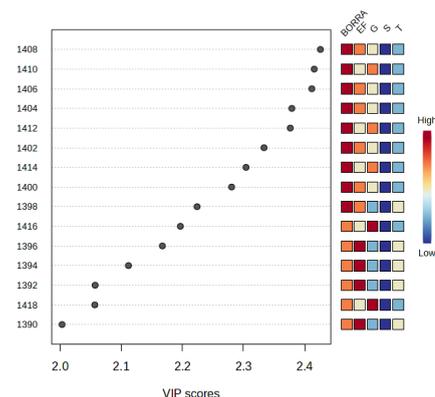
### Resultados e discussão

A partir de 4 marcas comerciais de cafés, que abrangeram os tipos gourmet (G), tradicional (T), superior (S) e extra-forte (EF), os quais foram adulterados com a borra de café em proporções de 1%, 5%, 25% e 50%, 21 blends foram analisados por espectroscopia NIR. Tais medidas foram submetidas às análises quimiométricas. Ferramentas quimiométricas foram aplicadas para estimar os níveis de adulteração, sendo avaliados por meio de métricas como o erro padrão de calibração (SEC), erro padrão de validação cruzada (SECV) e o coeficiente de determinação ( $R^2$ ), conforme Tabela 1.<sup>(3)</sup> O PLS Modificado apresentou o melhor desempenho, com SEC de 1,69, SECV de 3,96 e  $R^2$  de 0,99, evidenciando maior precisão e capacidade de generalização em comparação aos outros.<sup>(3)</sup>

**Tabela 1** – Métricas de desempenho atribuídas aos métodos PLS, PCR e PLS-modificado

Método	PLS				
	Máx	Min	SEC	SECV	R2
	104,977	0	3,32	4,91	0,96
Método	PCR				
	Máx	Min	SEC	SECV	R2
	104,977	0	4,25	4,92	0,96
Método	PLS-Modificado				
	Máx	Min	SEC	SECV	R2
	104,977	0	1,69	3,96	0,99

A fim de verificar os comprimentos de ondas mais relevantes para a discriminação, os espetos NIR foram comparados por PLS-DA. A Análise Discriminante por Mínimos Quadrados Parciais (PLS-DA – Partial Least Squares – Discriminant Analysis) sugere, com 95% de confiança, uma variação considerável nos tipos de café, sendo as medidas próximas a 1408 nm, as responsáveis pelas maiores diferenças químicas dos cafés comparados.



**Figura 1.** Comparação dos cafés e borra por PLS-DA (VIP Score).

### Conclusões

Embora a análise de adulterantes de café seja comumente monitorada por técnicas cromatográficas, a análise por NIR associada a mostrou-se uma alternativa rápida e promissora para o controle de qualidade.

### Agradecimentos

À agência de fomento Araucária pela bolsa concedida e à CMLP-UEL-LAPA pela estrutura laboratorial.

### Referências e notas

- (1) Magnago, R. F. et al. *MIX Sustentável*, v. 5, n. 2, p. 43-53, 2019.
- (2) ABIC. Certificações. Associação Brasileira da Indústria de Café. Rio de Janeiro, RJ. 24 de Janeiro de 2024.
- (3) Pallon, E.; Juliana, A. L. et al. *Current Opinion in Food Science*, v. 22, p. 115-121, 2018.



**Categoria: Trabalho Completo**

## **Avaliação de formaldeído, acetaldeído e acroleína em ambientes impactados por emissões da combustão de misturas diesel/biodiesel.**

Isadora Bieleski<sup>1</sup> (PG), Vitor Bonilha<sup>1</sup> (PG), Igor Mantovani<sup>1</sup> (PG), Maria Cristina Solci<sup>1\*</sup> (PQ)

solci@uel.br

*1 - Departamento de Química, Universidade Estadual de Londrina, PR - Brasil.*

*Palavras-Chave: Compostos Carbonílicos, Emissões, Mistura de combustíveis, HPLC.*

### **Introdução**

As emissões veiculares são responsáveis por grande parte das emissões de gases poluentes presentes na atmosfera. Como forma de diminuir esse impacto, o biodiesel começou a ser implementado no Brasil a partir de 2005, quando se tornou obrigatória a sua adição ao óleo diesel. Em 2007, foi estabelecida a adição de 2% de biodiesel no diesel, e esse percentual vem crescendo desde então, chegando a 12% em 2023<sup>1</sup>. Estudos demonstram que a concentração de acetaldeído no ar aumentou com o sucessivo aumento de biodiesel adicionado na mistura de combustível. Além disso, houve o surgimento de acroleína em ambientes impactados pela combustão, representando impactos negativos na saúde humana<sup>2</sup>. Para determinar a concentração de aldeídos na atmosfera, foi utilizada a técnica de derivatização durante a amostragem do gás poluente devido a sua reatividade e volatilidade. Foram utilizados cartuchos com sílica C18 impregnados com 2,4-dinitrophenilhidrazona para a coleta dos compostos carbonílicos, que posteriormente foram analisados utilizando cromatografia líquida de alta resolução.

### **Resultados e discussão**

Os sistemas de amostragem foram instalados no interior do terminal central de ônibus de Londrina e no pátio externo do Museu Histórico de Londrina, localizados em uma avenida com alto tráfego de veículos, localizados a 114 m de distância entre os dois pontos de amostragem. A primeira coleta foi realizada por 2 semanas em maio de 2019 por um período de 12 horas. A concentração de formaldeído no terminal de ônibus obteve a média de  $6.3 \pm 0.1 \mu\text{g m}^{-3}$  e no museu,  $4.9 \pm 0.1 \mu\text{g m}^{-3}$ . O acetaldeído teve média de  $8.6 \pm 0.1 \mu\text{g m}^{-3}$  no interior do terminal e de  $6.4 \pm 0.1 \mu\text{g m}^{-3}$  no museu histórico. A acroleína medida foi de  $11.7 \pm 0.2 \mu\text{g m}^{-3}$  no terminal e  $7.9 \pm 0.1 \mu\text{g m}^{-3}$  no museu. Foi possível observar que a concentração dos 3 analitos foi maior no terminal central, ou seja, em ambiente interno impactado diretamente pela

combustão de diesel e biodiesel. A mesma amostragem foi realizada em setembro de 2023 por 2 semanas em coletas de 24h, obtendo a média de  $3.7 \pm 0.86 \mu\text{g m}^{-3}$  para formaldeído,  $6.6 \pm 2.7 \mu\text{g m}^{-3}$  para acetaldeído e  $7.6 \pm 3.4 \mu\text{g m}^{-3}$  para acroleína. A concentração total de aldeídos foi 36% menor do que a encontrada em 2019. As concentrações de acroleína medidas na primeira amostragem ultrapassaram os limites recomendados pela OEHTA, apresentando riscos à saúde humana. A concentração de acetaldeído decresceu 36% em relação ao diesel puro, enquanto o formaldeído aumentou 465%. A acroleína não havia sido detectada anteriormente. Foi realizado cálculo de razão diagnóstica para identificar as fontes dos analitos analisados, o que indicou que os compostos são provenientes de ação antrópica, resultado condizente com os ambientes diretamente influenciados pela combustão da mistura diesel/biodiesel em motores de ônibus

### **Conclusões**

Os resultados obtidos no terminal e no Museu Histórico de Londrina indicam que a mistura diesel/biodiesel utilizada em veículos de transporte público influencia na emissão de acroleína, e há indícios de que os níveis desse composto pode aumentar com maiores proporções de biodiesel nas misturas de diesel.

### **Agradecimentos**

LACA, INCT, Fundação Araucária e CAPES

### **Referências e notas**

- (1) BRASIL. Resolução CNPE n.º 16, de 29 de outubro de 2018. Dispõe sobre a evolução da adição obrigatória de biodiesel ao óleo diesel vendido ao consumidor final, em qualquer parte do território nacional. Diário Oficial da União, Brasília, DF, 8 de novembro de 2018, Seção 1. <https://www.legisweb.com.br/legislacao/?id=369098>
- (2) SCHIEWECK, A. Very volatile organic compounds (VVOC) as emissions from wooden materials and in indoor air of new prefabricated wooden houses. Building and Environment, v. 190, p. 107537-107565, 2021. <https://doi.org/10.1016/j.buildenv.2020.107537>.



Categoria: Trabalho Completo

## Análise metabolômica e evolutiva de vinte e três espécies de *Stigmaphyllon* (Malpighiaceae)

Jaqueline M. G. da Silva<sup>1</sup> (PG), Rafael F. de Almeida<sup>2</sup> (PQ), Maria L. Zeraik<sup>1\*</sup> (PQ).  
zeraikml@uel.br

1 - Departamento de Química, Universidade Estadual de Londrina, PR-Brasil; 2 - Royal Botanic Gardens Kew, TW9 3AE, LON - United Kingdom.

Palavras-Chave: Metabólito secundário. Análise cromatográfica; afzelin.

### Introdução

Metabólitos secundários são compostos imprescindíveis para sobrevivência e desenvolvimento de plantas. A presença de metabólitos na família botânica Malpighiaceae, como, derivados da quercetina, ácidos clorogênicos e miricetina está associada a atividades fitoquímicas, como antioxidante e anti-inflamatória. Em adição, o estudo metabolômico também fornece informações valiosas para estudos evolutivos<sup>(1,2,3)</sup>.

A partir da análise evolutiva são estabelecidas novas classificações de espécies e gêneros dentro de uma família botânica. A justificativa de plantas distintas apresentarem mesma atividade fitoquímica e análise do impacto das condições climáticas no desenvolvimento da planta são exemplos dos resultados obtidos em análises evolutivas.<sup>(3)</sup>

O objetivo deste trabalho foi submeter perfis cromatográficos de 23 espécies de *Stigmaphyllon*<sup>(3)</sup> a uma análise evolutiva, de modo a avaliar a presença ou ausência de metabólitos, quando comparados ao outros gêneros.

### Resultados e discussão

A partir da extração hidroetanólica de 23 espécies de *Stigmaphyllon* e análise por Cromatografia Líquida de Ultra Performance acoplada a Espectrometria de Massa (UPLC-MS/MS – Ultra Performance Liquid Chromatography tandem Mass Spectrometry), novas anotações foram realizadas neste gênero.

Com o auxílio de bibliotecas espectrais (GNPS, Massbank e NIST), 96 compostos foram anotados nos perfis cromatográficos das espécies de *Stigmaphyllon*, sinalizando uma diversidade metabolômica, possivelmente, associada a várias atividades químicas e biológicas.

Após a anotação metabolômica, os cromatogramas foram submetidos à análise evolutiva no software Mesquite. Quatro compostos (ácido xanturênico, trifenílfosfina, afzelin e kaempferol-O-acetil-hexosídeo) são encontrados em *Stigmaphyllon* e outros gêneros, como *Banisteriopsis*. Em outras palavras, apesar das diferenças fisiológicas, tais metabólitos são comuns aos gêneros supracitados. Conforme a literatura, o metabólito afzelin é reportado em outras espécies de *Banisteriopsis*, como, *B. malifolia*. A presença de afzelin em *Bunchosia armeniaca* também é relatada, confirmando a variedade metabolômica em Malpighiaceae.<sup>(1)</sup>

Dois compostos, a saber, ácido linoleico e apigenina são metabólitos secundários peculiares a evolução biológica de *Stigmaphyllon*. Dito de outra forma, conforme amostragem, tais metabólitos não foram encontrados em outras amostras, como, *B. anisandra*, *B. adenopoda* e *B. argyrophylla*.

### Conclusões

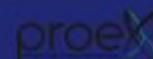
Além de corroborar com novas anotações metabolômicas, este estudo contribuiu para a identificação de compostos similares a outros gêneros e metabólitos peculiares as espécies estudadas.

### Agradecimentos

A Dra. Helena M. Russo, CAPES e CNPq.

### Referências

- (1) Abbas, H. A. et al. *Egy. Journal Chem.*, **2022**, 11, p. 235-274.
- (2) Alexandre, G. P. et al. *An Acad. Bras. Cien.*, **2022**, 95, p. 1 – 25.
- (3) Mannocho-Russo, H. et al. *Front. Plant Sci.*, **2022**, 17, p. 1-19.



Categoria: Trabalho Completo

## Identificação de compostos bioativos em quatro espécies de *Hiraea* (Malpighiaceae)

Jaqueline M. G. da Silva<sup>1</sup> (PG), Rafael F. de Almeida<sup>2</sup> (PQ), Maria L. Zeraik<sup>1\*</sup> (PQ), [zeraikml@uel.br](mailto:zeraikml@uel.br)

1 - Departamento de Química, Universidade Estadual de Londrina, PR-Brasil; 2 - Royal Botanic Gardens Kew, TW9 3AE, LON - United Kingdom.

Palavras-Chave: Análise Metabólica, Flavonoides, Ácido abscísico, Análise da Componentes Principais.

### Introdução

*Hiraea* é um gênero da família botânica Malpighiaceae, com cerca de 80 espécies de trepadeiras lenhosas ou arbustos encontrados em países como México, Brasil e Argentina.<sup>(1,2)</sup>

Estudos botânicos confirmam uma grande variação no formato das folhas de *Hiraea*<sup>(2,3)</sup>. A diferença entre o indumento das lâminas foliares de *Hiraea* são parâmetros bem descritos na literatura, sendo recorrentemente alimentados com a análise de novos materiais.<sup>(1,2)</sup> Apesar de informações botânicas valiosas, a identificação de metabólitos neste gênero é escassa.

Assim, o objetivo deste estudo foi identificar substâncias bioativas em folhas de *Hiraea cuiabensis*, *H. hatschbachii*, *H. reclinata* e *H. restingae* por Cromatografia Líquida de Ultra Performance acoplada a Espectrometria de Massa (UPLC-MS/MS – Ultra Performance Liquid Chromatography tandem Mass Spectrometry)<sup>(3)</sup>, comparando-as por Análise das Componentes Principais (PCA – Principal Component Analysis).

### Resultados e discussão

Cinquenta compostos foram anotados nos extratos hidroetanólicos das folhas de *H. cuiabensis*, *H. hatschbachii*, *H. reclinata* e *H. restingae*, sendo vinte e dois anotados no modo de ionização positivo) e vinte e oito identificados no (modo de ionização negativo).

Apigenina, miricetina, rutina, kaferol, quercetina, delfinidina, flavonol, ácidos clorogênicos, compostos fenólicos e outros metabólitos foram anotados pela primeira vez nas espécies supracitadas, sugerindo atividades antioxidantes, microbiológica e anti-inflamatória nas folhas analisadas.

Com 95% de confiança, a Análise das Componentes Principais (primeira, segunda e terceira componente) mostrou discriminação entre

as espécies de *Hiraea*, sugerindo, inclusive, uma variação considerável do ácido abscísico. Maiores teores de ácido abscísico em plantas estão correlacionadas a atividade antiviral, contra diversos vírus, entre eles o *Potexvirus* (Alphaflexiviridae).<sup>(4)</sup> A Figura 1 ilustra a estrutura do ácido abscísico.

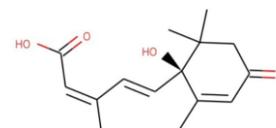


Figura 1. Estrutura química do ácido abscísico.

### Conclusões

Análise de extratos hidroetanólicos por UPLC-MS/MS colaboraram para anotações inéditas em *Hiraea*, corroborando para uma nova compreensão fitoquímica das folhas de *H. cuiabensis*, *H. hatschbachii*, *H. reclinata* e *H. restingae*. Adicionalmente, variações metabólicas foram confirmadas pela Análise das Componentes Principais.

### Agradecimentos

A pesquisadora Helena Mannocho-Russo pela colaboração; a Universidade Estadual de Londrina e aos órgãos de fomento como CAPES e CNPq.

### Referências

- (1) Anderson, C. E. *Edinb. Journal of Bot.*, **2013**, 3, p.413-432.
- (2) Anderson, C. *Novon*, **2024**, 1, p. 60-69.
- (3) Mannocho-Russo, H. et al. *Front. Plant Sci.*, **2022**, 17, p. 1 - 19.
- (4) Alazem, M.; Lin, S. *Front. Plant Sci*, **2017**, 11, p. 1 - 10.



Categoria: Trabalho Completo

## Desenvolvimento de sensores eletroquímicos utilizando Quantum Dots de Grafeno obtidos por diferentes rotas de síntese: estudo comparativo

Juliana Costa Rolim\*<sup>1</sup> (PG), Bruno Campus Janegitz<sup>2</sup> (PQ), Roberto de Matos<sup>1</sup> (PQ) Roberta A. Medeiros<sup>1</sup> (PQ)\*

\*Juliana.costa.rolim@gmail.com

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

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

Palavras Chave: QDGs, SPE, eletrodo de carbono, baixo custo.

### Introdução

Os quantum dots de grafeno (QDGs) consiste em fragmentos de grafeno com dimensões na ordem de nanômetros, capazes de produzir efeitos quânticos<sup>1</sup>, possuem propriedades singulares como alta área superficial e alta estabilidade química, os QDGs podem ser sintetizados de diferentes formas o que vai definir a dimensão do material e propriedades do material<sup>2</sup>.

A produção de QDGs é feita a partir da quebra ou decomposição de materiais carbonáceos maiores ou utilizando um precursor de carbono contendo átomos de carbono ou moléculas com estruturas aromáticas tais como a glucose e o ácido cítrico<sup>3</sup>.

O objetivo deste trabalho foi sintetizar os QDGs por diferentes rotas de síntese e avaliar a resposta eletroquímica obtida ao modificar um eletrodo impresso de carbono (SPE) com esses QDGs, utilizando como sonda o  $K_3[Fe(CN)_6]$ .

### Resultados e discussão

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

assim a formação dos QDGs, com a técnica MET foi possível observar pontos esféricos uniformemente dispersos e o tamanho das partículas dos QDGs analisadas pela técnica DLS foi de aproximadamente 0,91 nm. As suspensões de QDGs foram preparadas com o polieletrólito dodecil-dihidrogenofosfato (DHP) e água, a modificação dos SPEs foi realizada com o gotejamento das respectivas suspensões em sua superfície. Em seguida, foi realizado um estudo para avaliar a detecção do par redox  $Fe[CN_6]^{3+/4+}$ , utilizando a voltametria cíclica (VC) com o SPE sem modificação e modificados com as suspensões de QDGs, observou-se que com os QDGs obtidos por pirólise do AC obteve-se uma maior intensidade de corrente de pico e menores valores de  $\Delta E_p$ , indicando um efeito eletrocatalítico.

### Conclusões

Os QDGs foram sintetizados por quatro diferentes rotas, as caracterizações químicas confirmaram sua formação. Os estudos voltamétricos realizados com o SPE modificado com os QDGs, obtidos por pirólise do AC, foram os que apresentaram melhor resposta voltamétrica

### Agradecimentos

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

### Referências e notas

- (1) I.A. DE ARAUJO ANDREOTTI.; L.O. ORZARI.; J. R. CAMARGO.; R.C. FARIA.; L.H. MARCOLINO-JUNIOR.; M.F. BERGAMINI.; A. GATTI.; B. C. JANEGITZ. 840 (2019) 109-116.
- (2) A. GEVAERD, C. E. BANKS, M. F. BERGAMINI, L. H. MARCOLINO-JUNIOR. 31 (2019) 838-843.
- (3) Y. R. KUMAR.; K. DESHMUKH.; K. K. SADASIVUNI, S. K. KHADHEER PASHA. 10 (2020) 23861-23898.



Categoria: Trabalho Completo

## Desenvolvimento de método de derivatização para determinação de esteróis por HPLC-DAD

Letícia Maria Effting<sup>1</sup> (PG)\*, César Ricardo Teixeira Tarley<sup>1</sup> (PQ)

<sup>1</sup>Departamento de Química, Universidade Estadual de Londrina (UEL), PR, Brasil.

\*leticia.effting21@uel.br

Palavras-Chave: Contaminação Ambiental, Indicadores Químicos, Benzoyl Isocianato, Planejamento Fatorial.

### Introdução

A poluição ambiental por esgoto doméstico é um problema de saúde pública, sendo que uma forma confiável de determinar a contaminação é a determinação de indicadores químicos, como as moléculas de esteróis, que são compostos que mantêm sua estrutura química preservada no ambiente e assim sua origem pode ser determinada. O coprostanol, associado a outros esteróis, tem sido amplamente utilizado como marcador da presença de esgoto doméstico, devido à sua origem fecal específica, uma vez que a ocorrência de coprostanol nas fezes humanas resulta da bioidrogenação do colesterol<sup>[1]</sup>.

A técnica de cromatografia líquida de alta eficiência (HPLC) com detecção na região do ultravioleta (UV), ainda é pouco utilizada para determinação destes esteróis, justamente porque essas moléculas não apresentam capacidade de absorver radiação no UV. Portanto, um processo de derivatização é necessário para inclusão de um grupo cromóforo na estrutura molecular destas<sup>[2]</sup>. Assim, esse trabalho tem por objetivo desenvolver um procedimento de derivatização para análise de esteróis por HPLC-DAD.

### Resultados e discussão

Os isocianatos são moléculas que apresentam o grupo funcional com os elementos R-N=C=O e, são extremamente reativos a uma variedade de nucleófilos, incluindo moléculas com grupo funcional hidroxila (-OH). As reações geralmente ocorrem envolvendo um ataque ao átomo de carbono do grupo isocianato ao nucleófilo, para formar uretanos ou carbamatos<sup>[3]</sup>. Desta forma, um derivado de isocianato foi utilizado como reagente de derivatização, pois o isocianato reage com a hidroxila das moléculas de esteróis (7-deidrocolesterol, colesterol e coprostanol), formando uma estrutura molecular que absorve radiação na região do UV.

Para encontrar uma proporção molar e um tempo de reação de derivatização em banho ultrassônico com as melhores respostas analíticas, um planejamento fatorial foi proposto, no qual uma triagem inicial foi realizada com um planejamento

2<sup>2</sup> com ponto central e posteriormente expandida para um planejamento estrela, sendo que as áreas cromatográficas foram convertidas em desejabilidade global e a melhor condição de derivatização foi obtida por meio da análise estatística e obtenção dos valores críticos com a superfície resposta do planejamento fatorial estrela. Após obter as melhores condições de derivatização, os parâmetros analíticos foram determinados e, na Figura 1, observa-se o ganho de sinal para as moléculas com o procedimento de derivatização.

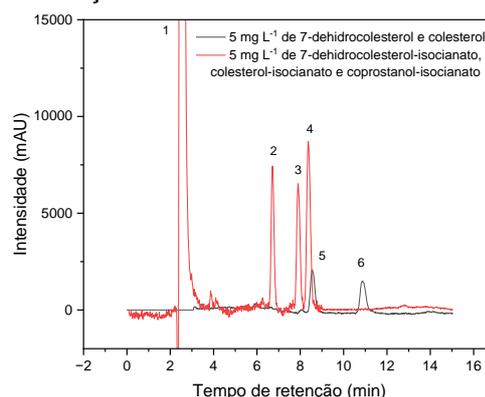


Figura 1. Cromatograma referente à análise da mistura dos produtos de derivatização e para os esteróis sem o processo de derivatização (1- Isocianato, 2- 7-deidrocolesterol-Isocianato, 3- Colesterol-Isocianato, 4- Coprostanol-Isocianato, 5- 7-deidrocolesterol e 6- Colesterol).

### Conclusões

O método de derivatização proposto apresentou-se como uma metodologia rápida, com ganho de sinal analítico cromatográfico para os esteróis 7-deidrocolesterol e colesterol, e permitiu a detecção do coprostanol, molécula que sem o processo de derivatização, não absorve radiação na região do UV.

### Agradecimentos

UEL, PPGQ, LADEMA, CAPES e INCT-Bio.

### Referências e notas

- [1] MELO, M. G.; et al. *Chemosphere*, v. 326, n. November 2022, 2023).
- [2] RESENDE, M. F.; et al. *Analytical Methods*, v. 6, n. 24, p. 9581–9587, 2014.
- [3] ESCRIG-DOMÉNECH, A.; et al., *Journal of Chromatography A*, v. 1296, p. 140–156, 2013.



**Categoria: Trabalho Completo**

## Determinação eletroquímica de íons $Pb^{2+}$ em micro-cela após pré-concentração em óxido misto $SiO_2/Sb_2O_5/TiO_2$

Diego P. dos Santos<sup>1</sup> (PG), Leticia M. Effting<sup>1</sup> (PG), César R. T. Tarley<sup>1,2</sup> (PQ)\*

tarley@uel.br

<sup>1</sup>Departamento de Química, Universidade Estadual de Londrina (UEL), PR, Brasil.

<sup>2</sup>Instituto Nacional de Ciência e Tecnologia de Bioanalítica, Universidade Estadual de Campinas (UNICAMP), SP, BR.

Palavras-Chave: Chumbo, Voltametria, SPE, Ginseng, Coluna.

### Introdução

O chumbo ( $Pb^{2+}$ ) é um poluente ambiental muito perigoso devido a sua toxicidade química mesmo que em baixas concentrações. A espectroscopia de absorção atômica de chama (FAAS) é a técnica mais utilizada para determinações de íons  $Pb^{2+}$  devido à sua simplicidade e baixo custo. No entanto, a desvantagem desta técnica está relacionada com a falta de sensibilidade em relação às concentrações de metais traços, normalmente encontradas em amostras ambientais <sup>[1]</sup>.

As técnicas eletroquímicas são favoráveis para a determinação de íons metálicos devido ao seu baixo custo, alta sensibilidade, fácil operação e a capacidade de analisar a especiação de elementos <sup>[2]</sup>. Para ampliar ainda mais a sensibilidade, métodos de pré-concentração off-line, como extração em fase sólida (SPE), podem ser utilizados como um método de preparo da amostra antes da análise instrumental. Portanto, este trabalho desenvolveu um método para determinação de  $Pb^{2+}$  utilizando sistema de pré-concentração off-line material adsorvente ( $SiO_2/Sb_3O_5/TiO_2$ ) com uma micro cela eletroquímica composta pelo eletrodo de trabalho de diamante dopado com boro (BDD), eletrodo de referência de  $Ag/AgCl$  e contra eletrodo de carbono, e os íons  $Pb^{2+}$  foram determinados por voltametria de onda quadrada.

### Resultados e discussão

O sistema de pré-concentração off-line foi montado com uma coluna SPE utilizando 50 mg do material adsorvente ( $SiO_2/Sb_3O_5/TiO_2$ ) acoplado a um injetor e uma bomba peristáltica para propulsão de 20 mL da solução padrão/amostra com pH ajustado para 5,0 com NaOH, utilizando uma vazão de 6 mL  $min^{-1}$  e 600  $\mu L$  de eluente em uma vazão de 0,85 mL  $min^{-1}$ . A otimização da SPE para pré-concentração de íons  $Pb^{2+}$  consistiu em um planejamento fatorial  $2^{4-1}$ , no qual foram avaliados por Diagrama de Pareto, o

volume da alça de amostragem, que apresentou um efeito positivo (600  $\mu L$ ), o pH com efeito negativo, (pH=5,0), a vazão de pré-concentração com efeito positivo (6 mL  $min^{-1}$ ) e a concentração do  $H_2SO_4$  como eluente, sendo não significativa (1,5 mol  $L^{-1}$ ).

A otimização dos parâmetros eletroquímicos foi realizada de forma univariada com os seguintes resultados: Tempo de deposição = 60 s; Potencial de deposição = -1,5 V; Step = 6 mV; Magnitude de Amplitude = 60 mV e Frequência = 10 Hz.

Com o método SPE e os parâmetros da técnica otimizados, realizou-se à obtenção de duas curvas analíticas, sendo estas com e sem a etapa de pré-concentração, para a determinação dos parâmetros analíticos do método proposto, sendo obtido um LD de 0,98  $\mu g L^{-1}$  e LQ 3,29  $\mu g L^{-1}$ , em uma faixa linear de 3,29-80,0  $\mu g L^{-1}$ , com um fator de pré-concentração de 15,39 vezes.

A precisão do método intra e interdia (n=10) em dois níveis de concentração apresentou desvio padrão relativo menores que 5%. O teste de interferência competitiva com os íons  $Ca^{2+}$ ,  $Mg^{2+}$ ,  $Ni^{2+}$  e  $Co^{2+}$  mostrou que o método se apresenta livre de interferentes com base em suas recuperações satisfatórias. O método foi aplicado em amostras de água mineral, água de torneira e amostras de Ginseng, sendo que não foi possível detectar o íon  $Pb^{2+}$  dentro dos limites obtidos pelo método, sendo realizados ensaios de adição e recuperação, obtendo-se recuperados entre 90 a 108%.

### Conclusões

O método desenvolvido apresentou uma alta sensibilidade, livre de interferência de possíveis íons contaminantes em amostras ambientais, além de boa precisão analítica, sendo possível sua aplicação em amostras de água mineral, água de torneira e de Ginseng, livre de efeito de matriz.

### Agradecimentos

À UEL. Aos órgãos de fomento CAPES, CNPQ e INCT-Bio e ao grupo de pesquisa LADEMA.



## XXXIX Semana da Química e IX Jornada de Pós-Graduação

REFLETINDO OS PRÓXIMOS 50 ANOS: NOVOS HORIZONTES  
PARA O PROFISSIONAL DA QUÍMICA

Realização



proex  
Programa de Pós-Graduação em Química

### *Referências*

- [1] Beal, A., Garcia de Almeida, F., Moreira, C. A. B., Santos, I. M., Curti, S. M. M., Martins, L. D., & Tarley, C. R. T. **Analytical Methods**, 2018. 10(30), 3745–3753.
- [2] El Mhammedi, M. A., Achak, M., & Bakasse, M. **Arabian Journal of Chemistry**, 2013, 6(3), 299–305.



Categoria: Trabalho Completo

## Microextração líquido-líquido de herbicidas em material particulado fino atmosférico: uma alternativa quimicamente sustentável

Rafael J. Leal<sup>1</sup> (PG), Mayara Araujo<sup>1</sup> (PG), Maikon T. Nascimento<sup>1</sup> (PG), César R. T. Tarley<sup>1</sup> (PQ), \*Maria C. Solci<sup>1</sup> (PQ).

<sup>1</sup> - Departamento de Química, Universidade Estadual de Londrina, PR - Brasil.

\*solci@uel.br

Palavras-Chave: Microextração líquido-líquido, Pesticidas, Material particulado.

### Introdução

O uso de pesticidas levanta preocupações devido à contaminação ambiental e riscos à saúde, como câncer e doenças respiratórias. Embora haja regulamentações internacionais para limitar pesticidas em solo e água, apenas os EUA regulam sua presença na atmosfera, o que é alarmante devido aos potenciais riscos<sup>1</sup>. Tratando-se da determinação de pesticidas no ar, as metodologias comumente utilizadas não utilizam solventes sustentáveis e não buscam a miniaturização da análise<sup>2</sup>. Dessa forma, o presente trabalho busca desenvolver uma nova metodologia de microextração e pré-concentração de herbicidas triazínicos utilizando água e solventes eutéticos profundos (DES) naturais a base de mentol e posterior análise via cromatografia líquida de alta eficiência com detecção de arranjo de diodos (HPLC-DAD)<sup>3</sup>.

### Resultados e discussão

Os solventes eutéticos profundos investigados foram compostos de uma mistura entre mentol e diferentes álcoois (metanol, etanol, 2-propanol, 1-octanol e 1-decanol). O DES formado por mentol e 2-propanol forneceu maior sinal analítico. A proporção mentol:2-propanol também foi estudada (1:1, 1:2, 1:3 e 1:4) e a mistura 1:4 apresentou maior resposta cromatográfica. Portanto, o DES composto de mentol:2-propanol (1:4) foi escolhido durante todo o trabalho.

As variáveis da microextração líquido-líquido, como pH, concentração de sal, tempo de vórtex e volume de DES foram otimizadas simultaneamente utilizando um planejamento fatorial 2<sup>4</sup>, considerando a eficiência de sensibilidade como resposta. As melhores condições foram obtidas com 10% (m/v) de NaCl, 1 min de vórtex e 200 µL de DES. O pH do meio não influencia significativamente na resposta, uma vez que na faixa estudada as moléculas estão em sua forma neutra (pK<sub>a</sub> entre 1,6 e 4,1).

Na figura 1, é evidenciado o ganho obtido no sinal analítico, nas condições ótimas da microextração.

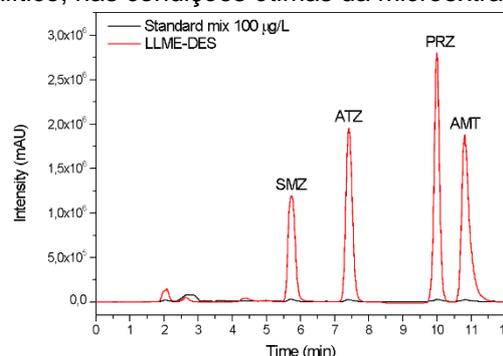


Figura 1. Cromatogramas de um padrão contendo simazina (SMZ), atrazina (ATZ), propazina (PRZ) e ametrina (AMT) a 100 µg L<sup>-1</sup> sem realizar a pré-concentração (preto) e pré-concentrando com DES (vermelho).

Algumas figuras de mérito da metodologia proposta estão reportadas na tabela 1.

Tabela 1. Faixa linear, fator de pré-concentração (PF), limite de detecção (LOD) e precisão intra e inter-dia da metodologia proposta.

Herbicidas	Linear range (µg L <sup>-1</sup> )	PF	LOD (µg L <sup>-1</sup> )	Intra-day (%RSD, n = 10)		Inter-day (%RSD, n = 20)	
				10 µg L <sup>-1</sup>	180 µg L <sup>-1</sup>	10 µg L <sup>-1</sup>	180 µg L <sup>-1</sup>
Simazine	0,58-180	85,5	0,17	7,9	4,9	9,1	5,1
Ametryn	0,58-180	163,0	0,17	7,0	4,6	9,0	4,7
Atrazine	0,49-180	122,6	0,15	7,3	6,4	10,6	6,9
Propazine	0,47-180	135,8	0,14	6,4	5,7	7,7	5,5

### Conclusões

O método é capaz de detectar os analitos em nível traço, sendo rápido, de baixo custo e sustentável. Amostras de aerossol atmosférico foram analisadas e nenhum analito foi detectado.

### Agradecimentos

À CAPES pelo suporte financeiro (projeto 88887.915345/2023-00).

### Referências e notas

- (1) HU, C. et al. *Talanta*, v. 266, 2024.
- (2) NASCIMENTO, M. M.; DA ROCHA, G. O.; DE ANDRADE, J. B. *Analytical Methods*, v. 10, n. 37, 2018.
- (3) UDOMKUN, P. et al. *Toxics*, 2023.



Categoria: Trabalho Completo

## Avaliação de diferentes pré-tratamentos eletroquímicos para ativação dos eletrodos impressos 3D de GR-PLA

Mayara Araujo<sup>1</sup> (PG), Maria Oliveira<sup>1</sup> (IC), Roberto Matos<sup>1</sup> (PQ), Cesar Tarley<sup>1</sup> (PQ), Roberta Medeiros<sup>1\*</sup> (PQ). \*Email: ramedeiros@uel.br.

<sup>1</sup> - Departamento de Química, Universidade Estadual de Londrina, PR - Brasil.

Palavras-Chave: Impressão 3D, Eletrodo, Pré-tratamento eletroquímico.

### Introdução

Atualmente, o uso de sensores eletroquímicos 3D vem crescendo devido o baixo custo relativo e a manufatura de eletrodos em larga escala (1).

A fim de melhorar as respostas eletroquímicas dos eletrodos obtidos por impressão 3D, diferentes tipos de pré-tratamentos eletroquímicos (PTEs) têm sido estudados, estes providenciam grupos funcionais em sua superfície, capazes de elevar a condutividade e a velocidade de transferência de elétrons do sensor eletroquímico (1).

Assim, neste trabalho, investigou-se o desempenho eletroquímico do eletrodo impresso 3D à base de grafeno e poliácido láctico (GR-PLA) após diferentes condições de PTE usando dopamina (DOP) como sonda eletroquímica.

### Resultados e discussão

As respostas voltamétricas obtidas com os eletrodos impressos 3D de GR/PLA após diferentes PTs eletroquímicos foram avaliadas e comparadas. Um dos PTs consiste em um procedimento descrito na literatura (1), inicialmente, utilizou-se a técnica cronoamperométrica, aplicando um potencial de 1,8 V por 900 s, seguido pela voltametria cíclica em solução de tampão fosfato 0,1 mol L<sup>-1</sup> pH 7,4, com varredura na faixa de potencial de 0,0 a -1,8 V (PTE-CR-VC). Os outros PTs foram avaliados como uma nova proposta de condicionamento da superfície do eletrodo. Neles utilizou-se a cronopotenciometria, aplicando-se densidades de corrente anódicas e catódicas (100 mA cm<sup>-2</sup> por 30 s para PTE-anódico; -50 e -100 mA cm<sup>-2</sup> para PTE-catódico) em intervalos de tempo de 150, 200 e 300 s, no eletrodo 3D em solução de H<sub>2</sub>SO<sub>4</sub> 0,5 mol L<sup>-1</sup>.

As respostas voltamétricas do eletrodo 3D de GR/PLA após os PTEs foram avaliadas por voltametria cíclica em solução de KCl 0,1 mol L<sup>-1</sup> na ausência e presença de DOP 1,0 mmol L<sup>-1</sup>. Observou-se que a maior corrente de pico e menor diferença entre os potenciais de pico anódico e catódico ( $\Delta E_p$ ) foram obtidos após o PTE-catódico,  $I_{pa} = 77,28 \mu A$ ;  $\Delta E_p = 0,304 V$ , enquanto que para o

PTE-anódico os valores foram  $I_{pa} = 39,26 \mu A$  e  $\Delta E_p = 0,587 V$  e para o PTE-CR-VC foram  $I_{pa} = 68,70 \mu A$ ;  $\Delta E_p = 0,321 V$  (Figura 1).

Ao estudar os parâmetros do PTE-catódico observou-se que as melhores respostas voltamétricas foram obtidas com o eletrodo 3D de GR/PLA aplicando -100 mA cm<sup>-2</sup> por 200 s. A principal vantagem do PTE proposto está relacionada ao tempo de PT, para realizar o PTE-CR-VC (proposta na literatura) leva-se, aproximadamente, 40 minutos enquanto para que o PTE-catódico leva-se apenas 3,3 minutos.

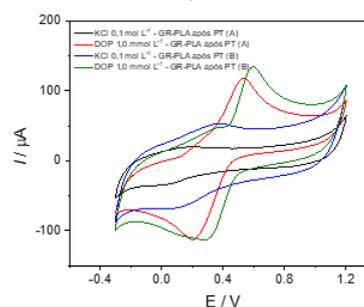


Figura 1. Voltamogramas cíclicos obtidos com 1,0 mmol L<sup>-1</sup> DOP em solução de KCl 0,1 mol L<sup>-1</sup> utilizando GR-PLA após PT (A) e PT (B).

### Conclusões

Comparando as respostas eletroquímicas obtidas com o eletrodo impresso em 3D de GR/PLA após os PTEs da literatura e os propostos neste trabalho, concluiu-se que o PTE catódico (-100 mA cm<sup>2</sup> por 200 s) proporcionou maiores intensidades de corrente de pico e menores  $\Delta E_p$ , indicando um efeito eletrocatalítico. Além disso, o tempo de execução desse procedimento é 12 vezes menor em relação ao da literatura.

### Agradecimentos

Às agências de fomento CAPES, UEL Fundação Araucária ((243/2022-PBA) e CNPq ((307505/2021-9).

### Referências e notas

- (1) Santos, P.L.; Katic, V.; Loureiro, H.C.; Santos, M.F.; Santos, D.P.; Formiga, A.L.B.; Bonacin, J.A. *Sens Actuators B Chem.* **2019**, 281, 837.



**Categoria: Trabalho Completo**

## Quimiometria aplicada à impressão digital voltamétrica de folhas de erva mate quimicamente modificada

Mayara M. Fonseca<sup>1</sup> (PG), Bruna Coldibeli<sup>1</sup> (PG), Gustavo G. Marcheafave<sup>2</sup> (PQ), Elen R. Sartori<sup>1</sup> (PQ)  
\*mayara.martins@uel.br

<sup>1</sup>Departamento de Química, Universidade Estadual de Londrina, Londrina-PR, Brasil.

<sup>2</sup>Instituto de Química, Universidade Estadual de Campinas, Campinas-SP, Brasil.

Palavras-Chave: Impressão digital, Voltametria, PLS-DA, ASCA.

### Introdução

O plantio de erva-mate (*Ilex paraguariensis* St. Hil.) quimicamente modificada, pode ser obtido a partir de modificação do solo, da temperatura e da intensidade da luz durante o cultivo, proporcionando plantas com diversos teores de cafeína, até mesmo descafeinadas, porém mantendo as demais propriedades da planta.<sup>1</sup> Assim, é importante o desenvolvimento de uma metodologia analítica alternativa visando o controle de qualidade e monitoramento dessas plantas. Uma alternativa é o emprego da voltametria cíclica (VC) em conjunto com o eletrodo de diamante dopado com boro (EDDB) associada a análise exploratória e supervisionada multivariada dos dados.<sup>2</sup> Sendo assim, este trabalho visa obter impressão digital voltamétrica empregando EDDB para a classificação de folhas de erva-mate quimicamente modificadas condicionadas em cinco níveis de sombreamento (0%; 40%; 51%; 76% e 82%) aliada a tratamentos quimiométricos.

### Resultados e discussão

Iniciou-se investigando o efeito do pré-tratamento catódico, anódico e polimento com alumina da superfície do EDDB. Para todos estes, observou-se a presença de dois picos de oxidação (~ +0,75 V e +1,5 V) e um pico de redução (+0,20 V), correspondentes a oxidação e redução de compostos fenólicos e de oxidação de xantinas, presentes nas infusões de folhas de erva mate. O polimento com alumina foi o selecionado, uma vez que, promoveu uma melhor definição e intensidade de corrente dos picos de oxidação e de redução. Em seguida, nos estudos do eletrólito suporte, pH e velocidade de varredura, o tampão fosfato pH 3,0 na velocidade de 50 mV s<sup>-1</sup> demonstrou melhores respostas (intensidade de corrente e repetibilidade). O método desenvolvido apresentou boa precisão intermediária, repetibilidade e estabilidade da amostra no período avaliado. Os resultados obtidos pela modelagem ASCA combinada com os perfis voltamétricos de oxidação, redução e cíclico, forneceu resultados significativos sobre os efeitos

do melhoramento genético e do sombreamento. A análise da interação entre melhoramento genético e sombreamento confirmou as diferenças genéticas entre as plantas em todos os perfis voltamétricos avaliados. Demonstrando assim, que o ASCA em conjunto com a voltametria, é uma ferramenta robusta para monitorar plantas de erva-mate modificadas quimicamente. A análise multivariada supervisionada de discriminação empregou o modelo PLS-DA, que apresentou resultados na discriminação entre amostras com alto teor de cafeína e descafeinadas. Todos os modelos alcançaram sensibilidade, especificidade e eficiência de 100%, sem registros de taxas de falso-positivo ou falso-negativo. Demonstrando assim, a construção de um excelente modelo de controle de qualidade através da impressão digital voltamétrica de plantas de erva-mate quimicamente modificadas. Ainda, o método foi avaliado utilizando o software AGRee, que demonstrou ser ambientalmente amigável, com pontuação de 0,56. Além de ser um método econômico e rápido.

### Conclusões

Conclui-se que a VC em conjunto com o EDDB foram empregados com sucesso no desenvolvimento de um método de impressão digital usado no controle de qualidade de erva-mate quimicamente modificadas submetidas a diferentes níveis de sombreamento. ASCA confirmou a diferença genética entre as plantas quimicamente modificadas, e a discriminação PLS-DA indica que o modelo pode ser aplicado com precisão.

### Agradecimentos

Os autores agradecem ao CNPq (Proc. 305764/2022-5), Fundação Araucária do Paraná e CAPES pelo suporte financeiro. GGM agradece à Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de São Paulo (2020/11463-5).

### Referências e notas

- (1) De Almeida, A. G. et al. Food Analytical Methods, 2023, 16, 3, 469-477.
- (2) Silva, A. R.; Santos, J. R. Food Analytical Methods. 2021, 14, 10, 2175-218.



Categoria: Trabalho Completo

## Desenvolvimento e validação de método voltamétrico para a determinação de anti-hipertensivo

Renan N. Santos (GD)<sup>1\*</sup>, Gustavo Fix (PG)<sup>1</sup>, Bruna Coldibeli (PG)<sup>1</sup>, Elen R. Sartori (PQ)<sup>1</sup>

renan.negreli.santos@uel.br

<sup>1</sup>Departamento de Química, Universidade Estadual de Londrina, PR - Brasil.

Palavras-Chave: Eletrodo de pasta de carbon black, Mesilato de doxazosina, Amostra farmacêutica, Amostra ambiental,

### Introdução

A adoção medicamentosa do mesilato de doxazosina (DOX) é essencial na manutenção e tratamento da hipertensão e hiperplasia prostática benigna. Contudo, o controle do teor administrado é essencial para a eficácia do tratamento. Os métodos utilizados para a determinação de DOX geralmente empregam a cromatografia líquida de alta eficiência. No entanto, estes métodos requerem a utilização de solventes orgânicos tóxicos, preparo de amostra complexo e elevado tempo de análise. Diante disso, a voltametria apresenta um alto potencial para a determinação de substâncias, tendo em vista seu baixo custo instrumental, rapidez na análise, simplicidade de manuseio e preparo de amostra. O carbon black auxilia o processo cinético de transferência de elétrons, bem como um aumento na magnitude do sinal obtido, permitindo que o sensor obtenha limites de quantificação mais baixos em relação a outros materiais<sup>1,2</sup>. Desta forma, foi proposto o desenvolvimento de um método analítico inédito para a determinação de DOX em amostras farmacêuticas e ambientais, empregando a voltametria de onda quadrada (VOQ) e o eletrodo de pasta de carbon black (EPCB).

### Resultados e discussão

As medidas voltamétricas foram realizadas em um potenciostato/galvanostato modelo PalmSens4 controlado pelo software PSTrace 5.9, com uma célula eletroquímica de vidro com compartimento único de 15 mL de capacidade. O conjunto de eletrodos consistiu em, uma placa de platina (0,50 cm<sup>2</sup> de área geométrica) como eletrodo auxiliar, o Ag/AgCl (KCl 3,0 mol L<sup>-1</sup>) como eletrodo de referência e o EPCB como eletrodo de trabalho. No EPCB, a DOX apresentou um pico de oxidação irreversível em +1,01 V, em tampão fosfato (pH 3,0). Neste eletrólito suporte e pH, a intensidade da corrente de oxidação foi maior, e o desvio

padrão relativo entre as medidas foi menor. A curva analítica foi construída na VOQ, com os parâmetros otimizados ( $a = 50$  mV,  $f = 30$  Hz,  $\Delta E = 4$  mV), e apresentou um intervalo linear de concentração de 0,099 – 1,283  $\mu\text{mol L}^{-1}$ . A equação da reta obtida em função da concentração corresponde a  $I(\mu\text{A}) = [\text{DOX}]0,847 - 0,081$  ( $R^2 = 0,980$ ). Um teste estatístico foi realizado na regressão linear da curva, a qual não apresentou falta de ajuste, e exibiu uma boa explicação para as variâncias do modelo proposto. O limite de detecção foi de 0,028  $\mu\text{mol L}^{-1}$ . A repetibilidade e precisão intermediária foram de 5,57 e 8,48%, respectivamente, em termos de desvio padrão relativo. O método proposto foi aplicado em amostras farmacêuticas e ambientais, obtendo uma recuperação de 99,25% no medicamento e uma faixa de 95,6 – 107,0% para as amostras ambientais. A veracidade do método foi de 0,68 e 0,65 para as amostras ambientais e farmacêuticas, respectivamente.

### Conclusões

O método proposto apresenta resultados satisfatórios, somado ao baixo custo, simplicidade, rapidez e baixo impacto ambiental, consistindo em um método eficaz para o controle de qualidade da DOX em formulações farmacêuticas e ambientais. Para estudos posteriores, será realizado a determinação de DOX por espectrofotometria para fins de comparação. Além disso, será conduzido um estudo de seletividade do método, e sua aplicação para determinação de DOX em fluidos biológicos (urina e plasma).

### Agradecimentos

Fundação Araucária; CNPq (Proc. 305764/2022-5)

### Referências e notas

- (1) DEROCO, P. B.; ROCHA-FILHO, R. C.; FATIBELLO-FILHO, O. Talanta, **2018**, 179.
- (2) VICENTINI, F. C. et al. Sensors and Actuators B: Chemical, **2016**, 227.



**Categoria: Trabalho Completo**

## Sensor fotoeletroquímico (PEC) baseado em compósito impresso de $WO_3$ e óxido de grafeno/MIP-*iniferter* para determinação de creatinina em amostras de urina

Maria de A. Silva (PG)<sup>1\*</sup>, Letícia M. Efftting (PG)<sup>1</sup>, Mariana G. Segatelli (PQ)<sup>1</sup>, Luiz H. Dall'Antonia (PQ)<sup>1</sup>, César R. T. Tarley (PQ)<sup>1</sup>.

\*[marialmeidas27@gmail.com](mailto:marialmeidas27@gmail.com)

<sup>1</sup>- Departamento de Química, Universidade Estadual de Londrina, PR - Brasil.

Palavras-Chave: Eletroquímica, marcador biológico, fotoatividade.

### Introdução

A creatinina é a biomolécula mais investigada em laboratórios clínicos, depois da glicose, por ser um marcador biológico utilizado para avaliar a função renal [1]. As abordagens tradicionais para determinação de creatinina incluem os métodos colorimétricos de Jaffe e análises cromatográficas. Entretanto esses métodos envolvem interferências e alto custo. Por sua vez, os métodos eletroanalíticos trazem vantagens adicionais para a determinação da creatinina em termos de custo, portabilidade e simplicidade, e geralmente não requerem a implementação de tratamento da amostra. Porém, como a creatinina é considerada praticamente uma molécula inativa eletroquimicamente, sua determinação direta é uma tarefa difícil. Nos últimos anos, sensores fotoeletroquímicos (PEC) têm sido cada vez mais utilizados para fins analíticos, pois possuem baixo custo, alta precisão, resposta rápida, alta sensibilidade, alta reprodutibilidade e fácil miniaturização. Apesar das vantagens, atualmente esforços têm sido dedicados a melhorar a sua seletividade utilizando tecnologia de impressão molecular e sua condutividade utilizando fases carbonáceas, como grafeno para preparação de compósitos. Portanto, o presente estudo trata do desenvolvimento de um novo sensor PEC baseado em  $WO_3$  impresso ( $WO_{3imp}$ ) e compósito iniferter de óxido de grafeno (GO)/ poli (ácido metacrílico) (MIP) impresso para determinação de creatinina em amostras de urina. Outro objetivo do presente trabalho é avaliar, pela primeira vez, o uso da creatinina como molécula antena [2] para o dispositivo sensor PEC, que é particularmente útil para moléculas eletro-inativas, como a creatinina.

### Resultados e discussão

Uma mistura física de  $WO_{3imp}$  e GO/MIP foi adicionada na superfície de óxido de estanho

dopado com flúor (FTO) para preparação do sensor. Os materiais impressos foram caracterizados por FTIR, TGA, XRD e análise de fisissorção de nitrogênio, gráfico de Mott-Schottky (MS) foi obtido para determinar valores de banda de valência e condução e espectroscopia de impedância eletroquímica (EIS) para determinar a resistência à transferência de carga ( $R_{ct}$  ( $\Omega$ )). O design do sensor PEC ( $WO_{3imp}/GO/MIP$ ) exibiu excelente seletividade para determinação de creatinina e um efeito sinérgico entre  $WO_{3imp}$  e GO/MIP melhorando o sinal de fotocorrente. Como a creatinina não é uma molécula diretamente eletroativa, a mesma pode atuar como molécula-antena ao interagir com a superfície semicondutora  $WO_{3imp}$ , aumentando assim a fotocorrente com o aumento da concentração de creatinina. O sensor obteve limites de detecção (LD) e quantificação (LQ) de 0,12 e 0,41  $\mu\text{mol L}^{-1}$ , respectivamente, em pH 7,0 e na presença de sulfito atuando como 'limpadores de buracos'. A presença de ácido úrico, ureia, ácido cítrico e ácido ascórbico não interferiu na determinação da creatinina. As amostras de urina foram analisadas pelo método proposto obtendo concentrações que variaram de 3,7 a 11,1  $\text{mmol L}^{-1}$  e os resultados foram comparados com HPLC-DAD.

### Conclusões

O sensor PEC produzido demonstrou eficiência para a quantificação de creatinina em amostras de urina. O método analítico desenvolvido obteve LQ de 0,41  $\mu\text{mol L}^{-1}$ , boa precisão e baixa interferência. Esses resultados demonstram que o efeito de molécula antena pode ser uma alternativa viável para a determinação indireta da creatinina através de sensores PEC.

### Agradecimentos

LADEMA, CAPES, CNPq, INCT-Bio

### Referências e notas



**XXXIX Semana da Química e  
IX Jornada de Pós-Graduação**  
REFLETINDO OS PRÓXIMOS 50 ANOS: NOVOS HORIZONTES  
PARA O PROFISSIONAL DA QUÍMICA

Realização



proex  
PROFESSORES DE QUÍMICA

- (1) Dong Y., Silver S.M., Sterns R.H., Nephrol. Dial. Transplant., 2023, 38.
- (2) Xiao X., Zhu W. W, Bin Lei Y., Q.Y. Liu, Q. Li, W.W. Li, RSC Adv. 2016, 6



**Categoria: Trabalho Completo**

## Potencialidade do eletrodo de carbono vítreo para a determinação de fármaco empregado no tratamento de displasia prostática benigna

Yasmin M. Silva<sup>1\*</sup> (GD), Erica B. Scherlowsk<sup>1</sup> (GD), Renan N. Santos<sup>1</sup> (GD), Bruna Coldibeli<sup>1</sup> (PG), Gustavo Fix<sup>1</sup> (PG), Elen R. Sartori<sup>1</sup> (PQ)

[yasmin.munarin@uel.br](mailto:yasmin.munarin@uel.br)

Departamento de Química, Universidade Estadual de Londrina, PR – Brasil.  
Palavras-Chave: determinação analítica, voltametria, eletrodo de carbono, medicamentos.

### Introdução

O mesilato de doxazosina (DOX) é utilizado no tratamento de hipertensão e hiperplasia prostática benigna, relaxando vasos sanguíneos e músculos da próstata e bexiga. A dosagem correta é essencial para potencializar efeitos colaterais como sonolência, inchaço e dor de estômago, bem como, fornecer o efeito desejado. A cromatografia líquida de alta eficiência (CLAE) é a técnica padrão para a determinação de DOX em medicamentos, mas técnicas voltamétricas se destacam por serem mais econômicas, simples e ambientalmente amigáveis. Em vista disso, este trabalho descreve o desenvolvimento de um procedimento eletroanalítico para a determinação de DOX em comprimidos usando a voltametria de onda quadrada (VOQ) e o eletrodo de carbono vítreo (ECV).

### Resultados e discussão

A DOX apresentou um pico de oxidação em +0,92 V, sem pico de redução no sentido da varredura inversa, indicando um processo irreversível. Para encontrar o pH e eletrólito de suporte ideais, foi utilizado o tampão Britton-Robinson (BR) em pH 5,0 (DPR 2,38%). No estudo de velocidade de varredura o gráfico de  $I$  vs  $v^{1/2}$  apresentou linearidade com um coeficiente de correlação de 0,984, sugerindo que o processo de oxidação da DOX na superfície do ECV é controlado por difusão, o que foi confirmado pelo gráfico de logaritmo da corrente versus logaritmo da velocidade. Os parâmetros da voltametria de onda quadrada (VOQ) foram otimizados, resultando em amplitude de 70 mV, frequência de 40 Hz e incremento de 7 mV. A DOX apresentou linearidade no intervalo de concentração de 0,099 a 1,089  $\mu\text{mol L}^{-1}$  em solução tampão BR (pH 5,0), com coeficiente angular de 0,654, próximo ao

valor teórico de 0,50, confirmando difusão. A resposta voltamétrica da DOX foi estável na presença de possíveis compostos interferentes, sem alteração na intensidade da corrente ou potencial. A repetibilidade e precisão do procedimento analítico foram avaliadas, com desvio padrão relativo menor que 3,0%, demonstrando excelente precisão nas medições realizadas no mesmo dia e em dias diferentes.

### Conclusões

Em vista dos resultados obtidos, verifica-se que o ECV pode ser empregado na determinação voltamétrica de DOX. Não há necessidade de renovação da superfície do ECV durante as medidas. Além disso, as medidas de DOX nas amostras podem ser feitas em menos de 1 min e em 10 mL de solução aquosa, gerando menor descarte de resíduos ao meio ambiente quando comparado com procedimentos desenvolvidos utilizando-se CLAE. Por fim, o método desenvolvido será aplicado na determinação de DOX em comprimidos.

### Agradecimentos

Os autores agradecem ao CNPq (Proc. 305764/2022-5), Fundação Araucária e CAPES pelo suporte financeiro.

### Referências e notas

- (1) AN DER LINDEN, Willem E.; DIEKER, J. W. Glassy carbon as electrode material in electroanalytical chemistry. *Analytica Chimica Acta*, v. 119, n. 1, p. 1–24, 1980.
- (2) POOL, J. DOXAZOSIN: A NEW APPROACH TO HYPERTENSION AND BENIGN PROSTATIC HYPERPLASIA. *International Journal of Clinical Practice*, v. 50, n. 3, p. 154–163, 1996.
- (3) SHRIVASTAVA, Alankar. Stability-Indicating RP-HPLC Method for the Simultaneous Determination of Prazosin, Terazosin, and Doxazosin in Pharmaceutical Formulations. *Scientia Pharmaceutica*, v. 80, n. 3, p. 619–631, 2012.
- (4) SHRIVASTAVA, Alankar; JAIN, Manali; VARSHNEYA, Rakhee. Determination of doxazosin in different matrices: a



**XXXIX Semana da Química e  
IX Jornada de Pós-Graduação**  
REFLETINDO OS PRÓXIMOS 50 ANOS: NOVOS HORIZONTES  
PARA O PROFISSIONAL DA QUÍMICA

Realização



proex  
PROFESSORES DE PÓS-GRADUAÇÃO

review. International Journal of Advanced Chemistry, v. 2, n.  
2, 2014.



Categoria: Revisão

## Comportamento e ocorrência de amins e aminoácidos em partículas atmosféricas: Uma revisão.

Thais F. Alves<sup>1</sup>(PG)\*, Maria Cristina Solci<sup>1</sup>(PQ). Email:thaisfernanda.alves@uel.br

Departamento de Química, Universidade Estadual de Londrina, PR - Brasil.

Palavras-Chave: Compostos Nitrogenados, Poluição Atmosférica, Material Particulado.

### Introdução

O comportamento do nitrogênio orgânico na atmosfera é um tema de crescente interesse devido à sua significativa participação na massa de matéria orgânica no material particulado. Embora esteja presente em formas gasosas e líquidas, sua forma sólida levanta preocupações por seus impactos ambientais e na saúde humana.<sup>1,2</sup> O nitrogênio orgânico representa até 80% do nitrogênio total na atmosfera, influenciando a dinâmica dos ciclos biogeoquímicos do nitrogênio, carbono e água. As principais espécies presentes incluem amins, aminoácidos e proteínas, cujas características físico-químicas podem afetar o equilíbrio atmosférico e o clima.<sup>2</sup> A escassez de estudos sobre a correlação entre amins, aminoácidos e seus efeitos na saúde pública é preocupante, especialmente com o surgimento de novas tecnologias e fontes de poluição. Assim, esta revisão visa compilar informações gerais sobre fontes de emissão, comportamento, sazonalidade e concentrações mundiais sobre amins primárias e aminoácidos livres no material particulado atmosférico nos últimos anos, para aprofundar a compreensão das espécies orgânicas nitrogenadas presentes na atmosfera.

### Resultados e discussão

Amins e aminoácidos são emitidos tanto por fontes naturais, como atividades biológicas e vulcões, quanto por fontes antrópicas, incluindo a combustão de biomassa, emissões industriais e queima de combustíveis. Suas concentrações variam e são influenciadas por atividades biológicas e urbanas. Ao longo dos anos, diversas espécies de amins e aminoácidos foram identificadas na atmosfera sob várias condições e critérios.<sup>1</sup> Quando essas substâncias estão presentes na atmosfera, contribuem para a formação de partículas e impactam os ciclos biogeoquímicos e climáticos globais.

Na química atmosférica, amins, como a metilamina, reagem com ácidos, influenciando a formação de partículas e a condensação de nuvens. Condições climáticas, como umidade e temperatura, afetam a concentração dessas substâncias, que variam sazonalmente.<sup>2</sup> Globalmente, a glicina é o aminoácido mais abundante, com concentrações significativas em áreas urbanas, como na Itália e na China.<sup>3</sup> Em locais com forte influência marinha, as concentrações de amins são muito baixas.<sup>1</sup> Os efeitos na saúde dependem do tamanho das partículas; partículas ultrafinas podem entrar na circulação sanguínea e causar irritações e danos a órgãos.<sup>1,4</sup> Aminoácidos não proteicos podem agravar alergias e inflamações respiratórias. Além disso, partículas de pólen podem liberar grânulos que provocam reações alérgicas, como asma, especialmente em dias chuvosos. A exposição a aminoácidos é maior no verão, evidenciando os riscos associados à inalação de partículas poluentes<sup>4</sup>.

### Conclusões

**Compreender** a concentração de poluentes orgânicos nitrogenados na atmosfera é crucial devido aos seus impactos na saúde e no meio ambiente. Essas substâncias afetam os ciclos biogeoquímicos, a formação de aerossóis e a deposição de nutrientes, além de contribuírem para o aquecimento global. Essa compreensão é fundamental para desenvolver estratégias eficazes de mitigação da poluição do ar e garantir um futuro mais sustentável.

### Referências e notas

- (1) GE, X. et al. *Atm. Env.* **2011**, 45,3, 524.
- (2) Cape, J.N.; Cornell, S.E.; Jickells, T.D.; Nemitz, E. *Atmospheric Research*, 2011, 102, 30-48.
- (3) Matos, J. T. V.; Duarte, R. M. B. O.; Duarte, A. C. *TrAC Trends in Analytical Chemistry*, 2016, 75, 97-107.
- (4) Di Filippo, P.; Pomata, D.; Riccardi, C.; Buiarelli, F.; Gallo, V.; Quaranta, A. *Atmos. Environ.*, 2014, 98, 179-189.



Categoria: Projeto

## Qualidade do ar em ambientes escolares: contribuindo para a conscientização e ações mitigatórias de acordo com os ODS.

Franke Mero Teste (PG)<sup>1\*</sup>, Maria Cristina Solci (PQ)<sup>1</sup> [franke.teste64@uel.br](mailto:franke.teste64@uel.br)

<sup>1</sup> - Departamento de Química, Universidade Estadual de Londrina, PR - Brasil.

Palavras-Chave: Poluentes atmosféricos, desenvolvimento sustentável, emissão veicular.

### Introdução

A qualidade do ar é um fator crítico para a saúde humana e a sustentabilidade ambiental. A crescente urbanização, industrialização e aumento das emissões de poluentes atmosféricos têm contribuído para a degradação da qualidade do ar em diversas regiões do mundo, afetando a saúde das populações e os ecossistemas.<sup>1</sup> Os poluentes atmosféricos, como material particulado (MP), sofrem diversas transformações químicas que interagem com o ambiente, a exposição a esses poluentes está associada a uma série de problemas de saúde, incluindo doenças respiratórias e cardiovasculares.<sup>1,2</sup> Reconhecendo essa problemática, as Nações Unidas incluíram a qualidade do ar como um componente essencial dos Objetivos de Desenvolvimento Sustentável (ODS), destacando a necessidade de estratégias integradas para monitorar e melhorar essa questão.<sup>3</sup> Este projeto visa colaborar com a implementação da Meta 11.6.2 do ODS 11, através de atividades educacionais em escolas que tornem compreensível o conceito de qualidade do ar. O objetivo é conscientizar a comunidade escolar sobre a necessidade de ações mitigativas, promovendo mudanças comportamentais que possam reduzir a poluição atmosférica. A educação ambiental é uma ferramenta poderosa para conscientizar as novas gerações sobre questões ambientais críticas, promovendo mudanças comportamentais que podem levar à redução da poluição do ar.<sup>4</sup>

### Metodologia

A metodologia adotada envolve a amostragem de material particulado fino (MP<sub>2,5</sub>) utilizando um amostrador de alto volume (Hi-vol), na vazão de 67,8 m<sup>3</sup> h<sup>-1</sup>, com análises gravimétricas e de reflectância de luz para determinar a concentração

de Black Carbon, no qual será utilizado um reflectômetro modelo M43D EEL (Smoke Stain Reflectometer Difusão Systems Ltd, Londres, Reino Unido).. As amostragens serão realizadas em 3 escolas localizadas em áreas de intenso tráfego veicular, permitindo uma análise detalhada da qualidade do ar local e dos impactos que possam ocorrer.

### Resultados esperados

Espera-se que os resultados deste trabalho, possam fornecer uma base científica sólida para a formulação de políticas públicas, além de promover a conscientização da comunidade sobre a importância da qualidade do ar.

### Considerações finais

Ao integrar aspectos de química atmosférica, saúde ambiental e sustentabilidade, espera-se contribuir para a construção de um futuro mais saudável e sustentável para as gerações presentes e futuras.

### Agradecimentos

PPGQuímica, CAPES, CNPq, e INCT de Energia e Ambiente.

### Referências e notas

- (1) Henning, R.J. Current problems in cardiology. 2024, 49,1.
- (2) Liu, Y. et al. Am. J. Respir. Crit. Care Med. 2019, 200, 1, 24–32.
- (3) Pugh, T. A., et al. Urban Forestry & Urban Greening. 2015, 14, 4, 883-897.
- (4) WORLD HEALTH ORGANIZATION. Acesso em: 5 mai. 2024.



Categoria: Projeto

## Avaliação Do Uso De Zeólitas Para a Remoção De Contaminantes Emergentes Em Águas Residuais

Gabriel Pagani de Morais<sup>1</sup> (PG), Diana Nara Ribeiro de Sousa<sup>1\*</sup> (PQ) dsousa@uel.br

<sup>1</sup> Departamento de Química, Universidade Estadual de Londrina, PR - Brasil.

Palavras-Chave: Sustentabilidade Hídrica, Resíduos Farmacêuticos, Contaminantes Emergentes, Qualidade da Água, Análise de Resíduos.

### Introdução

A presença de contaminantes emergentes, como resíduos farmacêuticos, em ambientes aquáticos tem gerado grande preocupação devido aos seus efeitos na saúde pública e no meio ambiente<sup>1,2</sup>.

A detecção crescente desses compostos em águas residuais, originados de fontes industriais, hospitalares e domésticas, destaca a ineficiência das estações de tratamento de esgotos (ETE) na sua remoção com métodos tradicionais, como floculação ou tratamento biológico<sup>3</sup>.

Nesse contexto, o uso de zeólitas, materiais microporosos com alta capacidade de adsorção, apresenta-se como uma solução promissora, devido à sua capacidade de adsorver seletivamente moléculas de diferentes tamanhos e polaridades, além de permitir a troca iônica, aumentando sua eficiência na remoção de contaminantes emergentes<sup>4,5</sup>. Este estudo visa a avaliação do uso de zeólitas para a remoção de medicamentos em efluentes, visando melhorar a qualidade da água e contribuir para o gerenciamento da qualidade dos recursos hídricos.

### Metodologia

O projeto será dividido em duas etapas: na primeira, a caracterização das zeólitas sintéticas comerciais por técnicas como (DRX) e (MEV).

Na segunda etapa, serão realizados testes físico-químicos de adsorção com controle de pH, temperatura, tempo de contato e concentração inicial dos adsorvatos, visando avaliar a eficiência das zeólitas na remoção de resíduos farmacêuticos de efluentes. A análise quantitativa dos contaminantes será feita por cromatografia líquida de alta eficiência acoplada ao detector de arranjo de diodos (HPLC-DAD), com validação metodológica baseada em precisão, linearidade e limites de detecção, garantindo a confiabilidade dos resultados.

### Resultados esperados

Espera-se que as zeólitas demonstrem alta eficiência na adsorção de fármacos, contribuindo para o desenvolvimento de processos de tratamento mais eficazes para a remoção de contaminantes emergentes. Além disso, o estudo fornecerá dados importantes sobre a aplicação desses materiais no tratamento de efluentes, com impacto direto na qualidade dos recursos hídricos.

### Considerações finais

As zeólitas têm grande potencial para aplicações de remediação ambiental devido à sua capacidade de adsorver contaminantes. Podendo este projeto contribuir para o avanço na tecnologia de tratamento de águas residuais, promovendo maior preservação ambiental e a proteção da saúde pública, sendo os resultados obtidos ser utilizados para orientar políticas de gerenciamento da qualidade da água.

### Agradecimentos

Aos órgãos de fomento e aos laboratórios LAFQ-UEL e DIA.

### Referências e notas

- (1) Machado K. C. et al. A preliminary nationwide survey of the presence of emerging contaminants in drinking and source waters in Brazil. *Science of the Total Environment*, 572, 2016.
- (2) Jacob R. S. et al. The environmental risks of pharmaceuticals beyond traditional toxic effects: Chemical differences that can repel or entrap aquatic organisms. *Environmental Pollution*, 268, 2021.
- (3) Caixeta M. P. Contaminants of Emerging Concern: a Review of Risk Assessment and Treatment Strategies. *U.Porto Journal of Engineering*, 9(1), 2023.
- (4) De Sousa D. N. R. et al. Equilibrium and kinetic studies of the adsorption of antibiotics from aqueous solutions onto powdered zeolites. *Chemosphere*, 205, 2018.
- (5) De Magalhães L. F.; Da Silva G. R.; Peres A. E. C. Zeolite Application in Wastewater Treatment. *Adsorption Science and Technology*, 2022.



Categoria: Projeto

## Perfil de poluentes emitidos pela combustão da mistura diesel/biodiesel

Leticia Gabriela Manzato (PG)<sup>1</sup>, Maria Cristina Solci (PQ)<sup>1\*</sup>

1 - Departamento de Química, Universidade Estadual de Londrina, PR - Brasil.

Palavras-Chave: Poluentes atmosféricos, emissão veicular, queima de combustíveis.

### Introdução

A combustão do diesel veicular é uma grande fonte de poluição do ar, pois diversos poluentes atmosféricos regulamentados e não regulamentados são emitidos a partir de sua combustão. O biodiesel surgiu como uma alternativa promissora ao uso de combustíveis fósseis, por ser um combustível sustentável, com o objetivo de ser menos poluente ao meio ambiente.<sup>1</sup> Atualmente, o biodiesel é utilizado na forma pura ou em mistura diesel/biodiesel. Com a combustão desses combustíveis, diversos poluentes atmosféricos são emitidos, os quais podem oferecer riscos à saúde e ao meio ambiente, sendo eles encontrados na fase particulado ao gasosa. O poluente atmosférico que apresenta um maior risco para a saúde pública de forma global têm sido o material particulado.<sup>1,2</sup> O material particulado (MP) se encontra em suspensão no ar, sendo composto por uma mistura de partícula solidas e liquidas, que se diferenciam em forma, composição química e tamanho, no qual sua forma de classificação é por meio do seu diâmetro.<sup>3</sup> Associado ao MP é encontrado o *black carbon* (BC) e os hidrocarbonetos policíclicos aromáticos (HPA), são poluentes emitidos principalmente per combustão antrópica e apresentam grandes riscos a saúde e ao meio ambiente, principalmente o BC que é um contribuinte para o aquecimento global.<sup>4,5</sup> Na fase gasosa um dos grandes poluentes emitidos são os aldeídos que além de ser prejudicial à saúde também atua como precursor de outros poluentes atmosféricos.<sup>6</sup> Portanto, este estudo tem como objetivo avaliar as concentrações dos poluentes: material particulado (MP), hidrocarboneto aromático policíclico (HAP), *black carbon* (BC) e compostos carbonílicos (CC), que são liberados na atmosfera pela combustão do diesel, biodiesel e sua mistura, comparando assim o aumento ou diminuição dessas emissões.

### Metodologia

As amostras serão coletadas no terminal central urbano de Londrina referentes a emissão da queima da mistura B12 e B14. A coleta do MP fino será realizada com um coletor do modelo ciclone e a determinação do MP será por meio de análise gravimétrica. A partir do MP coletado será realizado a determinação de HPAs por método cromatográfico e a determinação de BC por método de reflectância de luz. Para a coleta de aldeídos que se encontra na fase gasosa será utilizado cartuchos Sep-Pak C18, no qual será realizado a extração dos analitos por extração líquido-sólido e analisado por método cromatográfico.

### Resultados esperados

Com este trabalho é esperado realizar a determinação do MP, BC, HPA e CC. Avaliando a concentração dessas espécies em diferentes amostras de combustão de combustíveis referentes a mistura B12 e B14, avaliando possíveis aumentos ou diminuições na concentração dos analitos, de acordo com as amostras das diferentes misturas de combustíveis.

### Considerações finais

O monitoramento destes compostos se faz necessário uma vez que são prejudiciais à saúde, no qual com novos estudos é possível observar a necessidade de implementação de medidas efetivas para a melhoria da qualidade do ar.

### Agradecimentos

CAPES, CNPq, e INCT de Energia e Ambiente.

### Referências e notas

- (1) PALANI, Y. et Al. Environment engiering research. 27. 1, 2022.
- (2) GUARIEIRO, L.L.N. et Al. RVQ. 3. 5, 2011
- (3) KULSHRESTHA, U. Current World Environment, 13. 1, 2018
- (4) LACK, D. et Al. Anal. Bioanal. Chem. 406, 2014
- (5) MOJIRI, A. et Al. Science of the Total Environment. 696, 2019
- (6) PINTO, J. Atmospheric Pollution Research. 5. 3, 2014



Categoria: Trabalho Completo

## Menstruação e ciências: relações de poder e papéis de gênero.

Ana Carolina Hyrycena <sup>(PG)\*</sup>, Moisés Alves de Oliveira <sup>(PQ)</sup>.

ana.carolina.hyrycena@uel.br

Programa de Pós-graduação em Ensino de Ciências e Educação Matemática, Universidade Estadual de Londrina, PR - Brasil.

Palavras-Chave: Menstruação; Ciências; Feminilidade; Maternidade; Poder; Resistência.

### Introdução

Nesse estudo nos propomos a analisar discursos sobre menstruação e sua articulação com as ciências, sem desconsiderar sua correlação com as tradições culturais, saberes populares, histórias míticas, crenças religiosas e códigos de conduta. Para tal divulgamos um questionário sobre o tema em redes sociais, e obtivemos respostas de 69 participantes (61 mulheres e 8 homens) de 18 a 64 anos. Seguindo a abordagem qualitativa realizamos a análise do discurso a partir de teorizações foucaultianas. Apresentamos um recorte das narrativas obtidas, em que prevalecem os discursos que conectam a menstruação à mulher e à imposição da maternidade.

### Resultados e discussão

Os relatos das participantes aqui analisados apresentam uma visão normativa de gênero que define a menstruação como um processo intrínseco ao corpo feminino e à maternidade, uma vez que elas declararam que a menstruação é “algo natural de toda mulher” ou “a capacidade de poder ter filhos”, por exemplo. Nessa delimitação, as dimensões sociais e culturais envolvidas nesse fenômeno, a complexidade das identidades de gênero e a diversidade das experiências menstruais entre as mulheres e outras pessoas que menstruam são invisibilizadas/interditadas.

Essas normas são engendradas de acordo com valores morais articulados a discursos científicos, posto que áreas das ciências, como a medicina e a biomedicina, também contribuíram para fixar o ciclo menstrual como um evento biológico que assinala o início e o fim da vida fértil, limitando-o à função reprodutora, de modo que o sangramento mensal é explicado como uma gravidez não produzida e a menarca se configura como o rito que transforma a menina em mulher e possível mãe.<sup>(1)</sup>

Todavia, as relações de poder que constituem a menstruação também são compostas por pontos

de resistência que introduzem, na sociedade, clivagens que se deslocam, rompem unidades e suscitam reagrupamentos.<sup>(2)</sup> Logo, as ciências, enquanto agentes mutáveis em ação, também constituem a oposição às normas que limitam e interditam os corpos que menstruam, possibilitando a desarticulação dessa tradição e a visibilidade da pluralidade de perspectivas sobre a menstruação.

### Conclusões

As ciências, em conjunto com valores morais e práticas culturais, contribuem para a construção/perpetuação de discursos que normatizam os corpos que menstruam, prescrevendo como e para qual finalidade a menstruação deve ocorrer, de modo que, frequentemente, é definida como algo inerente ao corpo da mulher e à possibilidade de ser mãe, o que exclui e/ou interdita corpos e discursos que desviam das normas. Entretanto, essas normatizações são produtos de contextos históricos e, portanto, mutáveis. As ciências, embora participem da consolidação dessas normas, também podem constituir pontos de resistência, enquanto ferramentas para promover o questionamento dos papéis de gênero e valorização da diversidade de experiências dos corpos menstruantes.

### Agradecimentos

Agradecemos a CAPES, ao Grupo dos Estudos Culturais das Ciências e das Educações (GECCE) e ao Programa de Pós-graduação em Ensino de Ciências e Educação Matemática da Universidade Estadual de Londrina (PECEM-UEL).

### Referências e notas

- (1) ROHATSCH, M. Menstruação. Entre a ocultação e a celebração. In: XI JORNADAS DE SOCIOLOGÍA, 2015, Buenos Aires. **Memórias XI Jornadas De Sociología. Coordenadas Contemporâneas De La Sociología: tiempos, cuerpos, saberes.** Buenos Aires: UBA, 2015.
- (2) FOUCAULT, M. **História da Sexualidade 1: A vontade de saber.** 8. ed. São Paulo: Paz e Terra, 2019.



Categoria: Trabalho Completo

## A criação e validação de um jogo didático para o ensino da tabela periódica – O nascimento de DMITRI

Eduardo Geraldo de Sousa<sup>1</sup> (PG), Diana Nara Ribeiro de Sousa<sup>1\*</sup> (PQ), Josiane Leticia Hernandez<sup>1</sup> (PQ), Paulo Sérgio Camargo Filho<sup>2</sup> (PQ). \*dsousa@uel.br

<sup>1</sup>Departamento de Química, Universidade Estadual de Londrina, PR – Brasil.

<sup>2</sup>Programa de Pós-Graduação em Ensino de Ciências e Educação Matemática, Universidade Estadual de Londrina, PR – Brasil.

Palavras-Chave: Metodologias ativas; Ensino de Química; Jogo didático; Tabela Periódica.

### Introdução

Partindo do pressuposto de que os estudantes frequentemente demonstram pouco interesse pela disciplina de Química, percebendo-a como difícil, o ensino desse conteúdo se torna ainda mais desafiador<sup>1-2</sup>. Essa dificuldade de aprendizagem aponta para a necessidade de desenvolver métodos que despertem o interesse dos alunos. Assim, este trabalho tem como objetivo geral elaborar e validar o jogo "DMITRI" como um recurso didático para promover o engajamento dos estudantes com os conteúdos relacionados à organização da tabela periódica. O nome do jogo é uma homenagem ao químico russo Dmitri Mendeleev, que propôs o modelo da tabela periódica como o conhecemos hoje<sup>3</sup>. Mendeleev organizou e reorganizou os elementos de diversas maneiras até classificá-los em ordem crescente de massa atômica. Inspirado nesse processo, o jogo "DMITRI" busca proporcionar aos estudantes um maior contato com as propriedades dos elementos, assim como fez o cientista em seu tempo. O jogo foi projetado para ser utilizado nas escolas de educação básica, especificamente na disciplina de Química, a partir da perspectiva de um jogo didático<sup>4-5</sup>.

### Resultados e discussão

Em vista disso, foram elaboradas cartas de baralho com a temática de elementos químicos, apresentando uma ilustração central e os "naipes" em suas extremidades. O jogo foi idealizado para ser uma adaptação de um jogo popular chamado "Burro", o qual prevê que os jogadores devem garantir que estejam em suas mãos, o mais rápido possível, uma quadra de cartas que compartilham as mesmas informações. Na figura 1, é apresentado o protótipo idealizado para as cartas, assim como sua versão final.

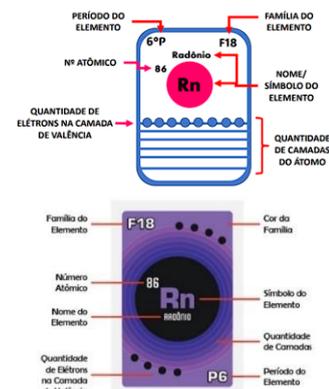


Figura 1. Protótipo e versão final para as cartas

Com o objetivo de transformar o ensino sobre a organização da tabela periódica mais lúdica e engajadora, DMITRI cumpre-os de modo satisfatório. Durante a sua utilização, foi solicitados aos alunos a resolução de um questionário. Dentre as respostas, algumas são apresentadas na Tabela 1, evidenciando o envolvimento dos estudantes com a dinâmica apresentada.

Tabela 1. Comentários dos estudantes sobre DMITRI

A. 1	"Foi possível retirar do jogo as propriedades de vários elementos de forma lúdica"
A. 2	"Apreendi as propriedades dos elementos com mais facilidade, de forma dinâmica e divertida"
A. 3	"O nome dos elementos, as famílias e os lugares onde ficam na tabela"

### Conclusões

O jogo DMITRI se mostrou válido dentro do seu propósito, de modo que a retomada de conteúdos previamente trabalhados cumpre com os objetivos de um jogo didático<sup>4</sup>, sendo possível também identificar que o mesmo promoveu o engajamento dos alunos na disciplina por meio de sua utilização.

### Referências e notas



## XXXIX Semana da Química e IX Jornada de Pós-Graduação

REFLETINDO OS PRÓXIMOS 50 ANOS: NOVOS HORIZONTES  
PARA O PROFISSIONAL DA QUÍMICA

Realização



proex

- (1) Vieira, L. M.; Guimarães, R. Li. XXIII CONIC / VII CONITI / IV ENIC, **2015**;
- (2) Afonso, A. F.; Melo, U. O.; Cancino, A. K. N. P.; Herculano, C. C. O.; Delfino, C. O.; Teixeira, M. D.; Oliveira, M. V. A. Rev. Pesq. Deb. Ed., **2018**, 8, 1, 578.
- (3) Koeving, T. E. V. Caverndish Square Publishing, LLC. **2014**, 95.
- (4) Cleophas, M. G.; Cavalcanti, E. L. D.; Soares, M. H. F. B. Didatização Lúdica no Ensino de Química/Ciências: Teorias de Aprendizagem e Outras Interfaces, **2018**.
- (5) Soares, M. H. F. B. REDEEQUIM, **2016**.



Categoria: trabalho completo

## CONCEPÇÕES DE FUTUROS PROFESSORES DE QUÍMICA ACERCA DAS DIMENSÕES DA DOCÊNCIA

Eduardo Santos da Silva(GD)<sup>1\*</sup>, Fabiele Cristiane Dias Broietti(PQ)<sup>1</sup> [eduardo.santos@uel.br](mailto:eduardo.santos@uel.br)

<sup>1</sup>Departamento de Química, Universidade Estadual de Londrina-PR - Brasil.

Palavras-Chave: Ensino, Concepções, Futuros professores, Docência.

### Introdução

A profissão docente demanda um conjunto complexo de conhecimentos e habilidades que envolve, além do domínio do conteúdo específico<sup>1</sup>. Embora existam diversas concepções a respeito dos conhecimentos indispensáveis na formação destes profissionais, as ideias sobre o que significa ser professor e quais as habilidades essenciais para o exercício dessa profissão são variadas e desafiadoras<sup>2</sup>. O presente estudo busca investigar as concepções de futuros professores de química acerca das dimensões necessárias para a docência.

### Resultados e discussão

Os dados são oriundos de respostas de sete estudantes que cursaram, no ano de 2021, a disciplina de prática de ensino e estágio supervisionado IV do curso de Licenciatura em Química de uma universidade do Norte do Paraná. Foi proposto que os estudantes respondessem ao seguinte questionamento: O que nós, professores de ciências, deveríamos conhecer/saber/saber fazer para ministrar uma docência de qualidade? Os dados foram organizados seguindo os pressupostos da Análise de Conteúdo de Bardin (2011)<sup>3</sup>, conforme as três etapas: pré-análise, exploração do material e tratamento dos resultados. Os discursos foram codificados com as letras do alfabeto (A, B, C, etc.) e utilizou-se um numeral para codificar trechos que expressavam ideias distintas do mesmo estudante; por exemplo, A1 (primeiro trecho), A2 (segundo trecho). Foram obtidos 30 fragmentos no total. No Quadro 1, apresentamos alguns exemplos:

Quadro 1: Saberes identificados e fragmentos de respostas.

SABERES	FRAGMENTOS	Total
Pedagógicos	Saber abordar o conteúdo de diferentes maneiras (A1). Incentivar a participação dos alunos (perguntas, respostas, atividades...)(A2)	16

Curriculares	Conhecer o Projeto Político Pedagógico da escola (B1)	2
Disciplinares	Ter conhecimento do assunto que ministra (A2);	6
Diversidade e inclusão	Conhecer a realidade dos alunos (C2)	6

O saber pedagógico contempla as reflexões dos licenciandos referentes às teorias educacionais, assim como às propostas de ensino que se pautaram nessas teorias, orientando as diversas abordagens e estratégias utilizadas pelos professores em sua prática profissional<sup>4</sup>. O saber curricular apresenta-se, concretamente, sob a forma de programas escolares (objetivos, conteúdos, métodos) que os professores devem aprender e aplicar<sup>2</sup>. O saber disciplinar refere-se aos saberes correspondentes aos diversos campos do conhecimento sob a forma de disciplinas<sup>2</sup>. A diversidade e a inclusão referem-se à habilidade de lidar com o outro em suas distintas realidades<sup>5</sup>.

### Conclusão

Os saberes pedagógicos foram os mais recorrentes na análise da turma investigada (n = 16), indicando que a prática docente está fortemente ancorada a esses conhecimentos em comparação com outros saberes.

### Agradecimentos

Universidade Estadual de Londrina (UEL)

### Referências e notas

(1) Carvalho, A. M. P. de. e Gil-Pérez, D. A formação de professores de ciências. 6. Ed. São Paulo: Cortez, 2001.

(2) Tardif, M. Saberes docentes e formação profissional. Petrópolis – RJ: Vozes, 2014.

(3) Bardin, L.(2011). Análise de conteúdo. São Paulo: Edições 70.

(4) De Lorena Stanzani, E.Dias Broietti, F. C.Meneghelo Passos, M. Saberes docentes na formação inicial de professores de química: novas compreensões à luz da análise textual discursiva. Revista Contexto & Educação, [S. l.], v. 37, n. 116, p. 442–464, 2022. DOI: 10.21527/2179-1309.2022.116.11489. Disponível em: <https://revistas.unijui.edu.br/index.php/contextoeducacao/article/view/11489>. Acesso em: 14 out. 2024.

(5) Brasil. Ministério da Educação. Base Nacional Comum Curricular.



Categoria: Trabalho completo

## Separação de Polímeros em Resíduos Plásticos: Um Estudo Experimental envolvendo o conceito Densidade

Eduardo Santos da Silva(GD)<sup>1\*</sup>, Genivaldo Romeiro Pineda Lelis(GD)<sup>1</sup>, Fabiele Cristiane Dias Broietti(PQ)<sup>1</sup> [eduardo.santos@uel.br](mailto:eduardo.santos@uel.br)

<sup>1</sup>Departamento de Química, Universidade Estadual de Londrina, PR - Brasil.

Palavras-Chave: Polímeros; Densidade; Ensino; Experimento.

### Introdução

As atividades experimentais são consideradas um excelente recurso para o aprimoramento do ensino e da aprendizagem em química<sup>1</sup>. Uma atividade investigativa<sup>2</sup> deve partir de uma situação-problema, onde a participação do aluno é intencional, suscitando a busca de informações, levantamento de hipóteses sobre o fenômeno investigado, discussões dos resultados com o intuito de elaborar uma solução para o problema exposto. Neste trabalho, apresentamos resultados de uma atividade experimental desenvolvida no estágio supervisionado. A atividade abordou o tema plásticos e o conceito densidade.

### Resultados e discussão

Os dados deste trabalho são oriundos de uma das atividades desenvolvidas na disciplina de Estágio Supervisionado IV, do curso de licenciatura em Química. Mais precisamente, no momento da regência, desenvolvida em um Colégio da cidade de Londrina. A turma era composta por 32 estudantes do 3º semestre de um curso técnico em Química. A atividade consistiu na discussão inicial de um texto acerca da importância da utilização de plásticos nas empresas de embalagem, pois se trata de um material de baixo custo, que pode ser reciclável. Os estudantes foram questionados também quanto à diversidade de plásticos existentes e o modo como eles podem ser reciclados, destacando os processos e técnicas utilizadas. Após os questionamentos iniciais, realizou-se um experimento no qual diferentes plásticos como: polipropileno(PP); polietileno de alta densidade (PEAD); poliestireno (PS); policloreto de vinila (PVC) e politereftalato de etileno (PET) foram colocados em diferentes solventes e observado se afundavam ou não. Na sequência, algumas questões pós-experimento foram propostas aos estudantes. No Quadro 1, é possível visualizar exemplos de questões pré e pós-experimento propostas e exemplos de respostas dos estudantes.

Quadro 1: Exemplos de questões e respostas dos estudantes.

Pré-experimento:	Respostas
Todos os plásticos são feitos do mesmo material?	Acredito que sim (A1) Depende da composição química dele (A12); Acho que sim (A4)
Você saberia dizer qual a composição química dos plásticos?	Depende, tem alguns mais resistentes e outros menos resistentes (A7)
Pós-experimento:	Respostas
Com base nos experimentos realizados, apresente uma resposta ao problema proposto.	Cor (A12). Densidade dos plásticos (A4). Resistência (A7)
Baseando-se na explicação do professor, defina o que são polímeros.	Moléculas formadas por repetições de monômeros(A12)

Ao longo da atividade, os alunos expuseram suas ideias sobre a composição dos plásticos, assim como as compreensões pós-experimento. Ao final, os estudantes entenderam como o conceito densidade pode auxiliar na separação dos vários tipos de plásticos.

### Conclusões

Destacamos o envolvimento dos estudantes durante a aula, bem como as compreensões conceituais possibilitadas a partir da atividade experimental. Além disso, destacamos o estágio como um espaço formativo fundamental para o desenvolvimento dos saberes docentes.

### Agradecimentos

Universidade Estadual de Londrina (UEL)

### Referências e notas

- (1) AZEVEDO, M. C. P. S. Ensino por investigação: problematizando as atividades em sala de aula. In: Carvalho,
- (2) CARVALHO, A. M. P. Ensino e aprendizagem de Ciências: referenciais teóricos e dados empíricos das sequências de ensino investigativas - (SEI). In: LONGHINI, M. D. O uno e o diverso na educação. Uberlândia: Editora da UFU, 2011. p.253-66.



**Categoria: Trabalho Completo**

## Relatos de uma aula experimental realizada no estágio de regência do curso de Licenciatura em Química da UEL

Genivaldo Lelis<sup>1</sup> (GD), Josiane Hernandez<sup>2</sup> (PG), Miriam Souza<sup>3</sup> (PG)\*- miriam.covre@uel.br

1. Departamento de Química, Universidade Estadual de Londrina, PR - Brasil.

2. Departamento de Química, Universidade Estadual de Londrina, PR - Brasil.

3. Departamento de Química, Universidade Estadual de Londrina, PR - Brasil.

Palavras-Chave: Sequência Didática, Investigativo, Ácidos, Bases.

### Introdução

A Química é considerada uma das disciplinas mais complicadas do Ensino Médio, por ser muito abstrata.<sup>1</sup> Entretanto, a experimentação é uma abordagem que consegue realizar uma conexão entre a teoria e o cotidiano dos discentes, tornando a química mais concreta.<sup>2</sup>

Diante da problemática apontada acima, e para atender as exigências da disciplina de Estágio Supervisionado do curso de Licenciatura em Química da Universidade Estadual de Londrina - UEL, este trabalho tem como objetivo relatar o desenvolvimento de uma atividade experimental sobre condutividade, empregada a uma turma do 1º ano do Ensino Médio.

### Resultados e discussão

Para analisar se o experimento conseguiu proporcionar aos discentes a capacidade de relacioná-lo com a teoria, propôs-se uma situação problema e alguns questionamentos ao longo da prática. A problemática abordou um cenário hipotético em que um professor responde a um questionamento realizado por um aluno, e afirma que a água conduz eletricidade. A partir daí, iniciou-se a prática que consistiu em montar um sistema elétrico e comprovar se água realmente conduzia eletricidade. Utilizou-se dois tipos de água para o experimento - água da torneira e água destilada. Outrossim, utilizou-se também dois compostos que, inicialmente, foram identificados como A e B. Estes compostos foram adicionados em água, para que os alunos pudessem descobrir o seu caráter - iônico ou covalente -, pois os compostos iônicos conduzem corrente elétrica e os compostos covalentes não conduzem.

Os dados experimentais foram anotados pelos discentes no roteiro experimental.

Dos questionamentos realizados, coletou-se as respostas da questão pós-experimental (Figura 1), de um dos grupos, para investigar se a prática foi bem-sucedida.

6. Baseando-se na explicação do professor, faça um desenho de como se ocorre a condução da corrente elétrica na água e explique em baixo o que você quis dizer com a ilustração.

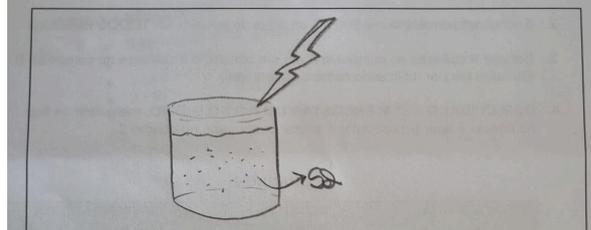


Figura 1 - questão pós-experimental.

Analisando a Figura 1, é possível inferir que os estudantes conseguiram relacionar a teoria e a prática, pois ilustraram que é o composto iônico, dissolvido em água, que conduz eletricidade, e não a água por si só. A partir dos resultados evidenciados, pode-se inferir que a atividade experimental favoreceu a aprendizagem e possibilitou relacionar a teoria e a prática.

### Conclusões

A atividade experimental conseguiu atingir o seu objetivo. Os alunos demonstraram interesse no experimento e conseguiram explicá-lo por meio do conteúdo abordado. Desta forma, foram capazes de relacionar a prática com a teoria.

### Agradecimentos

Agradeço a Universidade Estadual de Londrina e a semana da química pela oportunidade de apresentar o meu trabalho, que contribuiu grandemente para o meu desenvolvimento profissional e pessoal.

### Referências e notas

- (1) Santos, R. G. Ensino não presencial de Química: uma investigação das metodologias e ferramentas digitais adotadas na pandemia de Covid-19. Trabalho de Conclusão de Curso - Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia de Goiás. Itumbiara, p. 10-11. **2022**.
- (2) Souza, M. C. C. A utilização de laboratórios nas aulas de química das escolas públicas de Londrina. Monografia (Especialização em Química do Cotidiano) - Universidade Estadual de Londrina. Londrina, p. 48. **2013**.



Categoria: Trabalho Completo

## AÇÕES DOCENTES EM AULAS REMOTAS DE QUÍMICA NO ENSINO SUPERIOR

Isadora P. Barbosa<sup>1\*</sup> (PG), Fabiele C.D. Broietti<sup>2</sup>(PQ) [isadora.polvani@uel.br](mailto:isadora.polvani@uel.br)

<sup>1</sup>Programa de Pós-Graduação em Ensino de Ciências e Educação Matemática, Universidade Estadual de Londrina, PR-Brasil, <sup>2</sup> Departamento de Química, Universidade Estadual de Londrina, PR – Brasil

Palavras-Chave: Ensino Remoto Emergencial, Aulas Síncronas, Formação de professor.

### Introdução

O ato de ensinar é composto por um conjunto de ações realizadas pelo docente ao longo de um período específico. Por isso, investigar essas ações torna-se de grande importância. Com o intuito de superar as perspectivas normativas sobre a docência, Tardif e Lessard sugerem que a atividade docente seja estudada como qualquer outro trabalho humano, descrevendo e analisando as atividades materiais e simbólicas dos trabalhadores.<sup>1</sup> Por conseguinte, neste estudo, consideramos a ação docente como a “ação que o professor desenvolve em sala de aula, tendo em vista o ensinar e o aprender”.<sup>2</sup> Desse modo, entendemos as ações docentes como ações que o professor faz em suas aulas, sejam essas planejadas ou espontâneas. O presente estudo é de caráter qualitativo e objetivou descrever e analisar as ações docentes em aulas remotas síncronas de Química no Ensino Superior. Para tal propósito, foram analisadas aulas de duas professoras do curso de Licenciatura em Química. As aulas foram gravadas em áudio e vídeo e posteriormente transcritas. Os dados foram sistematizados seguindo os pressupostos da Análise de Conteúdo.<sup>3</sup>

### Resultados e discussão

Mediante as análises, foram identificadas 11 ações docentes para a Professora 1 (P1) e 12 ações docentes para a Professora 2 (P2).

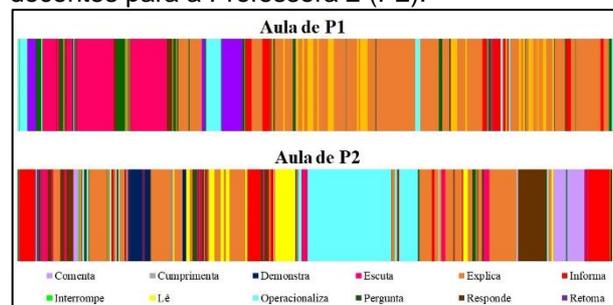


Figura 1 – Distribuição temporal das ações docentes nas aulas síncronas de P1 e de P2.

A Figura 1 mostra o entrelaçamento das ações encontradas em ambas as aulas síncronas, ou seja, elas ocorrem em intervalos muito curtos entre uma ação e outra, o que indica que as professoras executaram várias ações, quase que simultaneamente, ilustrando a complexidade de descrever e analisar o trabalho docente durante uma aula. Ao analisar as aulas síncronas no formato de ensino remoto emergencial (ERE), observamos certa similaridade com as ações docentes identificadas em aulas presenciais, com a ocorrência das ações “Interrompe” e “Operacionaliza”, as quais podem ser consideradas representativas do ERE. Além disso, foram identificadas mais ações docentes para as aulas de P2 em comparação com as aulas de P1. Na disciplina ministrada por P1 foram abordados temas relacionados à formação docente, voltados para a preparação dos licenciandos como futuros professores. Já a disciplina ministrada por P2, de caráter mais experimental, tinha como objetivo discutir algumas técnicas de laboratório e realizar alguns experimentos envolvendo conceitos químicos.

### Conclusões

Desse modo, concluímos que, nesta pesquisa, a especificidade da disciplina, os recursos didáticos, o estilo do professor e a configuração do ERE contribuíram na diversidade e na incidência das ações docentes em aulas síncronas de Química do Ensino Superior.

### Agradecimentos

Agradecemos à CAPES pelo apoio financeiro.

### Referências e notas

- (1) Tardif, M.; Lessard, C. O trabalho docente. Petrópolis: Vozes, 2008.
- (2) Arruda, S. M.; Passos, M. M.; Broietti, F.C.D. O programa de pesquisa sobre a ação Docente, ação discente e suas conexões (PROAÇÃO): fundamentos e abordagens metodológicas. Revista de Produtos Educacionais e Pesquisa em Ensino, 2021, v. 5, n.1, p. 215- 246.
- (3) Bardin, L. Análise de conteúdo. São Paulo: Edições 70, 2011.



## INTERAÇÕES ENTRE AS AÇÕES DOCENTES E DISCENTES EM UMA AULA EXPERIMENTAL DE QUÍMICA NO ENSINO SUPERIOR

Isadora P. Barbosa<sup>1\*</sup> (PG), Fabiele C.D. Broietti<sup>2</sup>(PQ) [isadora.polvani@uel.br](mailto:isadora.polvani@uel.br)

<sup>1</sup>Programa de Pós-Graduação em Ensino de Ciências e Educação Matemática, Universidade Estadual de Londrina, PR – Brasil, <sup>2</sup> Departamento de Química, Universidade Estadual de Londrina, PR – Brasil

Palavras-Chave: Ensino Remoto Emergencial, Aulas Síncronas, Formação de professor.

### Introdução

Ensinar é uma prática universal e antiga que desempenha um papel fundamental em nossa sociedade, sendo objeto de estudo para muitos pesquisadores.<sup>1</sup> Reconhecemos a importância de os professores terem acesso a pesquisas que os orientem sobre as normas e atribuições da docência. No entanto, é fundamental que essas pesquisas também incluam perspectivas voltadas para as ações que os professores executam de fato em sala de aula. Desse modo, investigar as ações docentes com base no que os professores realizam diariamente em sala de aula é um tema ainda pouco explorado, mas de grande importância para compreender como o trabalho docente é organizado no cotidiano.<sup>1,2</sup> O presente estudo é de caráter qualitativo e objetivou descrever e analisar as ações docentes e discentes em uma aula remota síncrona de Química Experimental I no Ensino Superior. Para tal propósito, foram analisadas aulas de uma professora do curso de Licenciatura em Química. A aula foi gravada em áudio e vídeo e transcrita. Os dados foram sistematizados seguindo os pressupostos da Análise de Conteúdo.<sup>3</sup>

### Resultados e discussão

Mediante as análises, foram identificadas 11 ações docentes e 6 ações discentes. Com base nos resultados, as ações “Interrompe” e “Operacionaliza” foram consideradas representativas do Ensino Remoto Emergencial (ERE). Ao somarmos a duração de todas as ações discentes, constatou-se que os alunos participaram somente em 11,60% da aula. Olhando individualmente para a participação dos alunos, observou-se a participação de 16 alunos. Conforme a Figura 1, em relação às interações entre as ações docentes e discentes, foram evidenciadas 104 interações, sendo 89 conexões e 15 desconexões. Além disso, nesta investigação, as desconexões se caracterizaram por ser ações discentes não planejadas, como abordagem de assuntos não relacionados a aula e por equívocos na utilização

dos recursos da chamada de vídeo.

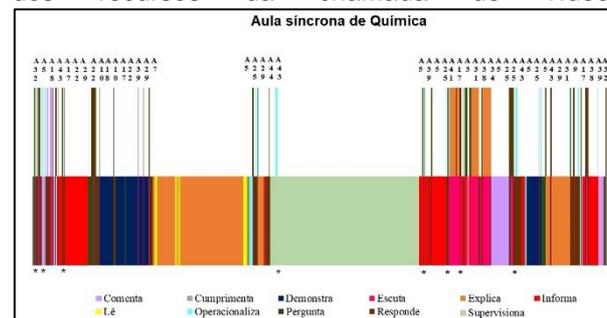


Figura 1 – Representação das interações entre as ações docentes e discentes na aula analisada.

Desse modo, a demonstração de experimentos e o modo como a docente os conduziu refletiu na diversidade e na incidência das ações docentes e discentes observadas. Além disso, a incidência e a diversidade das ações docentes e discentes e das interações, nesta pesquisa, podem estar relacionadas ao menos a dois fatores: os recursos didáticos empregados pela docente e a configuração do ensino remoto.

### Conclusões

Com isso, concluímos que, neste estudo, as ações realizadas pela professora de fato influenciaram as ações realizadas pelos alunos, porém essa interação não é causal. Ao compararmos os nossos resultados com os resultados de Dias<sup>4</sup>, notamos que P1 também precisou lidar com ações discentes não oriundas das ações docentes.

### Agradecimentos

Agradecemos à CAPES pelo apoio financeiro.

### Referências e notas

- (1) Tardif, M.; Lessard, C. O trabalho docente. Petrópolis: Vozes, 2008.
- (2) Arruda, S. M.; Passos, M. M.; Broietti, F.C.D. O programa de pesquisa sobre a ação Docente, ação discente e suas conexões (PROAÇÃO): fundamentos e abordagens metodológicas. Revista de Produtos Educacionais e Pesquisa em Ensino, 2021, v. 5, n.1, p. 215- 246.
- (3) Bardin, L. Análise de conteúdo. São Paulo: Edições 70, 2011.
- (4) DIAS, M. P. As ações de professores e alunos em salas de aula de matemática: categorizações e possíveis conexões. 2018. 158 f. Dissertação (Mestrado em Ensino de Ciências e Educação Matemática) – Universidade Estadual de Londrina, Londrina, 2018.



Categoria: Trabalho Completo

## Eletrodos compósitos à base de grafite-epóxi e coloides de nanopartículas de Ag para demonstrações práticas de ensino de eletroquímica

Lohan R. Ychisawa<sup>1</sup> (IC), Pablo C. Soto<sup>1</sup> (PG), Gabrielle Sarto<sup>1</sup> (PG), Gabriela V. de Mello<sup>1</sup> (IC), João Vitor Martins<sup>1</sup> (PG), Thiago N. M. Cervantes<sup>1</sup> (PQ), Lucio C. de Almeida<sup>1</sup> (PQ)\*. [lucioalmeida@uel.br](mailto:lucioalmeida@uel.br)

<sup>1</sup> Departamento de Química, Universidade Estadual de Londrina, PR - Brasil.

Palavras-chave: Eletrodo compósito, Eletroanalítica, Compósito grafite-epóxi

### Introdução

Uma temática recorrente no ensino de eletroquímica consiste no emprego de materiais condutores para demonstrar as mais diversas técnicas envolvendo aplicação de corrente/potencial, como as voltametrias. Dentre esses materiais, uma alternativa sustentável aos eletrodos metálicos, comumente empregados, são os eletrodos de grafite devido ao seu baixo custo e fácil manuseio. Entretanto, estes apresentam baixa condutividade elétrica em comparação aos eletrodos metálicos, resultando em reações de óxido-redução mais lentas. Dessa forma, o objetivo do presente trabalho é apresentar uma forma simples, prática e rápida de obter eletrodos compósitos de grafite para usá-los em demonstrações prática de técnicas eletroquímicas no ensino de química.<sup>1</sup>

### Resultados e discussão

Os eletrodos compósitos à base de grafite-epóxi foram preparados com a mistura de 50% (m/m) grafite e 50% (m/m) de resina epóxi. Este compósito foi dividido em três partes, onde a primeira consistiu no compósito puro (Eletrodo 1), na segunda foi adicionado a este 1 mL de solução coloidal de nanopartículas de Ag, AgNPs<sup>2</sup>, (Eletrodo 2) e na última foi adicionado 2 mL de AgNPs (Eletrodo 3). O compósito foi inserido manualmente em uma ponteira para micropipetas de 1 mL, sendo que a ponta foi seccionada de modo a formar um eletrodo circular de 4 mm de raio. Após a secagem dos eletrodos, foram realizadas as voltametrias cíclicas em solução padrão ferri/ferrocianeto de potássio 5 mmol L<sup>-1</sup> em 0,1 mol L<sup>-1</sup> de NaSO<sub>4</sub>.

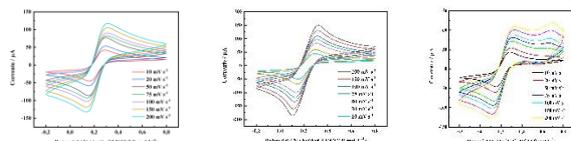


Figura 1. Voltametrias cíclicas dos eletrodos a) 1, b) 2 c) 3, obtidas em diferentes velocidades de varredura.

As voltametrias cíclicas apresentaram os picos característicos para  $\text{Fe}^{2+} \rightarrow \text{Fe}^{3+}$  e  $\text{Fe}^{3+} \rightarrow \text{Fe}^{2+}$  em 0,311 e 0,136 V, respectivamente. Além disso, para o eletrodo 3, foi possível observar um pico de oxidação, em 0,695 V, característico da oxidação de Ag(s). Logo, infere-se que a variação na concentração das AgNPs influencia as propriedades do eletrodo de grafite-resina epóxi.

A partir das voltametrias também foram obtidos os valores dos máximos de correntes nos picos de oxidação e redução em função das diferentes velocidades de varredura. Através desses valores, foi calculado a área eletroquimicamente ativa pela equação de Randles-Sevcik, onde os Eletrodos 1, 2 e 3 apresentaram áreas eletroquimicamente ativas 1,63, 2,71, 1,68 vezes maiores que as suas áreas geométricas, respectivamente.

### Conclusões

Os eletrodos compósitos à base de grafite-epóxi foram sensíveis a oxidação/redução da sonda empregada,  $\text{Fe}^{2+}/\text{Fe}^{3+}$ , além de apresentar, para o eletrodo 3, o sinal característico de oxidação da Ag(s), indicando que a quantidade de AgNPs influencia nas propriedades do compósito. Além disso, mediante os resultados preliminares, espera-se que os esses eletrodos sejam capazes de determinar analitos em solução e atuem como modelos para demonstrações de técnicas eletroquímicas em práticas no ensino de química.

### Agradecimentos

À CNPq, CAPES, Fundação Araucária e ao Laboratório de Eletroquímica Ambiental (LabEA).

### Referências

- CALIXTO, C. M. F.; CERVINI, P.; CAVALHEIRO, É. T. G. Eletrodo compósito à base de grafite-araldite®: aplicações didáticas. *Química Nova*, v. 31, n. 8, p. 2194–2198, 2008.
- de SANTANA, H.; ZAIA, D. A. M.; CORIO, P.; HABER, F. E.; LOUARN, G. Preparação e caracterização de substratos SERS ativos: Um estudo de adsorção do cristal violeta sobre nanopartículas de prata. *Quim Nova*, v. 29, n. 2, p. 194–199, 2006.



**Categoria: Trabalho Completo**

## A concepção infantil sobre a Ciência e cientista: uma pesquisa de campo em escolas londrinenses

Isadora V. Quimentoni<sup>1</sup> (GD), Lívia M. G. Delvechio<sup>1</sup> (GD), Jaqueline M. G. da Silva<sup>2</sup> (PG), Daiane de J. G. Horas<sup>2</sup> (GD), Daniel A. Alves<sup>2</sup> (GD), João H. de O. Altieri<sup>1</sup> (GD), Carla C. Perez<sup>2</sup> (PQ), Fabiele C. D. Broietti<sup>2</sup> (PQ), Roberta A. Medeiros<sup>2</sup> (PQ), Maria Luiza Zeraik<sup>2</sup> (PQ)\*  
zeraikml@uel.br

<sup>1</sup> Departamento de Farmácia, Universidade Estadual de Londrina, PR-Brasil; <sup>2</sup> Departamento de Química, Universidade Estadual de Londrina, PR-Brasil.

Palavras-Chave: *Introdução a Ciência, Educação Infantil, análise de desenhos.*

### Introdução

A alfabetização científica é uma das ações pedagógicas imprescindíveis na Educação Infantil. Neste sentido, considerar a imaginação, emoções e intuição da criança para o início do processo de aprendizagem científica se faz necessário.<sup>1,2</sup>

O projeto de extensão “Introdução de conceitos das Ciências Naturais na Educação Infantil por meio da experimentação”, promovido por docentes e discentes do Departamento de Química e Farmácia, tem desenvolvido em escolas londrinenses intervenções que visam a aprendizagem científica. Neste resumo é reportada uma das atividades realizadas em duas escolas.

O objetivo deste estudo foi analisar desenhos e falas de crianças da Educação Infantil de uma escola privada e outra pública com relação a suas concepções de Ciências.

### Resultados e discussão

O intuito inicial deste experimento foi fazer uma prospecção e verificar o que é Ciências para as crianças. Assim, começamos com a pergunta “O que é Ciências para vocês?”, pedimos para desenharem, depois fizemos entrevistas individuais pedindo para as crianças relatarem o que eles haviam desenhado.

Os desenhos traçaram mulheres cientistas realizando experimentos diversos, fortemente associados aos experimentos químicos e à natureza.

Os desenhos foram classificados nas seguintes categorias: vidrarias e experimentos, cientistas e laboratórios, natureza, família, números e máquinas, a grande maioria foi classificada nas 2 primeiras categorias.

Os resultados também reportaram fortes influências de bombas, explosões, fumaça e

alteração de cores na concepção de Ciência. Alguns desenhos também revelam aspectos históricos na ideia de Ciência, como os dinossauros.

Como previsto, houve traços sem interpretação clara, porém, quando adicionados aos diálogos com os co-autores deste trabalho (entrevistas com as crianças), verificou-se a importância da escuta neste nível de ensino.

Com dificuldades em expressar o termo “fogos de artifícios”, uma das crianças relatou “cores no céu” como Ciência. Logo, apesar do desconhecimento dos processos químicos envolvidos nos fogos de artifício, esta é, conforme uma das crianças, uma Ciência.

A interpretação dos desenhos somados com os diálogos sugere que vídeos e experimentos já vistos anteriormente são as principais fontes de concepção científica.

Os resultados sugerem uma correlação entre cientista e criadores de “coisas novas” e, conforme outra criança, “aquele que mistura as coisas”.

### Conclusões

Embora as representações e diálogos das crianças não expressem o conceito de Ciência em sua totalidade, conclui-se que as concepções já apresentam elementos importantes para o conceito. Portanto, com a continuidade do projeto de extensão, novas propostas de experimentos serão aplicadas para o fomento do conceito de Ciência e cientista.

### Agradecimentos

À Universidade Estadual de Londrina, e às escolas participantes do projeto.

### Referências

- (1) Lorenzetti, B.; Delizoicov, D. Ensaio pesquisa em educação de ciências, **2001**.
- (2) Fary, B. A.; Silva, D. C. C. da. SiNECT, **2022**.



## Trabalho Completo

# Mutação climática: uma análise de Love Death & Robots

Matheus E. D. de Godoy<sup>1</sup>(PG)\*, Matheus R. da Silva<sup>2</sup>(PG), Moisés A. de Oliveira<sup>3</sup>(PQ).  
matheus.eduardo@uel.br

<sup>1,2,3</sup>: Departamento de Química, Universidade Estadual de Londrina, PR – Brasil..

Palavras-Chave: *Mutação Climática, Love Death & Robots, Bruno Latour, Ensino de Ciências.*

## Introdução

A mutação climática ganha cada vez mais espaço nas discussões sobre diversos temas, configurando-se como pano de fundo para outras problemáticas.<sup>1,2</sup> Pela ótica dos Estudos Culturais das Ciências e das Educações, a produção de significados articula artefatos culturais, que constituem pedagogias próprias, para além dos ambientes formais. O objetivo deste trabalho é examinar o episódio “Os três robôs: saída estratégica” da terceira temporada da animação *Love, Death & Robots* produzida pela Netflix, de modo a compreender os discursos produzidos a respeito da mutação climática.<sup>2</sup>

## Resultados e discussão

A série *Love Death & Robots* trata de aspectos da ciência e tecnologia. No episódio “Os três robôs: saída estratégica”, são apresentados três robôs em uma terra num futuro distópico com traços de civilização. Diante do colapso climático e social, as classes dirigentes abandonaram pretensões de preocupação com os 99% da população e partiram para outras formas de sobrevivência. Os robôs exploram diferentes locais, diferentes respostas das classes à catástrofe. Os pobres lutavam pela sobrevivência, caçando animais até a extinção e digladiando-se com armas e armadilhas arcaicas. Os milionários foram capazes de se isolarem no mar, “sonho libertário. [...] uma nação estado soberana”.<sup>3</sup> Observamos que o ideal neoliberal permeia as cenas, propondo uma sociedade “sem estado”, capaz de levar os humanos à salvação individual. O grupo dos bilionários buscou atingir o ápice da desregulamentação, a migração do planeta em direção a outro. Em referência a um bilionário “do mundo real” um dos robôs questiona: “quem será que conseguiu sair?”.<sup>3</sup> Na cena seguinte um astronauta vivendo em Marte abre lentamente seu capacete, revelando um gato que prontamente responde: “estava esperando quem, Elon Musk?”.<sup>3</sup> A narrativa ecoa conceitos e proposições de Bruno Latour, como o conceito de vetor Local-Global.<sup>3</sup> Esse vetor produziria, a partir da modernização do Local, um *Global-mais* – uma

humanidade homogênea, um humano ideal. Porém, ao caminharem sobre as ruínas da civilização, as personagens mostram que o resultado foi a *globalização-menos* – uma visão única que representa interesses particulares.<sup>2</sup> Se a proposição de se vincular a um solo (Local) é um sinal de retrocesso, fugir da intrusão de Gaia partindo para outro mundo seria o objetivo.<sup>2</sup> Isso pressupõe que podemos desistir da terra em detrimento de outro planeta, podemos destruí-la, extraindo todo “recurso” – humano e material – necessário para produção de mais capital. Nesse intento, Elon Musk – empresário desenvolvimentista – faz a proposição de colonização de Marte há anos, reproduzindo esse ideal. Dessa maneira, ao propor discutir os aspectos relacionados ao fim do mundo o episódio toca em perspectivas que levam em consideração uma crítica ao modo de produção, produzindo uma pedagogia própria.

## Conclusões

A produção dos significados sobre a mutação climática parte dos mais diversos artefatos culturais, não se restringindo à escola. Ao analisar o episódio “Os três robôs”, a partir das teorizações de Bruno Latour a respeito da mutação climática, pudemos perceber que ela propõe outras formas de compreender a mutação climática, para além de respostas individuais para (sobre)viver no Antropoceno. A série proporciona uma maneira de questionar e criticar a resolução da mutação através da tecnologia e da modernização desenfreada. Concluímos que a série produz uma pedagogia própria: trata da mutação climática, a partir da proposição de que o sistema de produção capitalista, neoliberal e modernizante vem produzindo um tipo de “fim do mundo”.

## Referências e notas

- (1) STENGERS, Isabelle. No tempo das catástrofes. São Paulo: Cosac & Naify, 2015.
- (2) LATOUR, Bruno. Onde Aterror?: como se orientar politicamente no Antropoceno. Rio de Janeiro: Bazar do Tempo, 2020.
- (3) TRÊS ROBÔS. In: LOVE, Death & Robots (terceira temporada). Criação John Scalzi. Produtores: David Fincher e Tim Miller. Estados Unidos: Netflix, 2022. 11 min, son., color. Temporada 3, episódio 1. Série exibida pela Netflix. Acesso em: 10 out. 2024.



**Categoria: Trabalho Completo**

## **(Des)Afetos à produção científica promovidos pelas Operações Psicológicas no Brasil**

Matheus Rodrigues da Silva<sup>1</sup> (PG), Moisés Alves de Oliveira<sup>2</sup> (PQ)\*

moises@uel.br

<sup>1</sup>Programa de Pós-Graduação em Ensino de Ciências, Universidade Estadual de Londrina, PR-Brasil.

<sup>2</sup>Departamento de Química, Universidade Estadual de Londrina, PR-Brasil.

Palavras-Chave: (Des)Afetos, Operações Psicológicas, Produção Científica, Governo Bolsonaro.

### **Introdução**

Vivemos em um período particular da história em que teorias da conspiração e fake News são amplamente divulgadas. A recente digitalização do mundo, vem acompanhada de uma mudança da percepção e da convivência em sociedade, com o aumento vertiginoso de informação disponível, que deixam os sujeitos atordoados pelo excesso de comunicação. Na Sociedade do Controle, o regime da informação utiliza as informações e processamento de dados como ferramentas de controle, determinando processos sociais, políticos e econômicos, exercendo uma forma de Psicopoder.<sup>1,2</sup>

Por exemplo, as (des)informações a respeito dos efeitos das vacinas COVID-19, a emergência de ideias como terraplanismo, difamação de universidades e o questionamento dos dados sobre as queimadas na Amazônia. Consideramos que o governo no período de Bolsonaro, participou ativamente na divulgação de informações falsas, por meio de estratégias de propaganda nominadas operações psicológicas.<sup>3</sup> Acontecimentos que ocorrem no contexto capitalista como (des)informação característicos da Sociedade do Controle.<sup>2</sup> Este trabalho objetiva analisar características das estratégias dessas operações e como afetam as discussões a respeito da ciência brasileira.

### **Resultados e discussão**

Os principais resultados encontrados na pesquisa documental de arquivos do exército brasileiro indicam que a propaganda é utilizada como ferramenta de controle da informação, trazendo benefícios ao governo e daqueles que as utilizam. Entre as técnicas utilizadas e descritas no documento de operações psicológicas estão: I - Ampliação e desfiguração dos fatos desfavoráveis

que geram efeitos negativos ao governo. II – Divulgação de boatos de autenticidade questionável. III – Ataque Pessoal, Endemoniamento e/ou desumanização do adversário. IV - Acusação de Atrocidade, e imputação de erros, crimes, barbaridades e crueldades a respeito do adversário, mesmo que não sejam verdadeiras.<sup>3</sup>

O governo passa a se instituir por meio da (des)informação. A esfera pública se fragmenta, cada um recebe uma notícia. As propagandas contribuem para a polarização e individualização da sociedade, poluindo o ambiente discursivo através de fake news e teorias da conspiração calculadas.<sup>4</sup>

Nesse contexto, os meios políticos também são afetados, levando a disrupções massivas no processo democrático. A democracia se degenera em infocracia<sup>4</sup>. Os alvos, como universidades, institutos científicos e pessoas ligadas à produção científica que produzem pesquisas potencialmente danosas ao governo, são apontadas como inimigas, desacreditadas, perdem orçamento e credibilidade diante da sociedade. A esses efeitos, chamamos de (des)afetos.

### **Conclusões**

Concluimos que o sucateamento de universidades, instituições públicas e descrédito social da produção científica, faz parte de uma estratégia governamental vigente no período estudado por parte de militares, integrantes do governo, bem como o próprio presidente.

### **Referências e notas**

- (1) DELEUZE, Gilles. Conversações. Editora 34, 2017.
- (2) HAN, Byung-Chul. Psicopolítica: O Neoliberalismo E As Novas Técnicas De Poder. Belo Horizonte: Editora Áyiné, 2018.
- (3) EXÉRCITO BRASILEIRO. Operações psicológicas. Brasília: Exército Brasileiro, 1999.
- (4) HAN, Byung-Chul. Infocracia: Digitalização e a Crise Da Democracia. Editora Vozes, 2022.



Categoria: Trabalho Completo

## Adaptação de embalagens de medicamentos para aplicação em experimentos de química nas escolas

Mayara M. Fonseca<sup>1</sup> (PG)\*, Renan N. Santos<sup>1</sup> (IT), Thaianie L. Aleluia<sup>1</sup> (GD), Lohan R. Ychisawa<sup>1</sup> (IC), Bruna Coldibeli<sup>1</sup> (PG), Elen R. Sartori<sup>1</sup> (PQ)

\*mayara.martins@uel.br

<sup>1</sup>Departamento de Química, Universidade Estadual de Londrina, PR - Brasil.

Palavras-Chave: (Ensino de Química, Experimentos de Química, Sustentabilidade, Reutilização, Aprendizagem).

### Introdução

O uso de experimentos no ensino de Química aproxima a teoria da realidade dos estudantes, promovendo uma compreensão mais eficaz. A realização de atividades experimentais em sala de aula pode ser feita de maneira inovadora e sustentável, incentivando o uso de materiais reutilizáveis, como frascos de medicamentos e seringas, que fomentam a cultura de sustentabilidade.<sup>1</sup> A titulação ácido-base é um método utilizado para determinar a concentração de substâncias em solução, como acidez de vinagres. A reação envolve um titulante e o ponto final é identificado pela mudança de cor de um indicador ácido-base. Indicadores naturais, como o extrato de beterraba, são alternativas acessíveis e sustentáveis aos sintéticos, alterando a cor conforme o pH. Em vista disto, este trabalho apresenta o desenvolvimento de um kit analítico, composto de frascos de medicamentos, copos medidores e seringas para medicamentos, para ser utilizado nas aulas experimentais de Química no Ensino Médio.

### Resultados e discussão

Inicialmente, foi proposto a reutilização de frascos de medicamentos (xarope e soro fisiológico) como balões volumétricos para preparo de soluções utilizadas durante as titulações. Para isso, mediu-se o diâmetro de 10 frascos, seguido do cálculo da altura necessária para se obter o volume de 100 mL. De modo a estabelecer o volume real, os frascos foram preenchidos com água até atingir o menisco calculado e em seguida a água era transferida para uma proveta de 100 mL. Os volumes reais obtidos variaram de 93,0 a 100,1 mL. Para o preparo das soluções titulantes de NaOH 0,1 mol L<sup>-1</sup>, foi realizada a pesagem individual de 20 lentilhas de NaOH para obtenção da massa média (0,1617 ± 0,0143 g) e, a partir disso, fez-se o cálculo da quantidade de lentilhas necessárias para uma solução de NaOH 0,1 mol L<sup>-1</sup> (2,47 ~ 3

lentilhas de NaOH). A solução de ácido acético foi preparada transferindo 15 mL de vinagre branco comercial com uma seringa para o frasco e aferindo o menisco com água. O indicador natural utilizado foi extrato aquoso de beterraba. Uma alíquota de 10 mL desta solução foi transferida para um copo plástico transparente utilizando uma seringa, seguido da adição de 10 gotas de solução do indicador natural. O procedimento de titulação foi realizado diversas vezes de modo a avaliar a eficiência, precisão e exatidão das soluções preparadas. Na titulação do vinagre, realizada em triplicata, utilizando extrato aquoso de beterraba como indicador, o teor de ácido acético determinado no vinagre foi de 3,63%. Este valor corrobora com o indicado no rótulo do frasco de vinagre (4,0%). Além disso, na titulação utilizando todo o rigor analítico, o teor de ácido acético no vinagre foi de 3,92%, indicando que é possível realizar titulações a partir do reuso de frascos de medicamentos, copos medidos e seringas.

### Conclusões

O kit para as práticas que envolvem titulação, preparo e diluição de soluções foi desenvolvido com sucesso, apresentando simplicidade de manuseio, acessibilidade e sustentabilidade. Ainda, a ação extensionista planeja efetuar a demonstração da utilização do kit desenvolvido para professores e alunos em escolas públicas do Ensino Médio de Londrina-PR.

### Agradecimentos

Fundação Araucária, CNPq (Proc. 305764/2022-5) e CAPES pelos recursos concedidos ao Laboratório de Eletroanalítica e Sensores.

### Referências e notas

- (1) LEITE, L. R. et al. Revista Brasileira de Estudos Pedagógicos, v. 96, n. 243, p. 380–398, 2015.



Categoria: Trabalho Completo

## Conectando o conteúdo teórico com problemas reais no ensino da Química Aplicada ao Meio Ambiente

Milene G. de Almeida<sup>1</sup> (PG), Marcelo M. Cirino<sup>1\*</sup> (PQ) [milene.almeida@uel.br](mailto:milene.almeida@uel.br)

1 - Departamento de Química, Universidade Estadual de Londrina, PR – Brasil.

Palavras-Chave: Ação Mediada, Metodologia Ativa, Ensino de Química, Sustentabilidade, Tecnologia Educacional.

### Introdução

O ensino de química aplicado ao meio ambiente se destaca perante o cenário mundial devido as mudanças climáticas. Para a abordagem deste componente curricular em sala de aula, uma metodologia ativa, como o estudo de caso contribui com a prática pedagógica, pois possibilita a conexão da teoria com problemas reais e colabora no desenvolvimento de habilidades em tomada de decisões.<sup>1</sup> A aprendizagem, a partir do estudo de caso, ocorre em um processo dialógico, onde os estudantes e as ferramentas culturais interagem frequentemente e este processo é mediado por instrumentos e signos, conectando os problemas existentes aos fenômenos estudados.<sup>2</sup> Ao utilizar a abordagem mediada em conjunto com o estudo de caso no ensino de química aplicada ao meio ambiente, os conceitos científicos são integrados aos problemas da sociedade, e isto permite a aprendizagem de forma reflexiva, alinhando os conceitos científicos com a sustentabilidade.<sup>1,2</sup> O trabalho parte de um relato de experiência, visando analisar os resultados obtidos a partir da aplicação do estudo de caso em uma turma do quarto período do curso técnico em química subsequente, composta por 26 estudantes, de um colégio estadual da cidade de Londrina - PR.

### Resultados e discussão

Após a aula de sustentabilidade e agenda 2030, foi solicitado aos estudantes que elaborassem um estudo de caso abordando um problema ambiental existente na sociedade em que convive. Assim, estes foram divididos em grupos e orientados a identificar o problema, relacionando-os com os conceitos abordados na aula, e propor soluções práticas e viáveis de acordo com os 17 objetivos do desenvolvimento sustentável (ODS).<sup>3</sup> Os estudantes discutiram e apresentaram suas conclusões em um trabalho escrito. Os grupos apresentaram problemas como a poluição

atmosférica devido ao trânsito elevado, problemas de contaminação das águas devido a falta de matas ciliares, o manejo inadequado das culturas e a falta de tratamento adequado de efluentes provenientes das indústrias, a poluição do solo devido ao uso excessivo de defensivos agrícolas e propuseram soluções práticas e alinhadas a agenda 2030. Os estudantes interagiram com os problemas ambientais expressando a capacidade de estabelecer os conceitos da aula com os problemas socioculturais, como pode ser evidenciado na Figura 1.

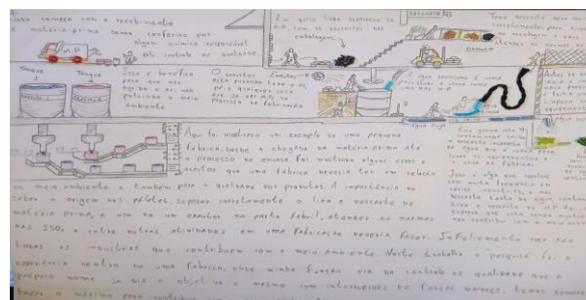


Figura 1. Estudo de caso produzido pelo grupo 5 (2024).

### Conclusões

A aplicação do estudo de caso demonstrou a aquisição do conhecimento ao integrar a teoria e a prática, contribuindo com uma base sólida na formação do estudante.

### Agradecimentos

CAPES - Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior.  
PPQMD - Programa de Pós-graduação em Química – UEL.  
Grupo de Pesquisa em Ensino de Química e Tecnologias Educacionais – UEL.

### Referências e notas

- (1) Sales, E. S.; dos Santos, F. M. T. *Redequim*. 2023, 8, 72-87.
- (2) Wertsch, J. V.; *Mind as action*. New York: Oxford University Press, 1998.
- (3) ONU. *Organização das Nações Unidas*. Objetivos de Desenvolvimento Sustentável. Disponível em: <https://brasil.un.org/pt-br/sdgs>. Acesso em 30/09/2024.



**Categoria: Trabalho Completo**

## Abordagem Multimodal no Ensino de Cinética Química: Rotações por Estações de Aprendizagem

Nathan Silva <sup>1</sup>(GD), Josiane Hernandez<sup>1</sup>(PQ)\*. Nathan.Ferreira@uel.br; Josiane.Hernandes@uel.br

Departamento de Química, Universidade Estadual de Londrina, PR - Brasil.

Palavras-Chave: Ensino de Química, Aprendizagem de Química, Multimodalidade Representacional

### Introdução

As representações são fundamentais para a explicação de teorias e modelos na química, como, por exemplo, na diferenciação entre os modelos atômicos<sup>1</sup>. A multimodalidade permite a utilização de múltiplos modos de representação, que podem envolver os cinco sentidos: tato, olfato, paladar, audição e visão. Quando o docente emprega múltiplas representações que envolvem o maior número possível de sentidos, torna a aprendizagem mais significativa. Nesse contexto, uma metodologia ativa, como Rotações por Estações de Aprendizagem, pode transitar entre essas diversas representações, permitindo que o estudante consiga entender o conteúdo e identificá-lo de diversas formas diferentes<sup>2</sup>. Este trabalho tem como objetivo avaliar o emprego de uma rotação por estação, baseada na multimodalidade representacional, no ensino de cinética química.

### Resultados e discussão

A sequência didática foi composta por quatro aulas, nas quais foram abordados os fatores que afetam a velocidade das reações por meio da rotação por estações de aprendizagem. As aulas foram divididas em quatro estações, cada uma abordando um fator específico: catalisador, concentração dos reagentes, temperatura e superfície de contato. A estação 1 baseou-se em uma atividade prática, focada na superfície de contato, na qual os alunos deveriam cronometrar o tempo de dissolução de um comprimido efervescente em pedaços comparado a um inteiro e responder questões relacionadas a essa prática. A segunda estação foi em função da concentração de reagentes, na qual, por meio de um QR code, os alunos acessavam um vídeo que mostra a montagem de um soprador manual de churrasqueira. A estação 3 foi sobre o uso de catalisadores, na qual utilizou-se gráficos de energia de ativação para a explicação do conteúdo. Por último, na estação 4, explicou-se a temperatura com auxílio de um simulador. Todas as estações tiveram perguntas para avaliar o conhecimento do aluno.

Quadro 1- Respostas representativas de cada estação

Estação	Respostas
1	“No comprimido inteiro, só uma camada tem contato com o reagente”
2	“Aumento de O <sub>2</sub> , aumenta a [ ] de reagentes”
3	“Energia necessária para que se continue a reação”
4	“O aumento da temperatura diminui tempo de reação igual no achocolatado”

Com a resposta 1, nota-se que o estudante não conseguiu associar quais dos fatores alteram a velocidade da reação apresentada. Portanto, ele não interpretou o experimento de acordo com os conceitos trabalhados em aula e sim com seu senso comum. Na rotação 2, selecionou-se a resposta de um estudante que utiliza uma simbologia para expressar sua compreensão. Os símbolos e imagens representam uma redução do abstrato, simplificando algo difícil de ser compreendido<sup>1</sup>. Na rotação 3, foi escolhida uma resposta em que o aluno não entendeu a função da energia de ativação, que pode ter ocorrido por uma dificuldade de interpretação de gráficos. Na estação 4, fica evidente que a resposta selecionada tem influência de representações externas à aula, mas presentes no cotidiano do aluno, indicando ele carrega consigo uma vivência e experiência de vida que deve ser levada em conta pelo professor.

### Conclusões

Como conclusão, é possível mencionar que os alunos possuem dificuldades em transitar entre as representações. Em razão disso, é importante que os docentes planejem as representações antes das aulas.

### Agradecimentos

A UEL e à semana da química.

### Referências e notas

- (1) Quadros, A.D.. Representação multimodal no ensino de ciências (compartilhando experiências). **2020**.
- (2) Wartha, E.J.; Rezende, D. Os. Investigações em Ensino de Ciências, **2011**,16,275.



Categoria: Trabalho Completo

## Desafios e Contribuições das Redes Sociais no Ensino de Química

Raí M. Santos (GD), \*Diana N. R. Sousa (PQ).

[rai.mendonca.santos@uel.br](mailto:rai.mendonca.santos@uel.br)

Departamento de Química, Universidade Estadual de Londrina, PR - Brasil.

Palavras-Chave: Ensino de Química, Rede Social, Análise de Conteúdo, Interação, Colaboração.

### Introdução

Atualmente, é notória a presença das redes sociais no cotidiano das pessoas. Sendo essa presença cada vez mais precoce, devido a seus atrativos visuais e à função de meio de comunicação, não se pode ignorar seu potencial frente às implicações na promoção do conhecimento.<sup>1</sup> Tais implicações no ensino já são, de certa forma, reconhecidas por documentos oficiais, que indicam a utilização de ferramentas digitais como recursos educacionais.<sup>2</sup> Tendo isso em vista, o presente trabalho tem como objetivo apresentar os resultados de uma análise das potencialidades das redes sociais como ferramenta para o ensino de Química, a partir de uma abordagem qualitativa e por meio de dados bibliográficos disponíveis na literatura. Para tanto, foi utilizada a metodologia de análise de conteúdo<sup>3</sup> para identificar o que os autores apontam sobre o uso das redes sociais no ensino de Química. No total, foram analisados seis artigos e quatro dissertações a respeito dessa temática.

### Resultados e discussão

Os resultados da análise de conteúdo indicaram que os autores consideram as redes sociais como ferramentas de grande potencial para aplicação no ensino de Química, embora reconheçam as limitações e desafios inerentes a essa utilização. Além disso, os resultados mostram que as redes sociais podem atuar como ferramentas eficazes para aumentar o engajamento, a motivação, a interação e a colaboração entre os estudantes, uma vez que suas interfaces e características permitem que os alunos interajam entre si e com ferramentas interativas, tornando o ensino e a aprendizagem mais interessantes e dinâmicos. A análise de conteúdo resultou em um total de 66 unidades de análise, as quais foram categorizadas para se obter os dados exibidos na Figura 1.



Figura 1. Dados da análise de conteúdo. O próprio autor.

Os dados da figura indicam que os autores destacam mais apontamentos positivos em seus textos a respeito da utilização das redes sociais no ensino de Química. As categorias que indicam potencialidades vão de 1 a 6 e somam, juntas, um total de 73% das unidades de análise, enquanto apenas 27% destacam aspectos que implicam em desafios para a utilização dessas plataformas no ensino de Química. Um exemplo a ser destacado entre os desafios é a formação dos professores.

### Conclusões

Ao final da investigação, foi possível concluir que as redes sociais são potencialmente mais uma ferramenta capaz de favorecer o ensino de Química, devido ao seu amplo alcance entre os estudantes e à sua característica de alta interatividade.

### Referências e notas

- (1) SANTOS, V.L.C.; SANTOS, J.E. as redes sociais digitais e sua influência na sociedade e educação contemporâneas. *HOLOS*, [s. l.], v. 6, p. 307-328, 2014.
- (2) BRASIL. Ministério da Educação. **Base Nacional Comum Curricular**. Brasília, 2018.
- (3) BARDIN, Laurence. Análise de conteúdo. Traduzido por Luís Antero Reto, Augusto Pinheiro. São Paulo: Edições 70, 2011.



**Categoria: Projeto**

## Indicador ácido-base natural e substâncias do cotidiano para o ensino de Ciências na Educação Infantil

Bruna S. Araújo<sup>1</sup> (GD), Agata V. de Sousa<sup>1</sup> (GD), Jaqueline M. G. da Silva<sup>2</sup> Ana L. S. Pacheco<sup>1</sup> (GD), Isabele S. B. Oliveira<sup>1</sup> (GD), Carla C. Perez<sup>2</sup> (PQ), Fabiele C. D. Broietti<sup>2</sup> (PQ), Roberta A. Medeiros<sup>2</sup> (PQ), Maria Luiza Zeraik<sup>2</sup> (PQ)\*, [zeraikml@uel.br](mailto:zeraikml@uel.br)

<sup>1</sup> Departamento de Farmácia, Universidade Estadual de Londrina, PR-Brasil; <sup>2</sup> Departamento de Química, Universidade Estadual de Londrina, PR-Brasil.

Palavras-Chave: *Práticas experimentais, aprendizagem científica, anos iniciais.*

### Introdução

Dentre as alternativas pedagógicas no ensino de Ciências está a experimentação, que inclui materiais, procedimentos, avaliação de resultados, e, sobretudo discussões voltadas para a aprendizagem da criança.

Estudos sugerem que naturalmente a criança apresenta um espírito científico, considerando sua curiosidade e vontade de entender o que acontece ao seu redor. Todavia, algumas pesquisas sinalizam a falta de fomento e incentivo para que este espírito perdure e se desenvolva ao longo dos anos.<sup>1</sup> Neste sentido, valorizar os questionamentos, motivar a curiosidade e considerar algumas observações parecem ser ações promissoras no fortalecimento do despertar científico na Educação Infantil. Para isso, a experimentação surge como uma alternativa pedagógica a fim de apresentar e discutir diferentes fenômenos.

### Metodologia

Este trabalho propõe a realização de experimentos de natureza investigativa, em escolas de Educação Infantil, localizadas na cidade de Londrina e região, a fim de introduzir conceitos das Ciências Naturais para as crianças. Na literatura, práticas são propostas para auxiliar professores na abordagem de conteúdo.<sup>1,2</sup> Neste sentido, este trabalho propõe uma experiência, modificada, para aplicação na Educação Infantil.

### Resultados esperados

A experiência proposta usa o extrato das folhas de repolho roxo como indicador ácido-base para a medida da acidez e basicidade de diferentes produtos e alimentos usados no dia a dia das crianças. Por meio deste experimento pretende-se possibilitar aos alunos a visualização de diferentes

cores que remetem a acidez e alcalinidade das amostras: limão, leite, vinagre, açúcar, sal, sabão em pó, detergente e bicarbonato de sódio, com a mudança de coloração para vermelho (ácido), roxo (neutro) e amarelo (base).

Embora o objetivo central seja o uso de indicador e análise de cores para interpretar a acidez de substâncias distintas, esta proposta inclui a extração do repolho roxo, oportunizando a criança o manuseio do macerador, gotejamento do indicador na amostra e interpretação de soluções coloridas. Adicionalmente, as associações sensoriais (azedo e amargo) com ácidos e bases, defendida por Arrhenius, também será abordada.

Após ser realizado o experimento com a extração do indicador das folhas do repolho roxo e gotejamento deste indicador nas amostras citadas, será realizado no mesmo dia o experimento da mensagem secreta para aplicar e reforçar o conceito de indicador.

Este experimento da mensagem secreta utiliza como indicador a cúrcuma para revelação de uma imagem feita previamente com bicarbonato de sódio. Os resultados serão avaliados por meio de entrevistas com as crianças após a execução dos experimentos.

### Considerações finais

Espera-se que as práticas aplicadas oportunizem diálogos, principalmente momentos de escuta às ideias das crianças e explicações pelos professores. Em adição, o contato com materiais laboratoriais, como conta gotas, macerador, entre outros, contribuirá para a introduzir as crianças à experimentação.

### Agradecimentos

À Universidade Estadual de Londrina (UEL), e as escolas participantes do projeto.

### Referências

(1) Cunha, M. B.; Peres,



## XXXIX Semana da Química e IX Jornada de Pós-Graduação

REFLETINDO OS PRÓXIMOS 50 ANOS: NOVOS HORIZONTES  
PARA O PROFISSIONAL DA QUÍMICA

Realização



proex

- O. M. R.;  
Stanzani,  
E. L.  
(org.).  
Manual  
com  
química.  
Jofel,  
**2014.**
- (2) Debold, B.  
S.;  
Nogueira,  
F. P.;  
Debold, F.  
R. B.  
(org.).  
Ciência  
na escola,  
**2015.**



## Ensino de Biotecnologia a partir de uma abordagem investigativa

Jefferson S. A. Hachiya \*(PQ)<sup>1</sup>; Dão Pedro C. Neto (PQ)<sup>1</sup>; Flavia Trzeciak (PQ)<sup>1</sup>; Maria Clara Pierolli (IC)<sup>1</sup>; Octávio M. Nishikawa (IC)<sup>1</sup>.

[Jefferson.hachiya@ifpr.edu.br](mailto:Jefferson.hachiya@ifpr.edu.br)

<sup>1</sup>Instituto Federal do Paraná – Londrina Paraná

Palavras-Chave: *Ensino de Ciência, Investigação, Biotecnologia.*

### Introdução

Com a implementação do Novo Ensino Médio - NEM, diversos itinerários formativos foram propostos, entre eles a Biotecnologia, porém é possível observar que a maioria das instituições de Ensino Básico desenvolvem os conceitos relacionados a esta área de conhecimento a partir da proposição de técnicas laboratoriais, onde o professor se porta como detentor do conhecimento e aos estudantes cabe apenas a replicação de tais procedimentos (Malajovich, 2016).

Tal perspectiva, não permite que os estudantes relacionem os conceitos abordados nas aulas com seu contexto social, o que de certa forma, dificulta seu entendimento sobre o tema que está sendo abordada em sala de aula.

Para contrapor este fato, surge a necessidade da proposição de tendências educacionais mais ativas, entre elas destacamos o Ensino Por Investigação. Abordagem didática na qual os estudantes são submetidos a resolução de uma situação problema com auxílio do professor, que se porta como orientador do processo de aprendizagem. Entre as vantagens educacionais proporcionada por esta didática de ensino, destaca-se o protagonismo dos estudantes, assim como seu aprimoramento científico (Demo, 2007). Diante deste contexto, o objetivo desta pesquisa foi verificar de que forma podem ser estruturadas Oficinas de Ensino de Ciências por investigação (OEnCI), com temas vinculados a Biotecnologia, voltadas para o aprimoramento da alfabetização científica dos estudantes.

### Metodologia

No desenvolvimento desta pesquisa foram analisados os planos de ensino das OEnCI propostas, tendo como objetivo verificar a relação destas ações de ensino com os preceitos de uma atividade investigativa propostos por Sasseron (2015).

Diante disso, verificamos que as OEnCI buscaram por temas da biotecnologia que pudessem ser apresentados aos estudantes a partir de uma situação problema. Tal dinâmica resultou na

seleção do tema “Cana-de-açúcar: da estrutura da planta a produção de alimento”. Tomando como base este tema, foram estruturadas três conjuntos de OEnCI: 1- A estrutura biológica da planta cana-de-açúcar; 2- A composição química da planta e 3- A Biotecnologia de transformação da cana-de-açúcar em bebida alcoólica.

Vale salientar que todas as OEnCI se iniciavam por uma situação problema, se desenvolviam a partir de uma sistematização utilizando de demonstrações investigativas, laboratório aberto e outras estratégias de ensino e, terminavam com uma contextualização que proporcionasse a participação ativa dos estudantes, tal fato vai ao encontro das ideias de Sasseron (2015).

### Resultados esperados

A partir da vivência destas OEnCI, os estudantes podem ser colocados como protagonistas de sua aprendizagem, conseguindo assim, relacionar-se com os conteúdos de Biotecnologia de forma ativa, pois estão buscando sempre responder a uma situação problema inicial. Já os professores, acredita-se desenvolvem um papel de orientadores, o que proporciona um melhor entendimento das dificuldades dos estudantes durante o processo de aprendizagem. Em outras palavras, acredita-se quem com o apoio de materiais científicos e auxílio dos professores os estudantes podem aprimorar seus conhecimentos transpondo sua visão de senso comum para uma linguagem científica.

### Considerações finais

Concluimos que OEnCI pode ser uma possibilidade para o desenvolvimento científico dos estudantes, principalmente quando esta envolve temas cotidianos da Biotecnologia.

### Agradecimentos

Ao IFPR-Londrina

### Referências e notas

- (1) SASSERON, L. H. Alfabetização científica, ensino por investigação e argumentação: relações entre ciências da natureza e escola. Ensaio Pesquisa em Educação em Ciências, 2015.
- (2) DEMO, P. Educar pela pesquisa. São Paulo: Autores Associados, 2007.



**XXXIX Semana da Química e  
IX Jornada de Pós-Graduação**  
REFLETINDO OS PRÓXIMOS 50 ANOS: NOVOS HORIZONTES  
PARA O PROFISSIONAL DA QUÍMICA

Realização



proex  
Programa de Pós-Graduação em Química

- (3) MALAJOVICH, M. A. M, Ensino de Biotecnologia, Rio de Janeiro, 2016.



Categoria: Projeto

## Recursos Educacionais Abertos (REA) como ferramenta mediadora no processo do ensino e aprendizagem de Química

Milene G. de Almeida<sup>1</sup>(PG), Marcelo M. Cirino<sup>1\*</sup> (PQ) [milene.almeida@uel.br](mailto:milene.almeida@uel.br)

1 – Departamento de Química, Universidade Estadual de Londrina, PR - Brasil.

Palavras-Chave: *Objetos Educacionais, Tecnologia Digital, Ensino de Química, Teoria da Ação Mediada.*

### Introdução

Ao considerar o ensino e a aprendizagem em Química na contemporaneidade, os Recursos Educacionais Abertos (REA), disponíveis a partir das Tecnologias Digitais da Informação e Comunicação (TDIC) representam ferramentas essenciais. Estes são auxiliares em estratégias de suporte educacional, contribuindo com a prática pedagógica e promovendo a aquisição do conhecimento.<sup>1</sup>

A utilização de REA e de Objetos de Aprendizagem (OA), abrange diferentes estilos de aprendizagem e auxilia o desenvolvimento das habilidades do estudante no percurso da sua formação.<sup>2</sup> Dentre os diferentes REA, destacamos o *software Cmap Tools* utilizado na elaboração de mapas conceituais, pois apresenta uma linguagem interativa e oportuniza a realização de tarefas que estimulam o raciocínio lógico e o pensamento crítico.

Neste âmbito, o objetivo desta pesquisa é disponibilizar conceitos de Química acessíveis por meio de REA e OA, e avaliar a apropriação, a internalização e o domínio do conhecimento a partir da elaboração de mapas conceituais envolvendo os conteúdos acessados por estudantes de Licenciatura em Química.

### Metodologia

A metodologia utilizada será qualitativa, onde serão aplicadas unidades didáticas com a indicação de REA e OA, voltados para o ensino de Química. Os dados serão coletados a partir da elaboração dos mapas conceituais, e de entrevistas realizadas com o público-alvo, o qual será composto por estudantes dos cursos de Licenciatura em Química da Universidade Estadual de Londrina - UEL e Universidade Tecnológica Federal do Paraná – UTFPR.

Os mapas conceituais e a descrição das respostas atribuídas na entrevista, serão analisados por meio da análise textual discursiva de Moraes e Galiazzi

(2016). A descrição e interpretação dos dados para a construção do metatexto será teorizada sob os preceitos da Teoria da Ação Mediada de James v. Wertsch (1998).<sup>3,4</sup> A presente pesquisa encontra-se aprovada em comitê de ética em pesquisas (CEP) sob o CAAE: 80133224.0.0000.5231.

### Resultados esperados

Com a aplicação das unidades didáticas, incluindo a utilização dos REA e OA como ferramentas digitais facilitadoras da aprendizagem, espera-se atribuir o potencial de contribuição dos recursos digitais utilizados de forma aberta na disseminação do conhecimento. Espera-se validar as unidades didáticas a partir da análise dos mapas conceituais e da entrevista aplicada, e assim, elaborar um material didático pedagógico. O material educacional elaborado, será acessibilizado aos professores de Química para utilização no ensino superior em cursos de Licenciatura em Química.

### Considerações finais

A utilização de material educacional composto por REA e OA em universidades, poderá potencializar o ensino e a aprendizagem e impulsionar a inovação. Portanto, espera-se que o acesso à conceitos disponibilizados em forma de recurso digital, contribua com a valorização da diversidade no contexto sociocultural do estudante de Química.

### Agradecimentos

CAPES - Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior.  
PPQMD - Programa de Pós-graduação em Química – UEL.  
Grupo de Pesquisa em Ensino de Química e Tecnologias Educacionais – UEL.

### Referências e notas

- (1) Balbino, F. C.; de Deus, W. S.; Barbosa, E. F. *Anais Simpósio Brasileiro de Educação em Computação*. **2023**, 3, 49.
- (2) Cardoso, C. A.; Almeida, L. L.; Dantas Neto, R. M.; Calazans, R. P. *Rev. Triângulo*. **2023**, 16, 252.
- (3) Moraes, R.; Galiazzi, M. *Análise textual discursiva*. Ijuí: Ed. Unijuí. **2016**.
- (4) Wertsch, J. V.; *Mind as action*. New York: Oxford University Press, 1998.



Categoria: Trabalho Completo.

## Influência dos Precursores de g-C<sub>3</sub>N<sub>4</sub> na Adsorção do Azul de Metileno

Daina Buelvas<sup>1\*</sup> (PQ), Alexandre Urbano<sup>2</sup> (PQ), Ricardo Vignoto<sup>3</sup> (PQ), Felipe La Porta<sup>1</sup> (PQ)

E-mail: [dainabuelvas@gmail.com](mailto:dainabuelvas@gmail.com)

1 - Departamento de Química, Universidade Tecnológica Federal do Paraná, Londrina, PR - Brasil.

2 - Departamento de Física, Universidade Estadual de Londrina, PR - Brasil.

3 - Instituto federal do Paraná - campus pitanga, PR - Brasil.

Palavras-Chave: (Nitreto de Carbono Grafítico, Ureia, Tioureia, Poluentes orgânicos)

### Introdução

O nitreto de carbono grafítico (g-C<sub>3</sub>N<sub>4</sub>) tem se destacado por suas propriedades como alta estabilidade térmica e química, e ampla aplicabilidade em adsorção e catálise. Sua síntese pode ser realizada com precursores nitrogenados, como e tioureia, que, após polimerização térmica, geram g-C<sub>3</sub>N<sub>4</sub> com diferentes características. A escolha do precursor impactam diretamente na estrutura e composição da superfície do material e suas propriedades relevantes para o processo de adsorção<sup>1</sup>. Neste estudo, foram investigadas as propriedades do g-C<sub>3</sub>N<sub>4</sub> obtido a partir desses precursores, com foco em sua capacidade de adsorção do corante azul de metileno.

### Resultados e discussão

O g-C<sub>3</sub>N<sub>4</sub> foi sintetizado através da polimerização térmica da ureia (CN-U) e tioureia (CN-T), conforme descrito em estudos anteriores realizados pelo grupo de pesquisa NanoQC<sup>2</sup>.

As propriedades estruturais foram caracterizadas por difração de raios X (DRX) e espectroscopia no infravermelho por transformada de Fourier (FTIR). As propriedades ópticas foram avaliadas por refletância difusa no UV-Vis e fotoluminescência. Além disso, foi realizado um estudo detalhado da adsorção do corante azul de metileno, avaliando a cinética, as isotermas de adsorção e as propriedades termodinâmicas do processo.

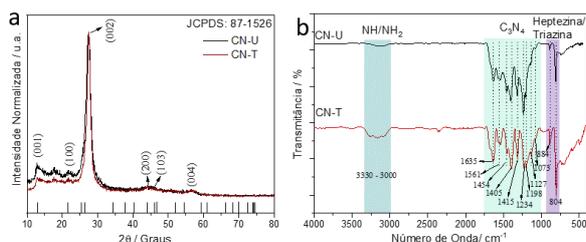


Figura 1. Análise das propriedades estruturais dos CN-U

(Linha preta) e CN-T (Linha vermelha) por DRX (a) e FTIR (b).

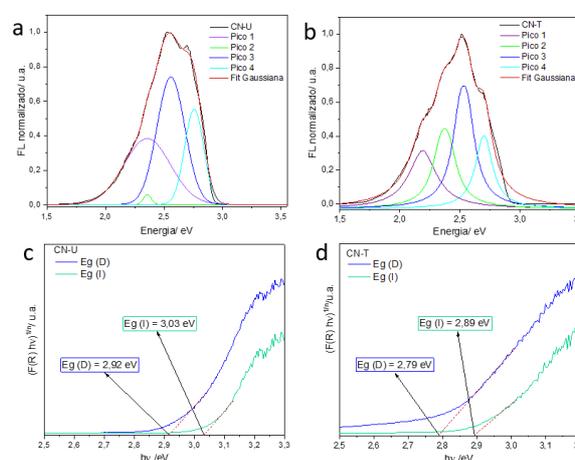


Figura 2. Espectros de fotoluminescência e refletância difusa das amostras CN-U (a e c) e CN-T (b e d).

Os resultados deste trabalho foram bem correlacionados com a literatura<sup>3</sup>.

### Conclusões

Em conclusão, a caracterização do g-C<sub>3</sub>N<sub>4</sub> obtido de tioureia e ureia revelou suas propriedades estruturais, eletrônicas e ópticas. Esses resultados são fundamentais para o desenvolvimento de adsorventes mais eficientes. Além disso, os experimentos de adsorção confirmam seu potencial para aplicações ambientais.

### Agradecimentos

Os autores agradecem ao CNPq (processo no. 172349/2023-0), ao grupo de pesquisa NanoQC (UTFPR/Londrina), e aos laboratórios ESPEC, optoeletrônica e LARX da UEL.

### Referências e notas

- (1) Suzuki, Victor Y., et al. Catalysts. 2022, 12, 692.
- (2) Amorin, Luis Henrique, et al. New Journal of Chemistry. 2019, 43, 13647-13653.
- (3) Wang, Hong, et al. Science Bulletin. 2018, 63, 117-125.



Categoria: Trabalho Completo

## Desenvolvimento de membranas porosas de celulose vegetal/PVP

Francisnara Tonholi<sup>1</sup> (PG), Paula Silva<sup>1</sup> (PG), Julia E. S. Gouveia<sup>1</sup> (PG), Sara Novak<sup>1</sup> (PQ), Gizilene Carvalho<sup>1\*</sup> (PQ) [gizilene@uel.br](mailto:gizilene@uel.br)

<sup>1</sup>Departamento de Química, Universidade Estadual de Londrina, PR - Brasil.  
Palavras-Chave: Celulose Vegetal, Membrana Porosa, Intumescimento.

### Introdução

O avanço no desenvolvimento de novos tratamentos para promover a regeneração de tecidos é uma área de extrema relevância social<sup>1</sup>. Biomateriais porosos abrangem uma gama de materiais, sejam eles naturais, sintéticos ou híbridos, todos com potencial para demonstrar funcionalidade biológica. Esta pesquisa teve como objetivo desenvolver biomateriais sustentáveis e porosos a partir de celulose vegetal (CEL) usando o método de lixiviação de sal e avaliar a capacidade de intumescimento das membranas e seus parâmetros cinéticos de sorção de água, essencial para sua aplicação biomédica.

### Resultados e discussão

Membranas porosas de CEL e CEL/PVP (50/50 %m/m) foram produzidas dissolvida em Hidróxido de Bis(etilenodiamino)cobre II (Cuen) foram produzidas adicionando CaCO<sub>3</sub> para produzir as amostras CEL/CaCO<sub>3</sub>1:4, CEL/CaCO<sub>3</sub>1:6, CEL/PVP/CaCO<sub>3</sub>1:4 e CEL/PVP/CaCO<sub>3</sub>1:6. Os dados de % de Intumescimento apresentados na Figura 1 indicam que as membranas intumescem na faixa de 60 a 80%.

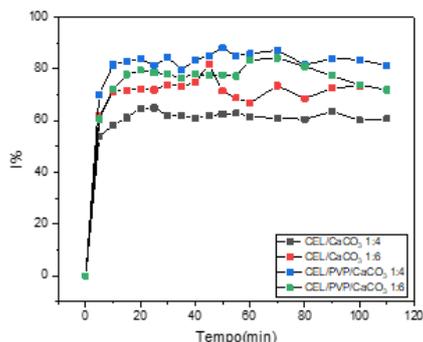


Figura 1. Índice de Intumescimento (%) das membranas

A tabela 1 apresenta os dados dos parâmetros cinéticos de sorção de água para quatro tipos de membranas de CEL com CaCO<sub>3</sub> e PVP, ajustadas a três modelos cinéticos: pseudo-primeira ordem (PFO), pseudo-segunda ordem (PSO) e Korsmeyer- Peppas (KP).

Tabela 1. Parâmetros cinéticos não lineares para as membranas obtidos pelos modelos de PFO, PSO e (KP) à 25°C.

Ordem de reação	CEL/CaCO <sub>3</sub> 1:4	CEL/CaCO <sub>3</sub> 1:6	CEL/PVP/CaCO <sub>3</sub> 1:4	CEL/PVP/CaCO <sub>3</sub> 1:6
	<b>PFO</b>			
k <sub>1</sub>	0,39 ± 0,03	0,39±0,03	0,36 ± 0,02	0,27 ± 0,02
q <sub>e</sub>	61,93 ± 0,46	72,33 ± 0,55	83,74 ± 0,58	79,26 ± 0,73
q <sub>e exp.</sub>	65,32	74,25	86,20	83,87
R <sup>2</sup>	0,99	0,99	0,99	0,98
RMSE	1,56	1,60	2,12	2,74
<b>PSO</b>				
k <sub>2</sub>	-5,76x10 <sup>-44</sup> ± 8,60x10 <sup>44</sup>	-9,13x10 <sup>42</sup> ± 1,10x10 <sup>45</sup>	6,57x10 <sup>44</sup> ± 7,46x10 <sup>44</sup>	-2,86x10 <sup>44</sup> ± 6,42x10 <sup>44</sup>
q <sub>e</sub>	61,16±0,96	71,13±1,16	82,50±2,42	77,27±,68
R <sup>2</sup>	0,97	0,97	0,96	0,93
RMSE	2,62	3,60	3,99	5,18
<b>KP</b>				
k	0,78±0,04	0,69±0,04	0,78±0,06	0,69±0,03
n	0,02±0,01	0,03±0,02	0,02±0,02	0,09±0,02
R <sup>2</sup>	0,98	0,97	0,96	0,97
RMSE	0,05	0,04	0,03	0,04

A análise cinética apontou que o modelo de PFO é o mais adequado (Tabela 1). O mecanismo de absorção de água segue um padrão anômalo, influenciado pela estrutura e composição das membranas.

### Conclusões

A presença de PVP favoreceu o processo de sorção, com as membranas apresentando intumescimento na faixa de 60 a 80%. A análise cinética se ajustou ao modelo de PFO. O comportamento anômalo, indica que a sorção não ocorre de forma linear ou uniforme, sendo influenciada pela estrutura do material e porosidade, não seguindo um único mecanismo de difusão.

### Agradecimentos

Ao CNPq, CAPES e Fundação Araucária pelo suporte financeiro.

### Referências

- (1) TANPICHAJ, S. *et al. Carbohydrate Polymers*, v. 286, 119192, 2022.



Categoria: Trabalho Completo

## Influência do solvente hidróxido de bis(etilenodiamina)cobre (II) nas propriedades físicas e químicas da celulose

Francisnara Tonholi<sup>1</sup> (PG), Julia E. S. Gouveia<sup>1</sup> (PG), Paula Silva<sup>1</sup> (PG), Gizilene Maria de Carvalho<sup>1\*</sup> (PQ). \*gizilene@uel.br

<sup>1</sup> Departamento de Química, Universidade Estadual de Londrina, PR - Brasil.

Palavras-Chave: Solventes, Membranas, Polissacarídeos, Cristalinidade, Viscosimetria.

### Introdução

A solubilidade da celulose vegetal depende de vários fatores, incluindo a estrutura química, o grau de cristalinidade, tamanho das fibrilas, a pureza e o solvente utilizado<sup>1</sup>. Sendo conhecida por ser insolúvel em água e em solventes orgânicos apolares convencionais por possuir uma estrutura anfifílica. A dissolução da celulose envolve a quebra das ligações de hidrogênio nas regiões cristalinas e depende das interações de hidrogênio e hidrofóbicas<sup>2</sup>. Esta pesquisa teve como objetivo avaliar os efeitos do solvente hidróxido de bis(etilenodiamina)cobre (II) (CUEN) na estrutura física, cristalinidade, grau de polimerização e massa molar viscosimétrica da celulose vegetal proveniente de diferentes fontes, durante diferentes tempos.

### Resultados e discussão

A caracterização das amostras de materiais de partida da celulose é fundamental para compreender sua estrutura molecular e seu comportamento. A Tabela 1 apresenta os valores do grau de polimerização (GP) e da massa molar viscosimétrica (M<sub>v</sub>) para amostras de celulose (CEL) branqueada (B), microcristalina (MCC) e papel filtro (PF).

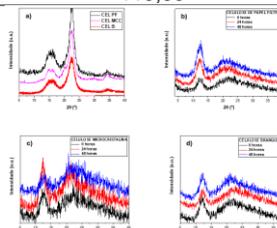
**Tabela 1.** Massa molar viscosimétrica e grau de polimerização dos materiais de partida.

Amostra	GP	M <sub>v</sub> – g/mol
CEL B	662,6	107346,1
CEL MCC	135,2	21906,6
CEL PF	605,2	98040,8

O GP influencia a solubilidade e cristalinidade da celulose e, após o tratamento com o solvente, diminuiu em todas as amostras, facilitando a dissolução. Observou-se que a massa molar teve variação das amostras após dissolução no solvente CUEN nos períodos estudados (Tabela 2), resultando em uma degradação logo nas primeiras horas de exposição.

**Tabela 2.** Grau de polimerização (GP) massa molar viscosimétrica (M<sub>v</sub>) das amostras de celulose em diferentes tempos de envelhecimento em CUEN.

Celulose branqueada		
Tempo (horas)	GP	M <sub>v</sub> – g/mol
0	121,60	19699,2
24	81,66	13228,92
48	154,12	24967,44
Celulose microcristalina		
Tempo (horas)	GP	M <sub>v</sub> – g/mol
0	10,61	1718,82
24	7,72	1250,64
48	10,62	1720,44
Celulose de papel filtro		
Tempo (horas)	GP	M <sub>v</sub> – g/mol
0	319,15	51702,30
24	154,12	24967,44
48	115,83	18775,56



**Figura 1.** Difratograma dos a) materiais de partida da celulose de PF, MCC, B e; b,c,d) os tempos de envelhecimento, após a dissolução em CUEN.

Os difratogramas de raios-X (Figura 1) mostram o padrão de difração ao alomorfo de celulose tipo I. Após ser dissolvida em diferentes tempos a celulose do tipo I foi convertida em celulose tipo II.

### Conclusões

O solvente CUEN afeta significativamente a estrutura e as propriedades da celulose. A degradação das cadeias poliméricas e as alterações na cristalinidade variaram conforme o tipo de celulose e o tempo de envelhecimento, convertendo a celulose tipo I para celulose tipo II.

### Agradecimentos

Ao CNPq, CAPES e Fundação Araucária pelo suporte financeiro e aos Laboratórios LARX E LQP pelas análises realizadas.

### Referências

- (1) Acharya, S.; Liyanage, S.; Parajuli, P.; Rumi, S. S.; Shamshina, J. L.; Abidi, N. *Polymers*. **2021**, *13*, 4344.
- (2) Lindman, B.; Karlstrom, G.; Sigsson, L. *Journal of Molecular Liquids*, **2010**, *156*, 76-81.



Categoria: Trabalho Completo

## Efeito do tautomerismo nas propriedades eletrônicas do Yariv

Rafael G. de Pádua<sup>1</sup> (PG), João P. A. de Jesus<sup>\*2</sup> (PG), Ana C. S. Camargo<sup>3</sup> (IC), Sidney A. Lourenço<sup>1</sup> (PQ), Felipe A. La Porta<sup>1,2</sup> (PQ), Renato M. R. Viana<sup>1</sup> (PQ), Marco A. T. da Silva<sup>1</sup> (PQ).

<sup>1</sup> Departamento de Engenharia de Materiais, Universidade Tecnológica Federal do Paraná, PR – Brasil.

<sup>2</sup> Departamento de Química, Universidade Estadual de Londrina, PR – Brasil.

<sup>3</sup> Departamento de Engenharia de Produção, Universidade Tecnológica Federal do Paraná, PR – Brasil.

\*joao.paulo.almirao@uel.br

Palavras-Chave: Tautomerismo, Yariv, Corante, Fotovoltaico, Teoria do funcional da densidade, Estrutura eletrônica.

### Introdução

O reagente  $\beta$ -galactosil Yariv (1,3,5-tri(p-glicosiloxifenilazo)-2,4,6-trihidroxibenzeno) é um corante artificial fenólico glicosilado com a característica de se ligar fortemente com polissacarídeos do tipo AG-I e AG-II e proteínas AGPs.<sup>1</sup> Sua estrutura com vários grupos azo dá ao Yariv uma possível aplicabilidade como camada ativa em células fotovoltaicas.<sup>2</sup> Dessa forma, o presente trabalho tem como foco o efeito do tautomerismo entre as formas enol e ceto na estrutura eletrônica e suas propriedades úteis do ponto de vista tecnológico, a partir de uma abordagem por teoria do funcional da densidade.

### Resultados e discussão

Como visto nas Figuras 1 e 2, a estrutura enol apresenta maior energia para o HOMO e menor para o LUMO, havendo uma diferença de 0,47 eV entre os band gaps enol-ceto. Essa diferença de energia entre os orbitais é responsável pela maior estabilidade da forma ceto. De maneira similar, a energia de ligação do éxciton e de excitação do singleto são menores na forma ceto.

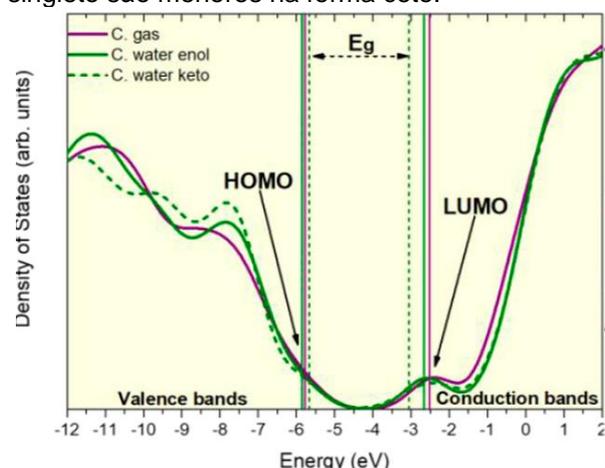


Figura 1. Espectro de densidade de estados do Yariv em forma enol e ceto em gás e água.

Na forma enol, o HOMO é composto por orbitais  $p$  do C (67%), O (10%) e N (10%), enquanto o LUMO por N (59%) e C (30%). Na forma ceto, há desvios nas contribuições atômicas, sendo o HOMO composto por orbitais  $p$  C (62%), N (15%) e O (13%) e o HOMO por N (52%), C (29%) e O (7%). Assim, como visto no formato dos orbitais, as contribuições de orbitais  $p$  é principalmente proveniente dos heteroátomos do anel central.

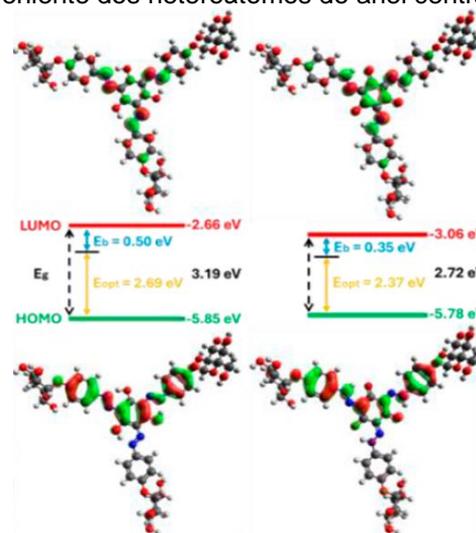


Figura 2. Alinhamento de bandas e forma dos orbitais HOMO e LUMO entre formas enol e ceto do Yariv.

### Conclusões

No geral, o tautomerismo promove maior estabilidade da estrutura ceto do Yariv, expresso pela diferença de energia entre os orbitais.

### Agradecimentos

As agências CAPES, CNPq, INEO, Fundação Araucária, e ao LAMAP e LABMulti UTFPR.

### Referências e notas

- (1) Paulsen B. S. et al. *Carbohydr. Polym.* **106**, 460.
- (2) Derkowska-Zielinska et al. *Sol. Ener.* **203**, 19.



Categoria: Trabalho Completo

## Efeito do metabolismo de fármacos no tratamento de SARS-CoV-2 a partir de uma perspectiva inteiramente computacional

João P. A. de Jesus<sup>1</sup> (PG), Letícia C. Assis<sup>2</sup> (PQ), Alexandre A. de Castro<sup>2</sup> (PQ), Elaine F. F. da Cunha<sup>2</sup> (PQ), Eugenie Nepovimova<sup>3</sup> (PQ), Kamil Kuca<sup>3</sup> (PQ), Teodorico C. Ramalho<sup>2,3</sup> (PQ), Felipe A. La Porta<sup>\*1,4</sup> (PQ)

<sup>1</sup>Departamento de Química, Universidade Estadual de Londrina, PR – Brasil.

<sup>2</sup>Departamento de Química, Universidade Federal de Lavras, MG – Brasil.

<sup>3</sup>Departamento de Química, Universidade de Hradec Králové, Hradec Králové – República Tcheca.

<sup>4</sup>Laboratório de Nanotecnologia e Química Computacional, Universidade Tecnológica Federal do Paraná, PR – Brasil.

\*felipelaporta@utfpr.edu.br

Palavras-Chave: Metabolismo, Fármacos, COVID-19, SARS-CoV-2, Docking molecular, Teoria do funcional da densidade.

### Introdução

Este trabalho apresenta uma nova metodologia computacional capaz de prever o metabolismo de fármacos por meio de uma combinação de cálculos de DFT, dinâmica e *docking* molecular e ADMET, dessa forma reduzindo os efeitos colaterais de novos medicamentos e agilizando os seus desenvolvimentos. Neste estão presentes alguns dos resultados obtidos para a nitazoxanida entre uma série de fármacos investigados em pesquisas clínicas durante a pandemia do coronavírus. Todos os resultados são encontrados na versão publicada deste trabalho.<sup>1</sup>

### Resultados e discussão

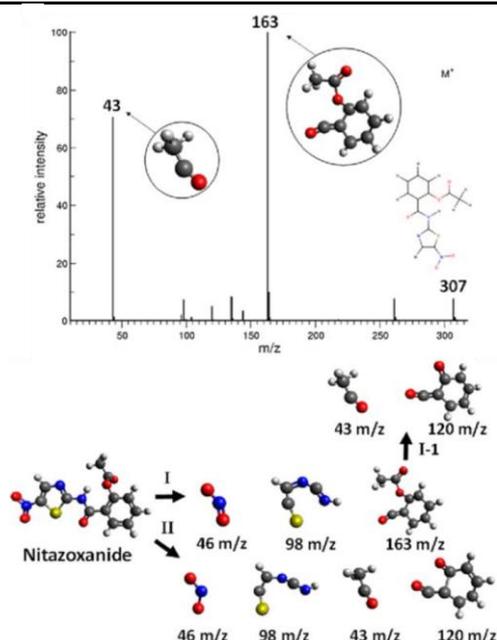


Figura 1. Espectro simulado de fragmentação por espectrometria de massas da nitazoxanida e respectivas trajetórias.

A Figura 1 contém o espectro de massas teórico da nitazoxanida e duas trajetórias de fragmentação, resultando em espécies que podem influenciar no metabolismo do fármaco. Assim, a Tabela 1 organiza a energia de interação entre o fármaco e cada fragmento com a enzima M<sup>pro</sup> do SARS-CoV-2 e as presentes interações.

Tabela 1. Energia de interação da nitazoxanida e seus metabolitos com o alvo M<sup>pro</sup> e principais interações.

Frag. (m/z)	Energia M <sup>pro</sup> (kcal/mol)	Interações M <sup>pro</sup>
308	-5,6	GLN189 HIS164
163	-4,3	GLU166
120	-4,0	GLU166 HIS41
98	-2,8	ARG188
46	-2,0	-
43	-1,8	HIS41

### Conclusões

Entre os fármacos abordados, a nitazoxanida promoveu o complexo mais estável com a enzima M<sup>pro</sup>. Embora tenha interações mais fracas, os fragmentos 163 e 120 m/z apresentam interações significativas. Essa nova metodologia pode levar ao desenvolvimento de medicamentos mais eficientes e seguros no futuro.

### Agradecimentos

Agradecimentos as agências CNPq, CAPES, FAPEMIG e as universidades UEL e UTFPR.

### Referências e notas

(1) de Jesus, J. P. A. et al. *Sci. Rep.* 2021, 11, 19998.



Categoria: Trabalho Completo

## Produção de carvão ativado a partir da polpa de caju e sua modificação com vanadato de bismuto.

João V. P. de Carvalho<sup>1,\*</sup>(IC), Justem C. Có<sup>1</sup> (PG), Luan P. Camargo<sup>1</sup> (PG), Odair P. Ferreira<sup>1</sup> (PQ), Luiz H. Dall'Antonia<sup>1</sup> (PQ)

[Joao.victor.carvalho@uel.br](mailto:Joao.victor.carvalho@uel.br), [luizh@uel.br](mailto:luizh@uel.br).

Departamento de Química, Universidade Estadual de Londrina, PR - Brasil.

Palavras-Chave: Carvão ativado, Pedúnculo de caju, Carbonização, Semicondutor, Vanadato de bismuto.

### Introdução

O crescente agravamento do cenário ambiental e suas consequências à vida instigam o desenvolvimento de materiais que beneficiem o meio ambiente. Um exemplo é o carvão ativado, produzido a partir de resíduos de biomassa e capaz de reter poluentes a partir de sua alta porosidade e área superficial, que, combinado com a modificação com um material semicondutor como o  $\text{BiVO}_4$ , pode atuar na degradação destes poluentes por meio de fotocatalise.<sup>1,2</sup>

### Resultados e discussão

A biomassa de partida (pedúnculo de caju) foi carbonizada em um forno tipo Mufla. Sua ativação química foi realizada com hidróxido de potássio em uma proporção de 4:1 com a biomassa carbonizada, em um forno tubular tipo Mufla com atmosfera inerte de argônio. O material obtido foi lavado e seco, com sua modificação com  $\text{BiVO}_4$  sendo feita por processo hidrotérmico em reator. Foram realizadas caracterizações para o produto final obtido pela Difração de Raios-X (DRX) para determinar a estrutura cristalina, e Espectroscopia no infravermelho com transformada de Fourier (FTIR) para identificação de grupos funcionais. Pela análise dos resultados de DRX, o material produzido apresentou-se em uma estrutura amorfa sem domínios cristalinos, como esperado para um material carbonáceo.

A partir dos espectros de FTIR, Figura 1, com a análise das bandas de estiramento, foi possível observar a perda gradativa de grupos funcionais C-OH e C-H após a etapa de carbonização da biomassa.

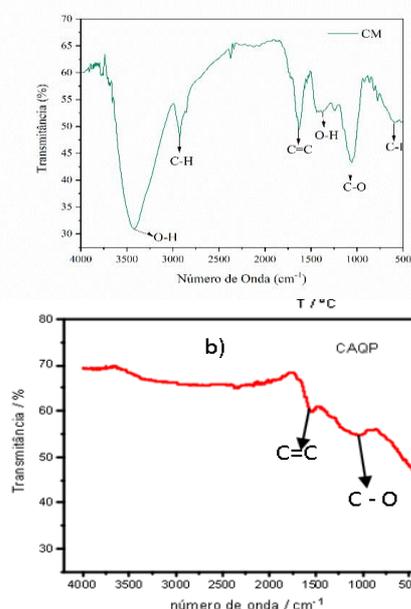


Figura 1. Espectro de FTIR para amostra *in natura* e ao final do processo de ativação.

### Conclusões

A polpa de caju mostrou-se ser uma matéria-prima promissora para a produção do carvão ativado, caracterizada como uma alternativa eficiente e com vantagens socioeconômicas e ambientais.

### Agradecimentos

À Fundação Araucária pela bolsa concedida e ao Laboratório de Eletroquímica e Materiais (LEMA) pelo apoio.

### Referências e notas

- (1) Keppetipola, N.M. et. al. RSC Adv., **2021**, 11, 2854.
- (2) Bergna, D., et al. Waste Biomass Valor, **2020**, 11, 2837.



Categoria: Trabalho Completo

## Efeitos da dissolução em ácido trifluoroacético nas características da celulose

Julia E. S. Gouveia<sup>1</sup> (PG), Franciscara Tonholi<sup>1</sup> (PG), Gizilene Maria de Carvalho<sup>1</sup> (PQ). [gizilene@uel.br](mailto:gizilene@uel.br)

<sup>1</sup> Departamento de Química, Universidade Estadual de Londrina, PR - Brasil.

Palavras-Chave: Solventes, Membranas, Polissacarídeos, Cristalinidade, Viscosimetria.

### Introdução

A celulose apresenta estrutura anfífila, o que a torna insolúvel em água e em solventes orgânicos apolares comuns. Conseqüentemente, os possíveis solventes para esse biopolímero são limitados. Uma das possibilidades é a utilização de solventes ácidos ou básicos, em que a celulose adquire cargas por protonação ou desprotonação e a dissociação dos contra-íons contribui para entropia translacional de mistura. Todavia, a dissolução em valores extremos de pH acompanha efeitos colaterais na estrutura do polímero. Esta pesquisa teve como objetivo avaliar os efeitos do solvente ácido trifluoroacético (TFA) na estrutura física, cristalinidade e massa molar viscosimétrica da celulose vegetal obtida de diferentes fontes, durante diferentes tempos.

### Resultados e discussão

A massa molar viscosimétrica das amostras – celulose branqueada, celulose microcristalina e papel filtro moído – foi determinada antes e após a dissolução em TFA (Tabela 1).

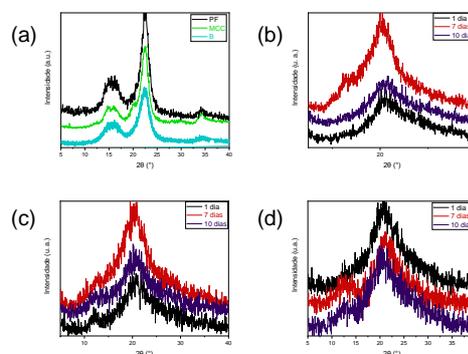
**Tabela 1.** Massa molar viscosimétrica das amostras antes e após a dissolução em TFA.

Amostra	Tempo	M <sub>v</sub> (g/mol)
B	Inicial	107346,1
	1 dia	17669,9
	7 dias	17669,9
	10 dias	17669,9
MCC	Inicial	21906,6
	1 dia	5642,5
	7 dias	5642,5
	10 dias	5642,5
PF	Inicial	98040,8
	1 dia	15081,5
	7 dias	15081,5
	10 dias	15081,5

A dissolução da celulose em meios ácidos é acompanhada pela quebra das ligações glicosídicas do biopolímero. Observou-se que a massa molar das amostras permaneceu constante nos tempos de armazenamento estudados – 1 dia,

7 dias e 10 dias – evidenciando que a degradação ocorreu dentro do período de 1 dia.

A cristalinidade das amostras de celulose antes e após a dissolução foi avaliada nos referidos tempos de armazenamento (Gráfico 1).



**Gráfico 1.** Difratomogramas: (a) Materiais de partida; (b) PF; (c) MCC; (d) B.

O padrão de difração dos materiais de partida correspondem ao alomorfo de celulose tipo I. Para todas as amostras e em todos os tempos de armazenamento, a celulose I foi convertida em celulose amorfa. Os espectros no infravermelho dos materiais de partida e das amostras de celulose, após dissolução e lavagem dos filmes em água destilada, indicam a completa regeneração da celulose.

### Conclusões

A dissolução das amostras de celulose vegetal em TFA causou a diminuição das cadeias pela quebra das ligações glicosídicas. A celulose tipo I foi convertida em celulose amorfa. A partir da lavagem dos filmes com água destilada, obteve-se a completa regeneração da celulose.

### Agradecimentos

À CAPES, ao CNPq e à Fundação Araucária pelo suporte financeiro; Ao LARX e ao LQP pelas análises realizadas.

### Referências e notas

(1) Medronho, B.; Lindman, B. *Advances in Colloid and Interface Science*. 2015, 222, 502.



Categoria: Trabalho Completo

## Produção e caracterização de blendas de poli(ácido láctico)/Triacetato de celulose

Letícia Cristina Bacon<sup>1</sup> (PG), Gizilene M. Carvalho\*<sup>1</sup> (PQ)  
[gizilene@uel.br](mailto:gizilene@uel.br)

<sup>1</sup>Departamento de Química, Universidade Estadual de Londrina, PR - Brasil.

Palavras-Chave: Modificação química, blendas, biocompatibilidade.

### Introdução

O poliácido láctico (PLA) é um polímero biodegradável promissor para diversas aplicações, pois apresenta elevada biocompatibilidade e bioabsorção, além de possuir boas propriedades mecânicas, como rigidez e resistência. Todavia, a alta fragilidade e a baixa resistência térmica limitam seu uso<sup>1</sup>. O acetato de celulose (AC) possui diversas vantagens que aumentam sua aplicabilidade e interesse comercial, como sua abundância, biocompatibilidade, transparência, atoxicidade, elevada resistência mecânica, alta estabilidade térmica e resistência ao impacto<sup>2</sup>. Com isso, o objetivo do trabalho foi a produção do triacetato de celulose (TAC) visando a formulação de blendas poliméricas com o PLA para aplicação biomédica.

### Resultados e discussão

Foi realizada a acetilação homogênea da celulose segundo Cerqueira et. al. (2010). Foram produzidos filmes de PLA e TAC puros e de blendas, em clorofórmio, nas proporções PLA/TAC (% m/m) 95/5, 85/15, 70/30, 60/40 com PEG 3500 (30%) como agente compatibilizante, utilizando o método de *Casting*. A celulose acetilada apresentou GS de  $2,88 \pm 0,07$ , caracterizando o material como TAC. Pelas análises de Espectroscopia no Infravermelho por Transformada de Fourier de Refletância Total Atenuada (FTIR-ATR), na Figura 1, observou-se a diminuição da intensidade da banda  $3350 \text{ cm}^{-1}$ , devido a substituição dos grupos hidroxila pelos grupos acetila na cadeia celulósica, assim como o aparecimento de uma banda intensa em  $1740 \text{ cm}^{-1}$ , característica do estiramento de grupos carbonila de ésteres (C=O), que confirmam a acetilação do material.<sup>1</sup> As análises de ângulo de contato dos filmes, na Figura 2, indicam que o aumento da quantidade de TAC nas blendas proporcionou uma maior hidrofiliabilidade para os filmes, fator significativo para aplicações que envolvem adesão como em aplicações biomédicas, implantes e revestimentos<sup>3</sup>.

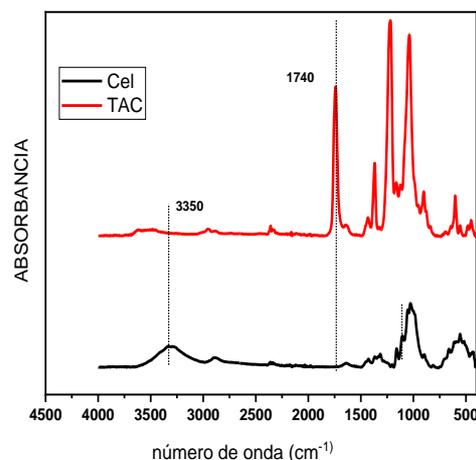


Figura 1. Espectros de FTIR-ATR da celulose e TAC. Fonte: Autores, 2024.

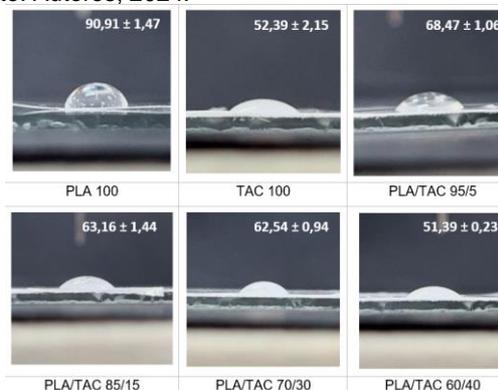


Figura 2. Ensaio de ângulo de contato das membranas em água destilada à 25°C. Fonte: Autores, 2024.

### Conclusões

A modificação química da celulose foi eficaz e a adição do TAC ao PLA proporcionou blendas com características mais hidrofílicas.

### Agradecimentos

A CNPQ; CAPES, Fundação Araucária pelo fomento da pesquisa e ao Laboratório de Química e Prebiótica (LQP) da UEL.

### Referências

- (1) Cerqueira, D. et al. *Polymers*, **2010**, 2, 85-91.
- (2) Icard, L.P. et al. *Journal of the Brazilian Chemical Society*, v. 29, p. 99-108, **2018**.
- (3) Chen, H. et al. *Journal of Polymer Research*, v.18 n.3 **2009**.



Categoria: Trabalho Completo

## Heteroestrutura de trióxido de tungstênio e vanadato de ferro: fortalecimento sinérgico para aplicações fotoeletroquímicas

Luan P. Camargo (PG)<sup>1</sup>, Marcelo R. S. Pelissari (PQ)<sup>2</sup>, Paulo R. C. da Silva (TC)<sup>3</sup>, Luiz H. Dall'Antonia (PQ)<sup>1,\*</sup> (luizh@uel.br)

1 – Departamento de Química, Universidade Estadual de Londrina, Londrina, PR – Brasil.

2 – Colégio de Engenharia, Universidade Estadual Paulista, Bauru, SP – Brasil.

3 – Departamento de Física, Universidade Estadual de Londrina, Londrina, PR – Brasil.

Palavras-Chave: Heteroestruturas, Nanotecnologia, Oxidação de água, Óxidos, Semicondutores.

### Introdução

A pesquisa e o desenvolvimento de novos materiais com propriedades catalíticas são essenciais devido ao crescente desenvolvimento industrial, à crise energética e aos problemas ambientais. Semicondutores como o vanadato de ferro ( $\text{FeVO}_4$  e  $\text{Fe}_2\text{V}_4\text{O}_{13}$ , indicados a partir de agora como FeVO) possuem várias aplicações em catálise, armazenamento de energia, remediação ambiental e detecção.<sup>1,2</sup> Sua demanda é impulsionada por sua baixa energia de band-gap, excepcional estabilidade química e térmica, toxicidade mínima e abundância dos elementos na crosta terrestre. Além disso, o trióxido de tungstênio ( $\text{WO}_3$ ) é tipicamente utilizado em optoeletrônica, como sensores de luz e gás, fotoânodos, dispositivos eletrocromáticos e células de combustível, devido à sua estreita energia de band-gap, alta transmissão, mudança de cor reversível sob polarização e elevada condutividade iônica em altas temperaturas.<sup>3,4</sup> No entanto, as interfaces entre camadas de diferentes semicondutores podem minimizar ou até prevenir processos de recombinação eletrônica por meio da transferência eletrônica de portadores de carga fotogerados ( $e^-_{\text{BC}}/h^+_{\text{BV}}$ ). Cálculos teóricos indicaram um alinhamento favorável das bandas de valência e condução entre os semicondutores, sugerindo um potencial significativo para aprimorar o desempenho dos fotoânodos em reações fotoeletroquímicas, como a dissociação da molécula de água para a geração de energia limpa.

### Resultados e discussão

O  $\text{WO}_3$  foi obtido utilizando um método sol-gel típico, e as camadas de FeVO foram obtidas pelo processo SILAR em substratos de vidro condutor (ITO). Inicialmente, semicondutores individualmente construídos foram avaliados (de 1 a 5 camadas). Após identificar as melhores

respostas fotoeletroquímicas para cada semicondutor, esses eletrodos foram utilizados como substratos para a deposição do material oposto, obtendo-se heteroestruturas. A caracterização dos filmes (DRX, MEV, FTIR, XPS e RAMAN) confirmou a formação das fases desejadas, e a caracterização fotoeletroquímica revelou propriedades notáveis para o novo material heteroestruturado, como alta densidade de corrente sob luz visível (aumento de 0,02 para 0,69  $\text{mA cm}^{-2}$  a +1.23V vs. RHE) e menor resistência à transferência de carga (diminuição de 87 para 0,5  $\text{k}\Omega$ ) para as heteroestruturas. Em seguida, os eletrodos individuais e heteroestruturados foram utilizados para a reação de oxidação da água. Observou-se um aumento de 4 vezes na quantidade de oxigênio produzido ao longo de 45 min de reação (cronoamperometria a +1.23V vs. RHE). Esse resultado pode ser associado a melhora na transferência eletrônica proporcionada pelo alinhamento favorável das bandas de valência e condução (confirmado por XPS), que minimizam o processo de recombinação dos portadores  $e^-_{\text{BC}}/h^+_{\text{BV}}$  para os fotoânodos heteroestruturados.

### Conclusões

Este trabalho destaca o potencial das novas heteroestruturas formadas por FeVO e  $\text{WO}_3$  em aplicações fotoeletroquímicas, abrindo caminho para o uso desse material em tecnologias inovadoras com desempenho e funcionalidade aprimorados, especialmente na geração de energia limpa.

### Referências e notas

- (1) M. Javad Javid-Naderi, et al., *Inorg. Chem. Commun.* **2023**, 157, 111423.
- (2) H. Mandal, et al., *RSC Adv.* **2016**, 6, 4992–4999.
- (3) Y. Yao, et al., *Nanomaterials* **2021**, 11, 2136.
- (4) C. Santato, et al., *J. Am. Chem. Soc.*, **2001**, 123, 10639–10649.



Categoria: Trabalho Completo

## Esquema-Z utilizando $\text{BiVO}_4/\text{Cu}_2\text{O}$ e $\text{BiVO}_4/\text{Cu}_2\text{O}/\text{NiO}$ para reação de evolução de hidrogênio

Maurício Rocha e Silva Carias de Oliveira<sup>1</sup> (PG), Roberta Antigo Medeiros<sup>1</sup> (PQ), Alexandre Urbano<sup>2</sup> (PQ), Roberto de Matos<sup>1</sup> (PQ)\* rmatos@uel.br

1 - Departamento de Química, Universidade Estadual de Londrina, PR - Brasil.

2 - Departamento de Física, Universidade Estadual de Londrina, PR - Brasil.

Palavras-Chave: Fotoeletrocatalise, Síntese hidrotermal, Óxido de cobre, Drop casting.

### Introdução

O vanadato de bismuto ( $\text{BiVO}_4$ ) é um semicondutor tipo n com uma energia de *gap* em torno de 2,4 eV, possibilitando seu uso como fotocatalisador na região do visível. Possui as fronteiras das BC e BV entre 0 e 2,4 V vs. ERH respectivamente, o que favorece a oxidação da água. Entretanto, o  $\text{BiVO}_4$  possui baixa mobilidade dos portadores de carga e elevada taxa de recombinação. Para contornar estes problemas, tem sido empregado heterojunções. Um dos possíveis materiais para este fim é o óxido cuproso ( $\text{Cu}_2\text{O}$ ), cuja banda de condução é ligeiramente mais negativa que o par redox  $\text{H}_2/\text{H}^+$  (0 V vs. ERH), além de possuir uma energia de *gap* entre 2,0 e 2,2 eV. Óxido de níquel, apesar de possuir uma ampla energia de *gap* (entre 3,5 e 4,0 eV), possui uma excelente entalpia de dessorção de hidrogênio, comparável à de metais nobres, como paládio ou platina. Neste trabalho, propõe-se uma heterojunção tripla entre o  $\text{BiVO}_4/\text{Cu}_2\text{O}/\text{NiO}$ , além do esquema-Z entre o  $\text{BiVO}_4/\text{Cu}_2\text{O}$ , visando a evolução de hidrogênio por fotoeletrocatalise via *water splitting*.

### Resultados e discussão

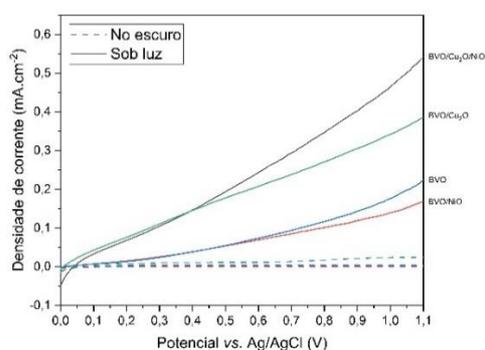


Figura 1. Densidades de corrente dos filmes de  $\text{BiVO}_4$ ,  $\text{BiVO}_4/\text{Cu}_2\text{O}$  e  $\text{BiVO}_4/\text{Cu}_2\text{O}/\text{NiO}$ .

Foram produzidos filmes de  $\text{BiVO}_4$  sobre FTO pela rota hidrotérmica utilizando uma autoclave a 150°C/1h, seguido de tratamento térmico a 500°C/2h. Sobre o  $\text{BiVO}_4$  foram depositados por *drop casting*  $\text{NiO}$ ,  $\text{Cu}_2\text{O}$  e a mistura de ambos a partir de suspensões aquosas com Nafion 0,1% em massa. Os filmes foram caracterizados eletroquimicamente por voltametria de varredura linear na janela de 0,0 a 1,1 V vs. Ag/AgCl, em sulfato de sódio. Houve variação na fotocorrente entre os filmes de  $\text{BiVO}_4$  sem aditivos, que pode ser atribuída à não uniformidade de recobrimento. No entanto, o filme contendo os três óxidos apresentou a maior densidade de fotocorrente, sugerindo uma maior eficiência na reação de evolução de oxigênio em potenciais mais elevados.

### Conclusões

Foi verificado que a heterojunção  $\text{BiVO}_4/\text{Cu}_2\text{O}/\text{NiO}$  forneceu os melhores resultados, comparado às outras amostras, sugerindo investigações futuras visando otimizar a reação de evolução de  $\text{H}_2$ .

### Agradecimentos

À CAPES pela bolsa concedida, ao Programa de Pós-Graduação em Química da UEL e ao laboratório LARX.

### Referências e notas

- (1) Kalanur, S. S.; Lee, Y. J.; Seo, H. *Applied Surface Science*, **2021**, 562, 150078.
- (2) Basnet, P.; Zhao, Y. *Catalysis Science & Technology*, **2016**, 6, 2228.
- (3) Wang, P. et al. *Applied Surface Science*, **2022**, 606, 154940.



Categoria: Trabalho Completo

## Heterojunção BiVO<sub>4</sub>/NiO produzida por RF magnetron *sputtering* para uso na reação de evolução de hidrogênio

Maurício Rocha e Silva Carias de Oliveira<sup>1</sup> (PG), Alexandre Urbano<sup>2</sup> (PQ), Roberto de Matos<sup>1</sup> (PQ)\*  
rmatos@uel.br

1 - Departamento de Química, Universidade Estadual de Londrina, PR - Brasil.

2 - Departamento de Física, Universidade Estadual de Londrina, PR - Brasil.

Palavras-Chave: Fotoeletrocatalise, Sputtering, Water splitting, Hidrogênio.

### Introdução

A produção sustentável de hidrogênio está sendo amplamente estudada, levando em conta a demanda global de combustíveis. Uma vez que o gás hidrogênio é um combustível que pode ser obtido com zero emissão de carbono, e possui elevada densidade energética, é benéfico seu uso como fonte de energia alternativa e limpa. Uma rota sintética descrita na literatura, notória por seu baixo custo financeiro e energético é a quebra catalítica da água por meio da fotoeletrocatalise. Neste processo, óxidos semicondutores são utilizados em células fotocatalíticas geradoras de hidrogênio. Ao se combinar semicondutores em heterojunções, os portadores de carga podem migrar entre os semicondutores, minimizando a recombinação do par elétron-lacuna.

### Resultados e discussão

Foram depositados por RF magnetron *sputtering* filmes finos de vanadato de bismuto (BiVO<sub>4</sub>) e óxido de níquel (NiO), com o intuito de formar uma heterojunção p-n. Foram confeccionados dois alvos a partir dos óxidos na forma de pó, prensados em um copo de aço.



Figura 1. Condições de deposição dos filmes por *sputtering*.

Os filmes foram caracterizados eletroquimicamente por voltametria de varredura linear na janela de potenciais de 0,0 a 1,1 V vs. Ag/AgCl, utilizando sulfato de sódio como eletrólito.

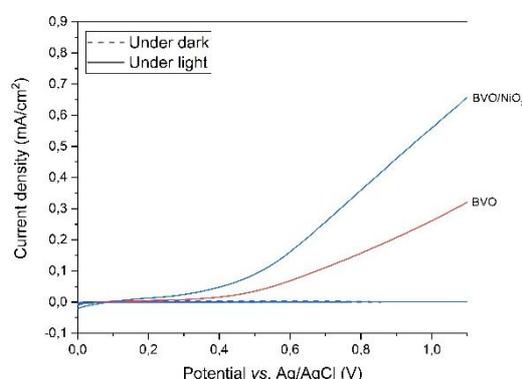


Figura 2. Fotocorrente de um dos filmes, após tratamento térmico a 500°C/2h.

Foi verificado que o filme depositado com excesso de oxigênio após tratamento térmico apresentou a maior densidade de corrente dentre as amostras.

### Conclusões

Foi verificado que as condições de deposição afetam as propriedades dos filmes, evidenciadas após tratamento térmico. Este comportamento é promissor para melhorias das propriedades de dispositivos fotoeletrocatalíticos.

### Agradecimentos

À CAPES pela bolsa concedida, ao Programa de Pós-Graduação em Química da UEL e ao laboratório LARX pelas análises e serviços prestados.

### Referências e notas

- (1) Abdelkareem, M. A. *et al. Sustainable Horizons*, **2024**, 9, 100079.
- (2) Rosa, W. S. *et al. ACS Applied Materials & Interfaces*, **2022**, 14, 22858



Categoria: Trabalho Completo

## Aplicação de voltametria cíclica e espectroscopia de impedância eletroquímica para determinação da capacitância nanotubos de $\text{TiO}_2$

Pablo C. Soto (PG)<sup>1</sup>, Gabriela V. de Melo (GD)<sup>1</sup>, Lohan R. Ychisawa<sup>1</sup> (IC), João Vitor Martins (PG)<sup>1</sup>, Gabrielle Sarto (PG)<sup>1</sup>, Beatriz V. Duarte (PG)<sup>1</sup>, Thiago N M Cervantes (PQ)<sup>1</sup>, Lucio C. de Almeida (PQ)<sup>1,2\*</sup>.

\*[lucioalmeida@uel.br](mailto:lucioalmeida@uel.br) ; [pablo.colofatti.soto@uel.br](mailto:pablo.colofatti.soto@uel.br)

1 - Departamento de Química, Universidade Estadual de Londrina, PR - Brasil.

2 - Instituto Nacional de Tecnologias Alternativas para Detecção, Avaliação Toxicológica e Remoção de Contaminantes Emergentes e Radioativos, Instituto de Química - Câmpus de Araraquara, SP – Brasil

Palavras-Chave: Voltametria Cíclica, Espectroscopia de Impedância Eletroquímica, Capacitância.

### Introdução

A capacitância é uma propriedade eletroquímica que está relacionada ao acúmulo de cargas em decorrência da aplicação de uma diferença de potencial. Em semicondutores, como os nanotubos de  $\text{TiO}_2$  (TNT), ela depende da área eletroquimicamente ativa e da espessura dos filmes, isto é, do comprimento dos nanotubos<sup>1</sup>. Nesse sentido, o objetivo deste trabalho é correlacionar os resultados de Capacitância (C) obtidas por meio de Voltametria Cíclica (VC) e a Espectroscopia de Impedância Eletroquímica (EIE) para TNT.

### Resultados e discussão

Os TNT apresentaram um perfil voltamétrico característico deste material, com picos de oxidação  $\text{Ti}^{3+} \rightarrow \text{Ti}^{4+}$  e redução  $\text{Ti}^{4+} \rightarrow \text{Ti}^{3+}$  em  $-1,10$  V e  $-0,70$  V, respectivamente. Além disso, foi observado um pico de oxidação característico das vacâncias de oxigênio, i. e., a presença de defeitos na estrutura em  $-0,05$  V.

Em sistemas complexos, como eletrodos nanoestruturados, o comportamento capacitivo não é ideal e pode ser atribuído a um elemento de fase constante. Por meio da linearização da equação de Gharbi et. al.<sup>2</sup> para dados voltamétricos, obteve-se que a capacitância efetiva do sistema foi de  $0,08 (\pm 0,02)$  mF  $\text{cm}^{-2}$ . Outra técnica que permite estimar a capacitância desses eletrodos, com maior exatidão, é a EIE, que consegue separar as contribuições resistivas e capacitivas do sistema. No entanto, por se tratar de sistemas complexos, os TNT apresentam desvios de idealidade de um capacitor ideal. Sendo assim, faz-se necessário a conversão do elemento de fase constante em uma medida de capacitância efetiva. Essa conversão foi

obtida a partir de alguns modelos: de distribuição simples, que assume o comportamento do capacitor tendendo a idealidade; o de Hsu-Mansfeld, que propõe a distribuição normalizada das constantes de tempo; o de Brug et al., que considera uma distribuição superficial; o de Power-Law, que avalia a variação de resistividade ao longo do filme<sup>1</sup>. Empregando cada um dos respectivos modelos supracitados, obteve-se os seguintes valores das capacitâncias efetivas:  $0,071$ ,  $0,20$ ,  $0,16$  mF  $\text{cm}^{-2}$  e  $1,96$   $\mu\text{F cm}^{-2}$ , respectivamente. Os valores são distintos, porém as aproximações de Hsu-Mansfeld e Brug et al. foram as mais próximas entre si em decorrência das similaridades entre os modelos de distribuição das constantes de tempo.

### Conclusões

A partir dos resultados obtidos, observa-se que o valor de C estabelecido pela VC, é semelhante ao valor obtidos pela técnica de EIE considerando o modelo de distribuição simples, isto é para sistemas que tendem a apresentar um comportamento ideal.

### Agradecimentos

Os autores agradecem ao INCT-DATREM, Programa de Pós-graduação em Química, a CNPq, à CAPES e à fundação Araucária.

### Referências

- (1) Mohammadi, M.; Choudhary, L.; Gadala, I. M.; Alfantazi, A.; *J Electrochem Soc* 2016, 163, C883.
- (2) Gharbi, O.; Tran, M. T. T.; Tribollet, B.; Turmine, M.; Vivier, V.; *Electrochim Acta* 2020, 343, 136109.



Categoria: Revisão ou Trabalho Completo (escolher)

## Detecção de adenina e adenosina por voltametria de pulso diferencial

Tallita S. e Silva<sup>1</sup> (PG), Luan P. Camargo<sup>1</sup> (PG), Luiz Henrique Dall'Antonia<sup>1</sup> (PQ), Dimas A. M. Zaia<sup>1</sup> (PQ)\*.  
[damzaia@uel.br](mailto:damzaia@uel.br).

Departamento de Química, Universidade Estadual de Londrina, PR - Brasil.

Palavras-Chave: Adenina, Adenosina, Sensor eletroquímico, Voltametria de pulso diferencial.

### Introdução

As bases nitrogenadas, bem como seus respectivos nucleotídeos, são responsáveis por funções metabólicas importantes, como a transmissão de energia e a sinalização celular. A mudança incomum em suas concentrações no organismo pode ser ocasionada por doenças como cânceres, Síndrome de Down e Alzheimer.<sup>1</sup> Além disso, essas moléculas foram essenciais na origem da vida e provavelmente estavam presentes no período prebiótico.<sup>2</sup>

A detecção desses compostos normalmente é feita por cromatografia líquida de alta performance, diluição isotópica por espectrometria de massas e quimioluminescência, no entanto, são métodos caros e demorados.<sup>3</sup> Portanto, sensores eletroquímicos são uma alternativa para monitoramento das bases nitrogenadas e nucleotídeos por possibilitarem uma resposta rápida, baixo custo e sensibilidade equivalente às técnicas convencionais.<sup>4</sup>

Dessa forma, o objetivo desse trabalho foi desenvolver uma metodologia para a detecção de ADE e ADO para monitoramento de doenças e para experimentos de química prebiótica.

### Resultados e discussão

Os experimentos foram realizados em uma célula eletroquímica de compartimento único contendo três eletrodos: diamante dopado com boro (BDD) como trabalho; Ag/AgCl (KCl 3,0 mol.L<sup>-1</sup>) como referência; e platina como auxiliar. O eletrodo de trabalho sofreu respectivamente, um pré-tratamento anódico e um pré-tratamento catódico antes das medidas. Também foi realizado voltametria cíclica com 20 varreduras no eletrólito suporte (PBS pH 7,02) antes das medidas. Foi possível observar picos característicos de adenina e adenosina em 1,10 e 1,25 V respectivamente (Figura 1). As curvas de calibração foram construídas em um intervalo de 0,5-100 µmol.L<sup>-1</sup>. Para a adenina, foi obtido a equação da reta  $y =$

$0,04374 x - 2,59E^{-8}$  ( $r^2 = 0,99269$ ) e LOD = 2,44 µmol.L<sup>-1</sup>. Para a adenosina, a equação da reta obtida foi  $y = 0,04374 x - 2,59E^{-8}$  ( $r^2 = 0,99269$ ) e LOD = 14,10 µmol.L<sup>-1</sup>.

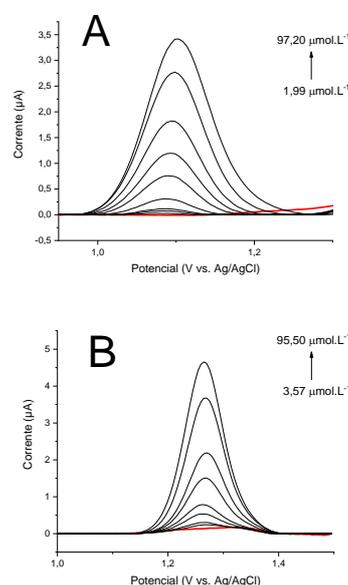


Figura 1. Voltamogramas de pulso diferencial de (A) adenina e (B) adenosina em PBS pH 7,02. (0,6-1,50 V).

### Conclusões

A metodologia é adequada para ADE e ADO. Futuros experimentos devem ser realizados para realizar a detecção em amostras reais.

### Agradecimentos

UEL, PPG-MDQUI, LQP, LEMA, CAPES, CNPQ e Fundação Araucária.

### Referências e notas

- (1) Feng, R.; Meng, J.; Yuan, H.; Zhang, X.; Gao, C.; Ban, C.; Guo, Y.; Wang, K. *Mater. Today Commun.* **2023**, 34, 105471.
- (2) Chatterje, S. *From Stardust to First Cells*. 1 ed. Springer, Lubbock. **2023**.
- (3) Vinoth, V.; Kaimal, R.; Selvamani, M.; Michael, R.; Pugazhenthiran, N.; Mangalaraja, R. M.; Valdés, H.; Anandan, S. *J. Electroanal. Chem.* **2023**, 934, 117302.
- (4) Tang, C. Yogeswaran, U.; Chen, S. M. *Anal. Chim. Acta.* **2009**, 636, 1.



Categoria: Trabalho Completo

## Explorando Heterojunções CuO/TiO<sub>2</sub>: Uma Abordagem Fotoeletrocatalítica para Produção de Hidrogênio

Thifany M. T. Makita (IC), Gabriel de F. Borba (IC), Luiz H. Dall'Antonia (PQ), Roberta A. Medeiros (PQ), Roberto de Matos\* (PQ)

[rmatos@uel.br](mailto:rmatos@uel.br)

Departamento de Química, Universidade Estadual de Londrina, PR - Brasil.

Palavras-Chave: Heterojunção, TiO<sub>2</sub>, CuO, Fotoeletrocatalise.

### Introdução

A crescente preocupação ambiental tem impulsionado a busca por energias limpas, como o hidrogênio, produzido pela eletrólise da água. O TiO<sub>2</sub> é um semicondutor promissor para fotoeletrocatalise, devido à sua estabilidade e baixo custo. Entretanto, sua absorção de luz limitada à região do ultravioleta e a rápida recombinação dos portadores de carga fotogerados são desafios a serem vencidos.<sup>1</sup> Para melhorar a eficiência fotocatalítica, a heterojunção de TiO<sub>2</sub>/CuO vem sendo estudada, buscando ampliar a absorção de luz e minimizar a recombinação do par elétron-lacuna, aumentando assim a produção de H<sub>2</sub>.

### Resultados e discussão

Para a formação do material heteroestruturado, CuO/TiO<sub>2</sub>, primeiramente o cobre metálico foi eletrodepositado sob substratos de vidro-FTO empregando solução de CuSO<sub>4</sub>. Na sequência, butóxido de titânio foi hidrolisado sobre o CuO por meio da imersão (2 e 10 vezes) dos substratos em solução de butóxido de titânio em etanol. Logo após, as deposições passaram por caracterizações fotoeletroquímica, sob diferentes potenciais empregando lâmpada de Xenon, para avaliar a atividade fotocatalítica dos materiais.

Com as caracterizações fotoeletroquímicas constatou-se que, tanto a deposição de CuO quanto a formação de TiO<sub>2</sub> ocorreram de forma efetiva sobre o FTO. Entretanto, para o TiO<sub>2</sub>, FTO com 10 deposições não apresentou aumento linear de fotocorrente quando comparada a do material com duas deposições. Isso pode estar relacionado a uma compactação do filme com maior número de camadas, reduzindo porosidade e rugosidade e, conseqüentemente, a área fotoeletroativa. Para a

heterojunção FTO/CuO/TiO<sub>2</sub> foi observado que, ao irradiar o material com luz UV-Vis pelo lado do FTO, a fotocorrente (*i chopper*) não apresentou variações significativas do observado para filmes contendo somente CuO em -0,1 V (vs. Ag/AgCl 3 molL<sup>-1</sup>). Entretanto, em potenciais positivos, não foram observadas fotocorrentes positivas, como observado para o TiO<sub>2</sub>. Isso pode estar relacionado à fotorredução do CuO à Cu<sub>2</sub>O, reduzindo assim a incidência de luz UV sobre o TiO<sub>2</sub> devido à absorção competitiva da luz pelo CuO.

### Conclusões

O método proposto, simples e rápido, para a formação de TiO<sub>2</sub> sobre CuO, se mostrou eficiente. De acordo com as respostas de fotocorrente, foi possível confirmar a classificação tipo p para o CuO e tipo n para o TiO<sub>2</sub>. O fato da fotocorrente não ter sido alterada significativamente com a heterojunção pode ser explicada pela baixa excitação do TiO<sub>2</sub> devido a absorção competitiva do CuO, assim como, a redução do CuO à Cu<sub>2</sub>O. Além disso, o perfil de corrente negativa na heterojunção também pode ser justificado pela excitação do CuO superior à do TiO<sub>2</sub>, fazendo com que os e<sup>-</sup> fotogerados migrem da banda de condução (BC) do CuO para a do TiO<sub>2</sub>,<sup>2</sup> promovendo a redução de H<sup>+</sup> à H<sub>2</sub> em potenciais abaixo de -0,1 V.

### Agradecimentos

À CNPq e FA pela bolsa concedida e aos laboratórios LAEEM, LADEMA e LEMA pelo apoio.

### Referências e notas

- (1) Nam, Y.; Lim J. H.; Ko, K. C. J. Mater. Chem. A, **2019**, 7, 13833.
- (2) Janczarek, M.; Kowalska, E. Catalysts 2017, 7, 317



Categoria: Trabalho Completo

## Avaliando a hidrofiliabilidade do poliácido lático enxertado com metacrilato de glicidil

Vinicius A. M. Gomes<sup>1</sup> (PG), Gizilene M. Carvalho<sup>\*1</sup> (PQ)  
[gizilene@uel.br](mailto:gizilene@uel.br)

<sup>1</sup>Departamento de Química, Universidade Estadual de Londrina, PR - Brasil.  
Palavras-Chave: Modificação química, Polimerização, Compatibilizante.

### Introdução

O poliácido lático (PLA) é um polímero amplamente utilizado na fabricação de membranas biomédicas. No entanto, por ser um polímero hidrofóbico, diferentes estudos buscam a modificação superficial do PLA para otimização de sua miscibilidade e propriedade de biocompatibilidade.<sup>1</sup> Uma forma de resolver tal problemática, refere-se ao enxerto do monômero metacrilato de glicidil (GMA) na matriz do PLA. O GMA enxertado atua como agente hidrofílico por ser um monômero bifuncional (epóxi/acrílico) muito versátil e reativo. Portanto, este trabalho teve como objetivo realizar diferentes graus de enxertos de GMA na superfície do PLA e estudar o efeito do mesmo nas propriedades de hidrofiliabilidade.

### Resultados e discussão

Foram preparados três graus de enxerto utilizando: 6 g de PLA, GMA (10%, 15% e 20% (m/m)), 100 mL de dimetilformamida (solvente) e 0,1% (m/m) de peróxido de benzoíla (iniciador da reação). A reação aconteceu por 5 horas em 115°C com atmosfera inerte (gás nitrogênio) e agitação de 40 rpm. Após enxertia, solubilizou-se 1 g de PLA puro e das respectivas amostras enxertadas em 100 mL de clorofórmio, as soluções foram vertidas em placas de Petri e secas em temperatura ambiente (28°C) por 12 horas. Os filmes obtidos foram analisados por Espectroscopia no Infravermelho por Transformada de Fourier de Refletância Total Atenuada (FTIR-ATR) e submetidos aos ensaios de ângulo de contato com água destilada. Na Figura 1, observou-se a banda atribuída ao estiramento assimétrico do epóxi em de 921 cm<sup>-1</sup>, confirmando a eficiência do enxerto.<sup>1</sup> Na Tabela 1, verificou-se que o filme de PLA puro apresentou característica hidrofóbica (ângulo > 90°), enquanto que as amostras enxertadas apresentaram superfícies hidrofílicas (ângulo < 90°).<sup>2</sup> A redução no ângulo de contato confirma o efeito do grupo epóxido na hidrofiliabilidade dos polímeros enxertados.<sup>2</sup>

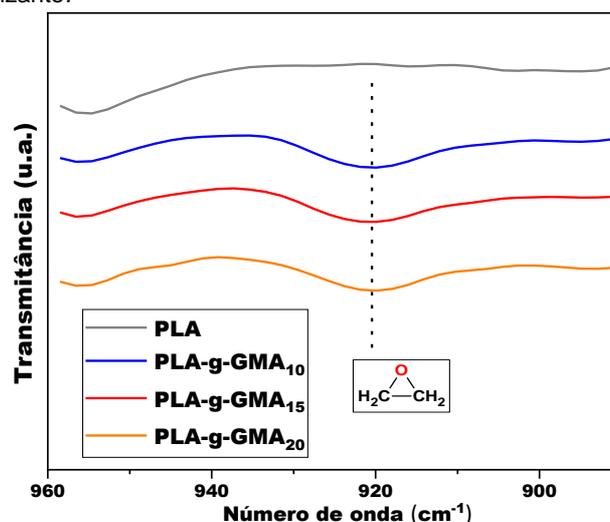


Figura 1. Espectros de FTIR-ATR dos filmes de PLA. Fonte: Autores, 2024.

Tabela 1. Resultados dos ensaios de ângulo de contato em água destilada e 25°C dos filmes produzidos

Amostra	Ângulo de contato (°)
PLA puro	107,9 ± 0,5
PLA-g-GMA <sub>10</sub>	86,8 ± 0,7
PLA-g-GMA <sub>15</sub>	72,1 ± 0,5
PLA-g-GMA <sub>20</sub>	71,9 ± 0,8

Valores médios ± desvio padrão. Fonte: Autores, 2024.

### Conclusões

O enxerto de GMA acarretou mudanças significativas na característica hidrofóbica do PLA, melhorando sua afinidade com água e possibilitando o desenvolvimento de membranas com polímeros hidrofílicos.

### Agradecimentos

A CNPQ; CAPES, Fundação Araucária pelo fomento da pesquisa e ao Laboratório de Química e Prebiótica (LQP) da UEL.

### Referências

- (1) Song, L. *et al. Polymers*, **2022**, 14, 4088.
- (2) Bi, H. *et al. Polymers*, **2020**, 12, 839.



Categoria: Trabalho Completo

## INFLUÊNCIA DA SOLUÇÃO COLETORA NO ÍNDICE DE INTUMESCIMENTO DE HIDROGÉIS DE CELULOSE E ALGINATO

Paula Silva<sup>1</sup>(PG), Vinicius Gomes<sup>1</sup>(PG), Franciscara Tonholi<sup>1</sup>(PG),  
Gizilene Carvalho<sup>1</sup>(PQ)\*

\*gizilene@uel.br

1 - Departamento de Química, Universidade Estadual de Londrina, PR - Brasil.

Palavras-Chave: Hidrogéis de Celulose e Alginato; Estrutura polimérica, Afinidade em água.

### Introdução

Hidrogéis são materiais poliméricos que podem ter origem sintética ou natural, formados por redes tridimensionais hidrofílicas com alto poder de sorção de líquidos sem dissolver ou perder sua integridade estrutural [1]. Este estudo objetivou analisar como a estrutura dos hidrogéis de celulose e alginato tem influência no índice de intumescimento (I%), buscando otimizar sua síntese para aplicações sustentáveis.

### Resultados e discussão

Na produção dos hidrogéis de celulose (CEL) e alginato (AL) foram utilizadas soluções previamente preparadas de CEL e AL. As massas estabelecidas de cada solução, para fornecer a concentração desejada, foram misturadas de acordo com a Tabela 1, com agitação magnética por 30 min. Após os hidrogéis serem gotejados, estes foram mantidos por 24 horas em repouso na solução coletora, em seguida lavados com água destilada para remoção de íons cálcio em excesso.

**Tabela 1.** Formulações de hidrogéis de Celulose (CEL) e alginato (AL) produzidos utilizando diferentes s soluções coletoras.

Hidrogéis	Celulose % (CEL)	Alginato % (AL)
CEL/AL	75	25
CEL/AL	60	40
CEL/AL	50	50

Com isso, foi realizado o estudo do índice de intumescimento (I%) para todas as formulações de hidrogéis na Tabela 1, utilizando solução de CaCl<sub>2</sub> em diferentes concentrações (1, 3 e 5%) em 480 min (8 horas), conforme Figura 1,

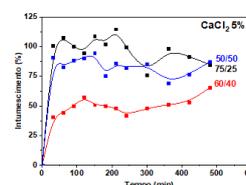
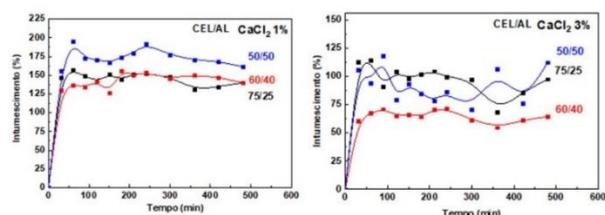


Figura 1. I% dos hidrogéis de CEL/AL em diferentes concentrações de solução CaCl<sub>2</sub> (1,3 e 5%) 25°C.

Os hidrogéis gotejados em CaCl<sub>2</sub> 3% exibem bom I% (Figura 1) e maior integridade física após o intumescimento. Por isso, foram selecionados para as análises estruturais subsequentes. A Espectroscopia no Infravermelho com Transformada de Fourier em modo de Reflexão Total Atenuada (FTIR-ATR) para esses hidrogéis está apresentada na Figura 2.

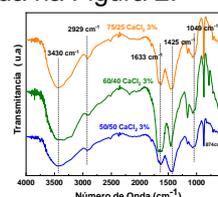


Figura 2. Espectros de FTIR dos hidrogéis de CEL/AL em CaCl<sub>2</sub> 3%.

O espectro de FTIR dos hidrogéis de CEL/AL, Figura 2, apresenta um alargamento na banda em 3430 cm<sup>-1</sup>, atribuída às vibrações O-H, sugerindo interação entre os polímeros. As bandas em 1633 cm<sup>-1</sup> e 1425 cm<sup>-1</sup> indicam o estiramento dos grupos carboxilatos (COO<sup>-</sup>).

### Conclusões

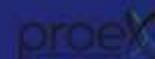
Os hidrogéis em CaCl<sub>2</sub> 3% apresentam características equilibradas, com bom I% e melhor integridade física após intumescimento.

### Agradecimentos

CNPq, CAPES e Fundação Araucária.

### Referências

[1] Soleimani, S.; Heydari, A.; Fattahi, M.; Motamedisade, A. v.192. 115999, 2023.



### Categoria Trabalho Completo

## Síntese e caracterização $\text{BiVO}_4$ ancorado em nanotubos de carbono (CNT) com foco na detecção eletroquímica de glicose.

Willian Aparecido dos Santos<sup>1</sup> (PG), Luiz Henrique Dall'Antonia\*<sup>1</sup> (PQ)  
[luizh@uel.br](mailto:luizh@uel.br)

<sup>1</sup>Departamento de Química, Universidade Estadual de Londrina, PR - Brasil

Palavras-Chave: Semicondutores, Vanadato de Bismuto, Nanotubos de Carbono, Glicose.

### Introdução

O vanadato bismuto ( $\text{BiVO}_4$ ) destaca-se como um semicondutor em aplicações ambientais e tecnológicas voltadas à energia sustentável. O  $\text{BiVO}_4$  em sua estrutura cristalina monoclinica, apresenta fotoatividade na região do visível e um *band-gap* de 2,4 eV, muito favorável para ser utilizado em processos fotoeletrocatalíticos usando luz visível<sup>1</sup>. Entretanto, apesar de seu desempenho promissor, sua eficiência ainda é limitada. Com isso, o objetivo do presente trabalho é ancorar o  $\text{BiVO}_4$  nas paredes do nanotubo de carbono (CNT) para uma resposta fotoeletroquímica melhorando sua utilização na detecção de glicose, visto que a decoração dos CNT aumenta a eficiência e condutividade elétrica do material.

### Resultados e discussão

A síntese do  $\text{BiVO}_4$  foi realizada de acordo Zang e colaboradores<sup>2</sup>. Foram produzidos filmes de  $\text{BiVO}_4$  puro e  $\text{BiVO}_4/\text{CNT}$ , depositados em substratos de ITO e PET, utilizando a técnica de *drop-casting*. Foram realizadas as medidas fotoeletroquímicas utilizando um potenciostato e uma célula eletroquímica de compartimento único com um eletrodo de trabalho, um contra eletrodo de Platina (Pt) e um eletrodo de referência Ag/AgCl. As medidas iniciaram com voltametria cíclica, voltametria linear e cronoamperometria. Foram realizadas as medidas utilizando como eletrólito uma solução de sulfato de sódio  $0,1 \text{ mol L}^{-1}$  no qual foi varrido o potencial de 0 até  $1,2 \text{ V}^3$ . Posteriormente foi adicionado junto ao eletrólito uma quantidade de 0,18 gramas de glicose. Em seguida, as amostras foram analisadas no mesmo potencial. A partir dos dados de cronoamperometria (Figura 1) é possível observar a resposta do eletrodo de  $\text{BiVO}_4$  na presença e na ausência de luz, evidenciando a diferença de fotocorrente gerada. Conforme apresentado na Figura 2 foram realizadas medidas de cronoamperometria na presença da glicose,

possibilitando uma comparação entre os eletrodos de  $\text{BiVO}_4$  e  $\text{BiVO}_4/\text{CNT}$ . Nota-se que o resultado da fotocorrente foi maior para o filme  $\text{BiVO}_4/\text{CNT}$ .

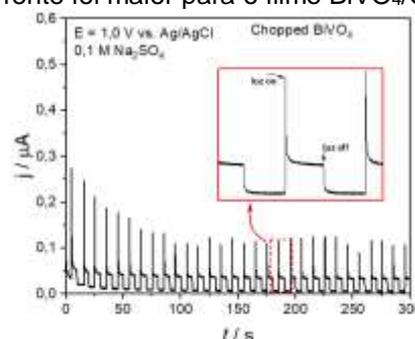


Figura 1: Cronoamperometria do filme  $\text{BiVO}_4$  na presença em  $\text{Na}_2\text{SO}_4$   $0,5 \text{ mol L}^{-1}$ . Fonte: Autores, 2024.

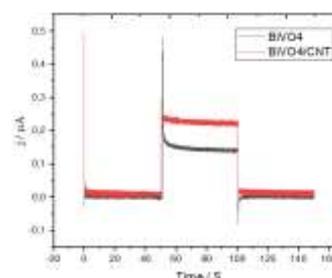


Figura 2: Cronoamperometria do filme  $\text{BiVO}_4$  e  $\text{BiVO}_4/\text{CNT}$  na presença do eletrólito e de glicose. Fonte: Autores, 2024.

### Conclusões

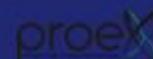
A heterojunção de  $\text{BiVO}_4/\text{CNT}$  demonstrou maior sensibilidade em comparação aos semicondutores compostos apenas por  $\text{BiVO}_4$ , levando a uma melhora no sinal de resposta à detecção de glicose.

### Agradecimentos

CNPQ; Capes, Fundação Araucária pelo fomento da pesquisa, UEL e ao laboratório de eletroquímica e materiais (LEMA)

### Referências

- (1) Zang, L. et. al. *J. Phys. Chem. B* **2006** 110, 2668-2673.
- (2) Araujo, M. et. al. *Electroanalysis* **2021**, 33, 663
- (3) Pelissari, M. et. al. *Journal of Materials Science* **2022**, 57, 7173.



## Nanoestruturas de TiO<sub>2</sub> decoradas com Ag e seu uso como substratos SERS recicláveis

Categoria: Revisão

Beatriz Vieira Duarte<sup>1</sup>(PG), Thiago N. M. Cervantes<sup>1</sup>(PQ), Lucio C. de Almeida<sup>1\*</sup>(PQ)

<sup>1</sup> Departamento de Química, Universidade Estadual de Londrina, 86057-970 Londrina – PR, Brasil; \*lucioalmeida@uel.br  
Palavras-Chave: Surface-enhanced Raman spectroscopy (SERS), TiO<sub>2</sub>, Nanopartículas de prata, fotocatalise.

### Introdução

A espectroscopia SERS é uma técnica não destrutiva, sensível e seletiva, demonstrando grande potencial no desenvolvimento de sensores<sup>1</sup>. Nela, os modos vibracionais característicos da espectroscopia Raman podem ser intensificados em até 10<sup>6</sup> a 10<sup>12</sup> vezes devido a formação de *hotspots*<sup>2</sup>, que são regiões de campo elétrico intensificado, oriundos da absorção de comprimentos de onda específicos na região do visível por nanopartículas metálicas, como a Ag, permitindo uma detecção altamente sensível das moléculas que estão presentes nesses pontos<sup>3</sup>. A fim de favorecer e/ou intensificar o efeito SERS, faz-se necessário o uso de substratos de estrutura regular<sup>2</sup>. O TiO<sub>2</sub> é utilizado devido a sua não-toxicidade, estabilidade, habilidade fotocatalítica e elevada área superficial, especialmente quando nanoestruturado<sup>4</sup>. Portanto, o TiO<sub>2</sub> decorado com nanopartículas de Ag tem emergido como uma alternativa promissora para o desenvolvimento de substratos SERS altamente sensíveis e recicláveis.

### Síntese e aplicações do TiO<sub>2</sub>-Ag

Os materiais nanoestruturados de TiO<sub>2</sub> (Figura 1) podem ser obtidos por anodização de uma placa de titânio<sup>4,5</sup> e partir de suspensão coloidal (hidrotermal)<sup>6</sup>. A decoração com Ag é feita por deposição térmica<sup>2,3</sup>, *sputtering*<sup>5</sup> ou redução em solução<sup>1,4</sup>.

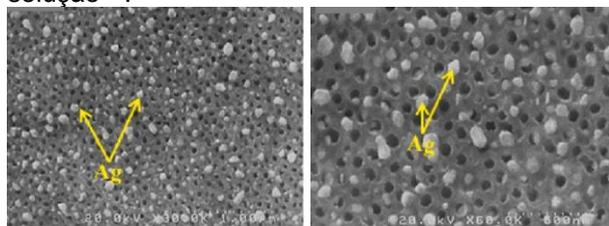


Figura 1. Imagens dos nanotubos de TiO<sub>2</sub> decorados com Ag, obtidos por microscopia eletrônica de varredura por emissão de campo.<sup>5</sup>

A intensidade das bandas na técnica SERS é proporcional a concentração da solução, permitindo, assim, a quantificação dos analitos. Porém para que os resultados sejam confiáveis a

reprodutibilidade dos substratos é de suma importância e pode ser estimada pela variação na intensidade dos picos obtidos em diferentes preparos de substrato. Na literatura reporta-se desvios padrões relativos de 4 a 13%<sup>1-2,4,6</sup>. Após a quantificação, os substratos foram submetidos a exposição UV até que os analitos fossem degradados pelo processo de fotocatalise. O reuso dos substratos foi estimado pela quantidade de ciclos realizados sem que se perdesse a intensidade do efeito SERS.

Tabela 1. reuso, limites de detecção e fator de intensificação SERS dos substratos reportados na literatura.

Ref.	reuso	Molécula alvo	LD (mol.L <sup>-1</sup> )	EF
1	3 ciclos	R6G, MG, MB	10 <sup>-12</sup> , 10 <sup>-9</sup> , 10 <sup>-8</sup>	10 <sup>8</sup>
4	4 ciclos	Vit B12	10 <sup>-8</sup>	10 <sup>8</sup>
6	3 ciclos	MG	10 <sup>-16</sup>	10 <sup>11</sup>

Os substratos também foram testados em amostras reais, como no caso da vitamina B12 que foi quantificada em comprimidos comerciais<sup>4</sup> e o corante MG quantificado em amostras de água de um lago<sup>6</sup> mostrando o potencial do método para aplicações práticas.

### Conclusões

As propriedades plasmônicas da Ag, combinadas com a funcionalidade fotocatalítica do TiO<sub>2</sub> permitem a amplificação de sinais Raman e a regeneração eficiente do substrato após seu uso. Essa combinação única oferece uma solução sustentável para aplicações que exigem detecção de moléculas em baixas concentrações.

### Referências e notas

- (1) ZHAI, Haichao et al. *Frontiers in Chemistry*, v. 10, p. 992236, 2022.
- (2) DAS, Sathi et al. *Optical Materials*, v. 125, p. 111994, 2022.
- (3) DAS, Sathi; SAXENA, Kanchan; MEHTA, Dalip Singh. *Materials Advances*, v. 3, n. 13, p. 5337-5343, 2022.
- (4) JAFARI, Mohammad et al. *Microchemical Journal*, v. 181, p. 107813, 2022.
- (5) HANKOVA, Adela et al. *Surfaces and Interfaces*, v. 35, p. 102441, 2022.
- (6) YANG, Weiye et al. *ACS omega*, v. 6, n. 41, p. 27271-27278, 2021.



Categoria: Revisão

## Perspectiva das aplicações de nanotubos de TiO<sub>2</sub> autodopados

Gabriela V. de Melo (GD)<sup>1</sup>, Pablo C Soto (PG)<sup>1</sup>, Gabrielle Sarto (PG)<sup>1</sup>, João V. Martins (PG)<sup>1</sup>, Lohan R. Ychisawa (GD)<sup>1</sup>, Beatriz Duarte (PG)<sup>1</sup>, Thiago N M Cervantes (PQ)<sup>1\*</sup>, Lucio César de Almeida (PQ)<sup>1\*</sup>.

\*[lucioalmeida@uel.br](mailto:lucioalmeida@uel.br) \*[thiagocervantes@uel.br](mailto:thiagocervantes@uel.br)

1 - Departamento de Química, Universidade Estadual de Londrina, PR - Brasil; 2 - Instituto Nacional de Tecnologias Alternativas para Detecção, Avaliação Toxicológica e Remoção de Contaminantes Emergentes e Radioativos, Instituto de Química - Câmpus de Araraquara, SP - Brasil

Palavras-Chave: síntese eletroquímica, nanotubos de dióxido de titânio (TNT), auto-dopagem.

### Introdução

Um eletrodo de nanotubos de TiO<sub>2</sub> (TNT) é um material formado por estruturas cilíndricas de dióxido de titânio dispostas de maneira ordenada em escala nanométrica. Esses proporcionam uma elevada área superficial e alta porosidade, o que melhora a interação do material com substâncias químicas ou íons na solução. Devido às propriedades semicondutoras do TiO<sub>2</sub> e a sua estabilidade em condições adversas de temperatura e pH, os TNTs são amplamente utilizados em aplicações fotocatalíticas, sensores, células solares e baterias, onde desempenham um papel crucial no transporte de carga e na eficiência de processos eletroquímicas<sup>[1-2]</sup>.

Aos TNTs podem ser realizadas modificações estruturais que alterem as suas propriedades físico-químicas, a partir da redução das recombinações e<sup>-</sup>/h<sup>+</sup>, aumento da eficiência catalítica, área superficial e incremento de sítios ativos. Nesse sentido, podemos destacar o processo de auto-dopagem que, a partir de um processo predominantemente interfacial, cliva as estruturas de Ti-O e promove a formação de vacâncias não estequiométricas e, por conseguinte, sítios ativos de Ti<sup>3+</sup><sup>[2]</sup>. Ao realizar-se a auto-dopagem do TiO<sub>2</sub>, reduz-se o *bandgap* do material, doravante denominados de SD-TNT, devido a inserção de níveis de energia em seu *gap*, com o concomitante aumento da eficiência na propriedade fotoatividade do material, pois ocorre um aumento na absorção da luz visível.<sup>[1,2]</sup> Dessa forma, na presente revisão, deseja-se apresentar recentes aplicações dos SD-TNT.

### Resultados e discussão

Um processo fundamental para a fotocatalise consiste na geração de radicais hidroxilas, ·OH, que são os principais responsáveis por oxidar

compostos recalcitrantes. A dopagem<sup>2</sup> dobra a capacidade da geração desses radicais, além de reduzir o potencial necessário para formá-los (de 1,00V para 0,68V). Além disso, a redução do *gap* desses materiais, de 3,2 para 2,7 V, permite a aplicação de luz visível nos experimentos fotocatalíticos, como a degradação/inativação de organismos patogênicos, como a *E. coli*, sem a necessidade de etapas subsequentes de recuperação do catalisador para o seu reuso.

Nas células solares sensibilizadas por corante (DSSC), os SD-TNT oferecem maior eficiência na captação de luz e transporte de elétrons<sup>2</sup>, favorecendo a conversão de energia solar, com elevadas densidades de corrente, em torno de 2,8 mA/cm<sup>2</sup>, a 1,23V. Além disso, são estudados em aplicações biomédicas, como por exemplo na aceleração de crescimento de implantes ósseos, liberação controlada de medicamentos, dispositivos eletrocromáticos e sensores de gases<sup>2</sup>.

### Conclusões

Nesta revisão, nota-se que o emprego da auto-dopagem eletroquímica dos TNTs de TiO<sub>2</sub> melhora suas propriedades eletrônicas, como a redução de *bandgap*, aumento da fotocorrente, tornando o material mais eficiente para aplicações eletrocatalíticas e fotocatalíticas.

### Agradecimentos

Os autores agradecem ao INCT-DATREM, Programa de Pós-graduação em Química, a CNPq, à CAPES e à fundação Araucária

### Referências

- (1) SOTO, P. C.; MARTINS, J. V.; SARTO, G.; SLONSKI, M. M.; ANIZELLI, H. S.; FERREIRA, E. A.; CERVANTES, T. N. M.; ALMEIDA, L. C. J. *J. of Solid State Electrochemistry*. 2024. <https://doi.org/10.1007/s10008-024-06027->.
- (2) HONG, S. P.; KIM, S.; YOON, J.; KIM, C. *Korean J. Chem. Eng.*, v. 36, n. 11, p. 1753-1766, 2019.



## Filmes de TiO<sub>2</sub> decorados com nanopartículas de Au para a determinação de amostras orgânicas por técnica SERS.

Gabrielle Sarto (PG)<sup>1\*</sup>, Pablo C. Soto (PG)<sup>1</sup>, João V. Martins (PG)<sup>1</sup>, Lohan R. Ychisawa (GD)<sup>1</sup>, Thiago N. M. Cervantes (PQ)<sup>1</sup>, Lucio C. Almeida (PQ)<sup>12\*</sup>

\*lucioalmeida@uel.br, \*gabriellesarto@uel.br

<sup>1</sup>Departamento de Química, Universidade Estadual de Londrina Campus Universitário, Londrina, PR - Brasil. <sup>2</sup>Instituto Nacional de Tecnologias Alternativas para Detecção, Avaliação Toxicológica e Remoção de Contaminantes Emergentes e Radioativos, Instituto de Química - Câmpus de Araraquara, SP - Brasil

Palavras-Chave: SERS, TiO<sub>2</sub>NTs, AuNPs

### Introdução

A espectroscopia Raman é uma ferramenta muito poderosa para a análise de materiais, o fator determinante é a robustez e a versatilidade de sua instrumentação, o que representa uma solução promissora para a realização de análises de amostras complexas<sup>1</sup>. Nesse contexto, a técnica de espalhamento Raman amplificada por superfície (SERS) permite a aplicação dessa espectroscopia a domínios analíticos, expandindo ainda mais o campo de atuação da análise Raman<sup>1</sup>. A técnica SERS consiste, basicamente, em uma metodologia que acopla o espalhamento Raman de uma molécula orgânica com a ressonância plasmônica de superfície de uma nanopartícula metálica para aumentar os modos vibracionais ativos Raman dessa molécula<sup>1</sup>. Reconhecendo as muitas aplicações importantes da espectroscopia Raman, apresenta-se, nessa revisão, um breve panorama das principais e mais recentes aplicações para a investigação da utilização de nanoestruturas de TiO<sub>2</sub> com nanopartículas de ouro (AuNPs) como substratos SERS para identificar amostras orgânicas.

### Resultados e discussão

Dentre as nanoestruturas de TiO<sub>2</sub> que têm sido estudadas como suportes para nanopartículas metálicas, os nanotubos têm mostrado propriedades promissoras para construir plataformas SERS<sup>2</sup>, devido à sua elevada área superficial que favorece a deposição de nanopartículas e a possibilidade de se tornar um substrato reciclável a partir da irradiação de luz<sup>2</sup>. Recentemente, houve um interesse crescente no uso de AuNPs devido à sua fácil síntese, a possibilidade de gerar diferentes tamanhos e formas, a sua elevada área de superfície e a forte interação com outras moléculas orgânicas, especialmente aquelas que contêm átomos de enxofre ou cloro<sup>3</sup>. O tamanho, a forma e a aglomeração das partículas de AuNPs influenciam

a ressonância plasmônica, efeito diretamente associado à excitação coletiva de elétrons de condução que ocorre mediante a absorção de comprimento de onda na região do visível a infravermelho próximo. Como as AuNPs possuem elevado coeficiente de absorção nas regiões supracitadas, o efeito plasmônico é acentuado, promovendo maior sensibilidade para as moléculas dos analitos adsorvidas as AuNPs *via* SERS<sup>3</sup>. Considerando essas características únicas, os eletrodos de AuNPs/TiO<sub>2</sub> são materiais promissores para uma variedade de moléculas, como é mostrado na Tabela 1<sup>2,4</sup>.

**Tabela 1** - Desempenho de SERS de substratos de AuNPs/TiO<sub>2</sub> como sensores para algumas moléculas selecionadas.

Sondas	LD	EF	Reciclável
Estradiol	10 <sup>-9</sup>	10 <sup>6</sup>	----
4-CP	10 <sup>-9</sup>	----	3 vezes
Rodamina G	10 <sup>-5</sup>	5.10 <sup>4</sup>	4 vezes
4-MBA	10 <sup>-16</sup>	1.5.10 <sup>4</sup>	----

\*4-MBA - 4-mercaptobenzoico, 4-CP-4-clorofenol.

### Conclusões

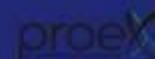
Nesta revisão, discutiu-se brevemente o uso de nanotubos de TiO<sub>2</sub> decorados com AuNPs para desenvolver substratos SERS mais eficazes. Apresentamos que as nanoestruturas atendem às características para dispersar nanopartículas metálicas com um tamanho e distribuição apropriados para atingir um elevado desempenho SERS, sendo muito estudada para detectar diversas amostras orgânicas.

### Agradecimentos

À CNPq, CAPES, Fundação Araucária e ao Laboratório de Eletroquímica Ambiental (LabEA).

### Referências

- (1) Sant'Ana, A. C.; Corio, P.; Temperini, M. L. A.; Quim Nova **2006**, 29, 805.
- (2) Jimenez-Cisneros, J.; Galindo-Lazo, J. P.; Mendez-Rojas, M. A.; Campos-Delgado, J. R.; Cerro-Lopez, M.; Molecules **2021**, 26, 74443.
- (3) Steffi Antony, M.; Shankar Hyam, R.; Materials Science and Engineering: B **2023**, 298, 116885.
- (4) Xinxin Wang et al., J. Phys.: Conf. Ser. **2023**, 2730, 012056.



Categoria: Revisão

## Influência de diferentes parâmetros no desempenho eletroquímico de supercapacitores

João Vitor Martins (PG)<sup>1\*</sup>, Gabrielle Sarto (PG)<sup>1</sup>, Pablo C. Soto (PG)<sup>1</sup>, Beatriz V. Duarte (PG)<sup>1</sup>, Lohan R. Ychisawa (GD)<sup>1</sup>, Thiago N. M. Cervantes (PQ)<sup>1</sup>, Henrique de Santana (PQ)<sup>1</sup>, Lucio C. Almeida (PQ)<sup>1\*</sup>

<sup>1</sup>Departamento de Química, Universidade Estadual de Londrina, Rodovia Celso Garcia Cid, PR-445, Km 380, Campus Universitário, Londrina, PR - Brasil.

\*[lucioalmeida@uel.br](mailto:lucioalmeida@uel.br), \*[joaovitor.martins@uel.br](mailto:joaovitor.martins@uel.br)

Palavras-Chave: supercapacitores, pseudocapacitores, capacitores híbridos, EDLC.

### Introdução

Os supercapacitores são dispositivos capazes de armazenar e liberar grandes quantidades de energia em um curto período, ofertando altas densidades de potência e ciclos rápidos de carga e descarga<sup>1</sup>. Esses dispositivos são comumente construídos utilizando materiais de eletrodos que combinam características de capacitores de dupla camada elétrica e materiais pseudocapacitivos<sup>1,2</sup>. O desempenho desses dispositivos é influenciado significativamente pela escolha dos materiais dos eletrodos e dos eletrólitos, como também das condições de síntese e rotas adotadas para obtenção desses materiais<sup>1,2</sup>. Considerando que o aprimoramento do desempenho eletroquímico de supercapacitores, potencializando uma maior condutividade elétrica, estabilidade cíclica e influenciando até mesmo na capacitância específica dos supercapacitores, é essencial para o desenvolvimento de novos dispositivos, entender como diferentes parâmetros de podem afetar seu desempenho eletroquímico. Dessa forma, o presente trabalho almeja realizar uma breve revisão e discussão a respeito dos supercapacitores e como diferentes parâmetros e rotas de síntese podem afetar seu desempenho eletroquímico.

### Resultados e discussão

A performance dos supercapacitores é influenciada por diversos fatores, incluindo os materiais usados na obtenção dos eletrodos, pois determinam a capacidade de armazenamento de carga, estabilidade do dispositivo e durabilidade. Os três principais tipos de supercapacitores são os capacitores de dupla camada elétrica (EDLC), os pseudocapacitores e os supercapacitores híbridos. Cada um desses tipos se distingue pelo seu mecanismo de armazenamento de carga: os EDLC armazenam carga eletrostaticamente, os

pseudocapacitores utilizam reações redox superficiais enquanto os supercapacitores híbridos combinam ambos os mecanismos. Contudo, tratando das diferentes metodologias de síntese, técnicas como deposição em camadas pulsadas, desmetalização, via hidrotérmica, filtração a vácuo, polimerização *in situ*, destoaam entre si. A via hidrotérmica, por exemplo, pode ser usada para criar nanomateriais com alta área de superfície e porosidade controlada, melhorando a capacidade de armazenamento de carga, enquanto a deposição química de vapor pode produzir filmes finos de materiais condutores com excelente uniformidade e adesão, aumentando a eficiência do transporte de carga. Por outro lado, a polimerização *in situ* pode ser utilizada para materiais pseudocapacitivos em matrizes condutoras, melhorando a capacidade e a estabilidade cíclica. Nesse sentido, cada parâmetro, como materiais ou métodos de síntese, oferecem vantagens específicas que podem ser exploradas para otimizar o desempenho dos supercapacitores, em equipamentos industriais, *nobreaks*, dispositivos de ativação de *airbags*, estabilizadores de rede elétrica, dentre outros.

### Conclusões

Nessa revisão foi possível entender brevemente como diferentes parâmetros influenciam no desempenho eletroquímico de supercapacitores e que a seleção dos materiais como rota de síntese são fatores pivotais na produção desses dispositivos.

### Agradecimentos

À CNPq, CAPES, Fundação Araucária e ao Laboratório de Eletroquímica Ambiental (LabEA).

### Referências

- (1) Sharma, S., Chand, P. *Results in Chemistry*. **2023**, 5, 100885.
- (2) Forouzandeh, P., Kurumavel, V., Pillai, Suresh C. *Catalysts*. **2020**, 10, 969.



Categoria: Projeto

## SÍNTESE, PURIFICAÇÃO E CARACTERIZAÇÃO DA CELULOSE BACTERIANA PROVENIENTE DE SCOOPY'S DE KOMBUCHA

Brunno Fernando de Souza Mussere<sup>1</sup> (AF), Gizilene Maria de Carvalho<sup>2</sup> (PQ), Letícia Alana Bertoldo<sup>1,2</sup> (PQ)

1 – Curso Técnico em Química Integrado ao NEM, CEEP Profa. Maria do Rosário Castaldi, Londrina, PR – Brasil

2 – Departamento de Química, Universidade Estadual de Londrina, PR – Brasil.

Palavras-Chave: Celulose, Bacteriana, Kombucha, Síntese, Purificação, Caracterização.

### Introdução

A celulose bacteriana (CB) trata-se de um biopolímero estrutural produzido por alguns tipos de cepas, tais como *Komagataeibacter sp.* e *Agrobacterium sp.*<sup>1</sup> Apresenta elevada pureza, resistência mecânica e grau de polimerização, bem como biocompatibilidade e biodegradabilidade ao corpo humano; propriedades que a tornam de grande interesse para a indústria biomédica, incluindo a engenharia de tecidos para curativos e liberação de medicamentos.<sup>2</sup>

Uma vez que o meio de cultivo e o tipo de cepa envolvida afetam as propriedades da CB, o objetivo deste trabalho é sintetizá-la a partir da fermentação do *starter*/SCOBY de kombucha, visando a produção alternativa e barata deste biopolímero.

### Metodologia

A síntese da CB será realizada a partir de cepas provenientes do chá de kombucha usando os meios de cultivo (proporções) a seguir: açúcar refinado:chá mate (15:100, ArCm), glicose anidro: chá preto (25:1000, GaCp) e glicose anidro:água (7:100, GaA). Finalizada a síntese, o biofilme de CB será removido com auxílio de uma pinça metálica e purificado em banho de NaOH 1 M (1 h) e H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> 1,5% (v/v, 2 h), intercalados com água destilada.<sup>3</sup>

Os filmes de CB serão caracterizados por espectroscopia de infravermelho, análise termogravimétrica, hidrofiliabilidade pelo método da gota séssil, condutividade pH<sub>H2O</sub> e pH<sub>PCZ</sub>. Em seguida, seu potencial para uso como tecidos será avaliado por ensaio de tração.

### Resultados esperados

Os dados referentes ao cultivo usando ArCm e GaCp são apresentados na Tabela 1.

Constatou-se a influência do meio de cultivo no tempo e espessura da CB formada. Esta diferença pode ser atribuída à maior facilidade de absorção da glicose no GaCp, quando comparado ao açúcar refinado no ArCm, acelerando o processo fermentativo e conseqüente formação do biofilme.

**Tabela 1:** Tempo de fermentação e espessura do biofilme de CB para os meios ArCm e GaCp.

Meio de Cultivo	Tempo de Fermentação	Espessura do Filme
ArCm	21 dias	3 mm
GaCp	14 dias	4 mm

A próxima etapa deste trabalho será o cultivo usando o meio GaA, comparando-o aos demais quanto ao rendimento e propriedades. Visando sua aplicação como tecidos sintéticos, será avaliada a presença de grupos funcionais que proporcionem a sorção-dessorção de fármacos, tais como hidroxilas e aminas, bem como a carga superficial. Adicionalmente, elevada hidrofiliabilidade, condutividade, resistência mecânica e maleabilidade são fundamentais para o desempenho do biopolímero.

### Considerações finais

Os dados iniciais demonstram a influência da fonte de carbono (açúcar e glicose anidro) nos biofilmes formados. O efeito nas propriedades e desempenho será avaliado nas próximas etapas do trabalho.

### Referências

- (1) CZAJA, W. et al. *Biomaterials*, v. 27, n. 2, p. 145–151, jan. 2006.
- (2) OLIVEIRA, M. DE.. Ufsc.br, 2016.
- (3) AMARASEKARA, A. S.; WANG, D.; GRADY, T. L.. *Applied Sciences*, v. 2, n. 2, p. 1–7, 1 fev. 2020.



Categoria: Trabalho Completo

## Investigação das Propriedades Estruturais e Funcionais do $ZnCo_2O_4$ por DRX e FTIR

Daina Buelvas<sup>1\*</sup> (PQ), Alexandre Urbano<sup>2</sup> (PQ), Felipe La Porta<sup>1</sup> (PQ)

E-mail: dainabuelvas@gmail.com

1 - Departamento de Química, Universidade Tecnológica Federal do Paraná, Londrina, PR - Brasil.

2 - Departamento de Física, Universidade Estadual de Londrina, PR - Brasil.

Palavras-Chave: (Nitreto de Carbono Grafítico, Ureia, Tioureia, Poluentes orgânicos)

### Introdução

O  $ZnCo_2O_4$  é um semicondutor do tipo p que tem despertado grande interesse devido às suas propriedades ópticas, baixa toxicidade e produção de baixo custo. Sua estrutura espinélio e sua capacidade de resposta à luz visível o tornam um material promissor para aplicações em fotocatalise e na degradação de micropoluentes<sup>1</sup>. Este trabalho busca estudar suas propriedades estruturais e funcionais, contribuindo para o desenvolvimento de materiais com potencial em fotocatalise.

### Resultados e discussão

**Materiais:**  $Zn(NO_3)_2 \cdot 6H_2O$ ,  $Co(NO_3)_2 \cdot 6H_2O$ , NaOH e água ultrapura.

**Síntese:** O material foi sintetizado usando o método hidrotérmico.

**Caracterização:** Difração de raios X (DRX) e espectroscopia no infravermelho por transformada de Fourier (FTIR).

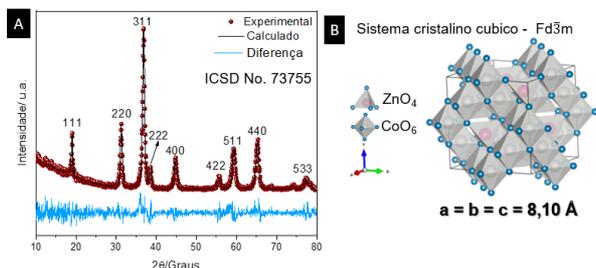


Figura 1. Refinamento Rietveld (A) e estrutura cristalina determinada (B).

Para determinar o tamanho médio dos cristalitos, foi feita análise de Williamsom-Hall, seguindo a equação a seguir<sup>2</sup>:

$$\beta \cos \theta = 4\epsilon \sin \theta + \frac{k\lambda}{D}$$

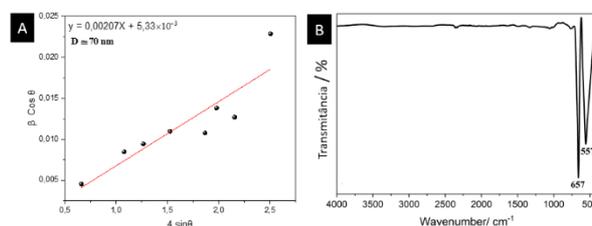


Figura 2. Análise Williamsom-Hall (A) e espectro FTIR do  $ZnCo_2O_4$  (B).

Com base nas Figuras 1 e 2, a formação da estrutura espinélio do  $ZnCo_2O_4$  foi confirmada. Além disso, o refinamento de Rietveld indicou a ausência de fases como  $ZnO$  ou  $Co(OH)_2$ . Esses resultados mostraram uma boa concordância com os dados reportados na literatura<sup>3</sup>.

### Conclusões

A estrutura do  $ZnCo_2O_4$  foi caracterizada com sucesso utilizando as técnicas de DRX e espectroscopia FTIR. Os resultados obtidos a partir dessas técnicas demonstram as propriedades estruturais e químicas do material, estabelecendo a base para futuras pesquisas e desenvolvimento de aplicações, especificamente na área de degradação fotocatalítica de poluentes orgânicos.

### Agradecimentos

Os autores agradecem ao CNPq (processo no. 172349/2023-0), ao grupo de pesquisa NanoQC (UTFPR/Londrina), e LARX (UEL).

### Referências e notas

- (1) Hai, Tao, et al. Journal of Physics and Chemistry of Solids. 2024, 185, 111747.
- (2) Zak, A. Khorsand, et al. Solid State Sciences. 2011,13, 251-256.
- (3)Xiao, Xuechun, et al. Ionics. 2018, 24, 2435-2443.



Categoria: Projeto

## Eletrofiação de fibras de celulose/álcool polivinílico/sulfato de condroitina para aplicações biomédicas.

Julia E. S. Gouveia (PG)<sup>1</sup>, Franciscara Tonholi (PG)<sup>1</sup>, Gizilene Maria de Carvalho (PQ)<sup>1\*</sup> [gizilene@uel.br](mailto:gizilene@uel.br)

<sup>1</sup>Departamento de Química, Universidade Estadual de Londrina, PR - Brasil.

Palavras-Chave: Polissacarídeos, Biomateriais, Curativos.

### Introdução

Os biopolímeros apresentam alto potencial para o desenvolvimento de curativos, devido à disponibilidade e biocompatibilidade desses materiais. Dentre os métodos de obtenção de fibras poliméricas está a eletrofiação, que se destaca pela capacidade de fabricação de fibras com alta área superficial e elevada porosidade. Todavia, muitos parâmetros influenciam nas características das fibras eletrofiadas, como as propriedades da solução, as condições do processo e fatores ambientais.<sup>1</sup> Nesta pesquisa, serão avaliados fatores de influência na eletrofiação de fibras de celulose, álcool polivinílico (PVA) e sulfato de condroitina (SC), utilizando como solvente o ácido trifluoroacético (TFA), a fim de obter fibras com propriedades físico-químicas adequadas para aplicação como curativos.

### Metodologia

Filmes de celulose serão produzidos por casting, a partir de soluções das amostras em ácido trifluoroacético (TFA) à concentração de 5% (m/v), armazenadas durante 1, 7 e 10 dias. Posteriormente, os filmes serão caracterizados por viscosimetria, difração de Raios-X (DRX) e espectroscopia no infravermelho por transformada de Fourier (FTIR). As blendas de celulose, PVA e SC serão preparadas por *casting* a partir de soluções na concentração de 5%, variando a concentração dos polímeros, armazenadas durante 10 dias. A miscibilidade das blendas será avaliada em função da concentração, por calorimetria diferencial de varredura (DSC) e termogravimetria (TG). A solução para eletrofiação será preparada de acordo com os melhores resultados obtidos no estudo de miscibilidade. A eletrofiação será executada utilizando uma seringa plástica de 10 mL, com vazão ajustada em 1 mL/h, tensão de saída de 15 kV, 8 cm de distância entre agulha e coletor, temperatura ambiente e umidade relativa de até 50%. As fibras obtidas serão caracterizadas

por microscopia eletrônica de varredura (MEV) e pela capacidade de intumescimento.

### Resultados esperados

Espera-se que os parâmetros de solução (concentração dos polímeros, suas respectivas massas moleculares, viscosidade, tensão superficial e condutividade), os parâmetros do processo de eletrofiação (tensão aplicada, taxa de alimentação de polímero e distância entre bico e coletor) e os parâmetros ambientais (umidade e temperatura) influenciam diretamente nas propriedades físicas e morfológicas das fibras eletrofiadas e, conseqüentemente, em sua possível aplicação. Além disso, é esperado que a eletrofiação de celulose/PVA/SC resultará em fibras com alta área superficial, capacidade de retenção de umidade, porosidade definida, flexibilidade, espessura adequada e uniformidade morfológica – propriedades que garantem trocas gasosas e propiciam a proliferação celular, ideais para curativos.

### Considerações finais

Tendo em vista que a celulose é o polímero natural mais abundante do planeta, a possibilidade de utilizá-la em regeneração de ferimentos oferece uma solução econômica para a promoção do bem-estar. Devido às propriedades físico-químicas, às propriedades mecânicas e à biocompatibilidade dos polímeros deste estudo e à morfologia das fibras obtidas por eletrofiação, espera-se que as fibras de celulose/PVA/SC sejam adequadas para aplicação como curativos.

### Agradecimentos

Ao CNPq, à CAPES e à Fundação Araucária pelo suporte financeiro.

### Referências e notas

(1) Mercante, L.; Corrêa, D. (org.). **Eletrofiação e nanofibras: fundamentos e aplicações**. Ponta Grossa: Atena Editora, 2023. *E-book*.



Categoria: Projeto

## Origem da vida? A influência de minerais e bases nitrogenadas na seleção de aminoácidos proteicos

Tallita S. e Silva<sup>1</sup> (PG), Dimas A. M. Zaia<sup>1</sup> (PQ)\*. [damzaia@uel.br](mailto:damzaia@uel.br).

Departamento de Química, Universidade Estadual de Londrina, PR - Brasil.

Palavras-Chave: Adsorção, Aminoácidos, Bases nitrogenadas, Minerais, Origem da vida, Química prebiótica.

### Introdução

A química prebiótica estuda as reações químicas que podem ter contribuído para o surgimento de vida. Um dos estudos procura compreender como moléculas mais simples conseguiram se pré-concentrar e se ligar covalentemente para a síntese de componentes mais complexos. Outro aspecto importante está na estrutura das moléculas presentes nos organismos vivos. Há fortes evidências indicando que aminoácidos eram encontrados nas formas  $\alpha$  (alfa),  $\beta$  (beta) e  $\gamma$  (gama) na Terra primitiva. No entanto, os aminoácidos nos seres vivos são de conformação  $\alpha$ , demonstrando haver seletividade nesse processo.<sup>1</sup> É provável que os minerais tiveram papel importante nesse processo, através da adsorção das moléculas, contribuindo também na pré-concentração e na polimerização dos aminoácidos.<sup>2</sup> Além disso, minerais modificados com bases nitrogenadas podem ter influenciado na seleção de aminoácidos diferentes dos selecionados por minerais sem modificação.<sup>3</sup> A ferrihidrita (Fhy) e a montmorillonita (Mnt) são dois minerais que provavelmente estavam presentes no período prebiótico e serão utilizados neste trabalho.<sup>4</sup>

### Metodologia

Serão preparadas duas águas do mar (ASW-1 e ASW-2), uma rica em  $Mg^{2+}$  e  $SO_4^{2-}$ , e a outra rica em  $Na^+$  e  $Cl^-$ .<sup>5,6</sup> Os minerais Fhy e Mnt serão preparados de acordo com a literatura.<sup>7,8</sup> O pH no ponto de carga zero ( $pH_{pcz}$ ) será definido utilizando solução de KCl.<sup>9</sup> A adsorção de  $\alpha$ -alanina,  $\beta$ -alanina, adenina (ADE), adenosina (ADO) e adenosina 5'-monofosfatada (AMP) serão avaliadas em Fhy e Mnt em soluções de água ultrapura, ASW-1 e ASW-2. A avaliação será realizada em pHs 3,00; 4,00 e 7,00. A caracterização dos minerais puros e modificados será feita em DRX, IV-TF e espectroscopia UV-vis. A quantificação de aminoácidos será realizada de acordo com a literatura<sup>10</sup> e a quantificação de ADE,

ADO e AMP será feita por voltametria de pulso diferencial (VPD) em PBS pH 7,02 utilizando uma célula eletroquímica - eletrodo de trabalho BDD, eletrodo referência Ag/AgCl ( $KCl$  3,0 mol.L<sup>-1</sup>) e eletrodo auxiliar de platina.

Os modelos de Freundlich, Langmuir e SIPs serão utilizados para a construção das isotermas. O estudo cinético será realizado por meio das equações de pseudo 1ª ordem, pseudo 2ª ordem e difusão intra-partícula.

### Resultados esperados

Compreender a função dos minerais e de ADE, ADO e AMP na seleção de  $\alpha$ -aminoácidos e exclusão de  $\beta$ -aminoácidos na origem da vida.

### Considerações finais

Minerais e bases nitrogenadas podem ter desempenhado um papel essencial na formação das primeiras proteínas. Compreender como esse processo ocorreu é fundamental para entender melhor a vida como conhecida nos dias de hoje.

### Agradecimentos

UEL, PPG-MDQUI, LQP, LEMA, CAPES, CNPQ e Fundação Araucária.

### Referências e notas

- (1) Zaia, D.A.M. *Quim. Nova*. **2003**, 26, 2.
- (2) Bernal, J. D. *The physical basis of life*. Routledge and Paul, Londres. **1951**.
- (3) Sowerby, S. J.; Peterson, G. B.; Holm, N. G. *Orig. Life Evol. Biosph.* **2002**, 32.
- (4) Hazen, R. M.; Papineau, D.; Bleeker, W.; Downs, R. T.; Ferry, J. M.; McCoy, T. J.; Sverjensky, D. A.; Yang, H. *Am. Mineral.* **2008**, 93, 11-12.
- (5) Zaia, D. A. M. *Int. J. Astrobiol.* **2012**, 11.
- (6) Samulewski, R. B.; Gonçalves, J. M.; Urbano, A.; da Costa, A. C. S.; Ivashita, F. F.; Paesano, A.; Zaia, D. A. M. *Life*. **2020**, 11, 12.
- (7) Schwertmann, U.; Cornel, R. M. *Iron Oxides in the laboratory*, 2ed. Wiley-VCH, Weinheim. **2000**.
- (8) Samulewski, R. B.; Guimarães, R. T. D.; Zaia, D. A. M. *Int. J. Astrobiol.* **2021**, 20, 1.
- (9) Uehara, G. *Int. Classif. Work.* Vol. 2. **1979**.
- (10) Zaia, D. A. M.; Barreto, W. J.; Santos, N. J.; Endo, A. S. *Anal.Chim. Acta.* **1993**, 277, 1.



Categoria: Projeto

## Síntese hidrotérmica de nanoestruturas de $\text{Co}_3\text{O}_4$ para aplicações fotocatalíticas

Tânia Iinuma (PG),<sup>1\*</sup> Bruno Rafael Rodrigues (PG)<sup>1</sup> e Felipe de Almeida La Porta (PQ)<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup> Departamento de Química, Universidade Estadual de Londrina, Pr - Brasil.

<sup>2</sup> Departamento de Química, Universidade Tecnológica Federal do Paraná, Pr - Brasil.

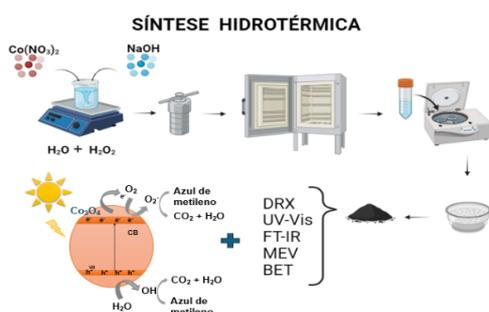
\*[tania.iinuma10@uel.br](mailto:tania.iinuma10@uel.br)

Palavras-Chaves: Óxido de Cobalto, Nanotecnologia, Síntese Hidrotérmica, Azul de metileno, Fotocatálise.

### Introdução

A poluição industrial, em especial a contaminação de efluentes por corantes como o azul de metileno, representa um grave problema ambiental.<sup>1</sup> Diante dessa problemática, os processos oxidativos avançados e a fotocatálise heterogênea surgem como alternativas promissoras para remoção desses poluentes.<sup>2</sup> Este estudo propõe desenvolver fotocatalisadores nanoestruturados de óxido de cobalto ( $\text{Co}_3\text{O}_4$ ) com diferentes morfologias para a degradação fotocatalítica do azul de metileno sob irradiação UV, contribuindo para a mitigação dos impactos ambientais causados por essa classe de poluentes.

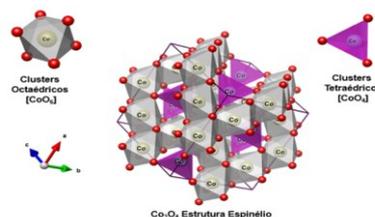
### Metodologia



### Resultados esperados

As nanopartículas de  $\text{Co}_3\text{O}_4$  deverão apresentar uma estrutura cristalina do tipo espinélio (**Figura 1**), com diferentes morfologias e tamanhos, obtidas através do controle das condições de síntese hidrotérmica. Nesse arranjo, os íons de cobalto ocupam dois tipos distintos de sítios cristalográficos, como mostrado na **Figura 1**, onde os íons  $\text{Co}^{2+}$  ocupam sítios tetraédricos, coordenados com quatro oxigênios [ $\text{CoO}_4$ ], enquanto os íons  $\text{Co}^{3+}$  são coordenados com seis

oxigênios formando sítios octaédricos [ $\text{CoO}_6$ ], tornando-o um material de grande interesse em diversas aplicações, incluindo a fotocatálise.



**Figura 1.** Ilustração da célula unitária do  $\text{Co}_3\text{O}_4$  com estrutura do tipo espinélio.

Este projeto de pesquisa pretende otimizar as propriedades dos fotocatalisadores de  $\text{Co}_3\text{O}_4$ , visando maximizar a fotodegradação do azul de metileno. Para isso, serão investigados os efeitos de diferentes parâmetros experimentais, como pH e concentração de  $\text{H}_2\text{O}_2$ , na atividade fotocatalítica.

### Considerações finais

É importante ressaltar que estes são apenas alguns dos resultados esperados para este projeto. Durante seu desenvolvimento, novas descobertas e desafios podem surgir, o que pode levar a resultados adicionais e inovadores contribuindo para o desenvolvimento de novas nanoestruturas a base de  $\text{Co}_3\text{O}_4$ .

### Agradecimentos

Universidade Estadual de Londrina, Programa de Pós-graduação em Química - Uel, NanoQc research group e CAPES.

### Referências e notas

- (1) Stoppe, A. C. R.; Faiad J. C.; Cunha, L. M. P.; Neto, V.; Santos, K. G. *Tiângulo Mineiro*. **2020**, <https://proceedings.science/p/114601>
- (2) Saemian, T.; Hossaini, M. S.; Yarak, T.; Gharagoslou, M.; Soltani, B. *Inorg Chem Commun*, **2022**, doi:10.1016/j.inoche.2022.109305.



**Categoria: Trabalho Completo**

## Estudo da eficiência do tratamento de impregnação por meio de resina poliuretana à base de mamona nas propriedades mecânicas da madeira *Pinus Taeda*

Carmen Luisa Barbosa Guedes<sup>1\*</sup> (PQ), Maria Gabriella Pereira De Souza<sup>2</sup> (IT), Marcos Vinício de Camargo<sup>3</sup> (PQ), \*carmen@uel.br

Departamento de Química, CCE, UEL, Londrina, PR – Brasil  
Departamento de Estruturas, CTU, UEL, Londrina, PR - Brasil

Palavras-Chave: *Pinus taeda*, impregnação, *mamona*, resina poliuretana à base de mamona.

### Introdução

A crescente demanda por madeira na construção civil e a busca por práticas sustentáveis destacam a importância do *Pinus taeda*. Embora essa espécie tenha menor resistência e durabilidade que madeiras nativas, a impregnação com resinas naturais, como o poliuretano à base de óleo de mamona, pode melhorar suas propriedades mecânicas. Enquanto as resinas sintéticas são amplamente usadas, as naturais em coníferas como o *Pinus taeda* ainda estão em desenvolvimento. Estudos iniciais indicam que essas resinas aumentam a resistência à umidade, mas mais pesquisas são necessárias para confirmar seu desempenho em aplicações estruturais.

### Resultados e discussão

As amostras de madeira foram caracterizadas segundo a norma ABNT NBR 7190 (1997) e impregnadas por dois métodos: Vácuo-Pressão, vácuo por 30 minutos, seguido de pressão de 0,8 MPa por 30 minutos. Depois, polimerização em estufa a 60°C por 48 horas e 50°C por 72 horas. Imersão, submersão em poliuretano por 3 horas, remoção do excesso de resina e cura em estufa a 60°C por 24 horas. Os testes com poliuretano à base de óleo de mamona (PUR) revelaram baixa penetração devido à alta viscosidade. A diluição não melhorou a impregnação. Apesar disso, a resina foi eficaz na impermeabilização, reduzindo a absorção de água e aumentando a durabilidade da madeira. Entretanto, o PUR não melhora a resistência mecânica, pois a penetração é superficial, e não reforça as propriedades internas da madeira.



Figura 1. Corpo de prova submetido a impregnação pelo método de imersão.

### Conclusões

Estamos revisando nossa abordagem de impregnação e buscando novas metodologias e materiais para otimizar o processo. As próximas etapas incluirão testes com diferentes técnicas para melhorar a penetração e as propriedades da madeira. A continuidade da pesquisa é essencial para desenvolver soluções eficazes para o tratamento de madeira em aplicações estruturais.

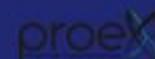
### Agradecimentos

Agradeço ao CNPq – Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico pela bolsa de estudos concedida.

### Referências e notas

- (1) ASSOCIAÇÃO BRASILEIRA DE NORMAS TÉCNICAS. NBR 7190: projetos de estruturas em madeira. Rio de Janeiro: ABNT, 2022.
- (2) Jardel Victor Raminelli; João Paulo Matiuso Moço; Larissa Queiroz Minillo; Bruna Bessa Rocha Yano, A ANALYSIS OF POLYURETHANE RESIN BASED ON MAMONE OIL AS A COATING ON WOODS SUBMITTED TO TRACTION.
- (3) AMERICAN OIL CHEMISTS' SOCIETY. Official methods and recommended practices of the American Oil Chemists' Society. 4th ed. Champaign, USA, A.O.C.S. 1990 A.O.C.S. Official method Cc 10a-25.





Categoria: Trabalho Completo

## Análise de risco ambiental na bacia hidrográfica do Rio Doce após o rompimento da barragem do Fundão em Mariana/MG

Barbara L. Kroetz<sup>1</sup> (PG), Letícia A. Bertoldo<sup>1</sup> (PG), Angelita A. Ribeiro<sup>1</sup> (PG), Cecília Sacramento<sup>1</sup> (PQ), Emilli Frachini<sup>1</sup> (PG), Taufik Abrão<sup>2</sup> (PQ), Maria J. Santos\*<sup>1</sup> (PQ) *mjyabe@gmail.com*

1 – Departamento de Química, Universidade Estadual de Londrina, PR – Brasil.

2 – Departamento de Engenharia Elétrica, Universidade Estadual de Londrina, PR – Brasil.

Palavras-Chave: Avaliação ambiental, Mobilidade de metais, Elementos potencialmente tóxicos, Mineração.

### Introdução

Em 5 de novembro de 2015, ocorreu o rompimento da barragem do Fundão em Minas Gerais<sup>1</sup>. O resíduo devastou o subdistrito de Bento Rodrigues, e contaminou a bacia do Rio Doce (BRD) até o Oceano Atlântico<sup>2</sup>. Foram identificados elementos potencialmente tóxicos (EPT), como As, Ag, Al, Ba, Cr, Cu, Cd, Co, Mn, Ni, Pb, V e Zn<sup>3</sup>. Diante do desastre, este estudo visa avaliar o risco ambiental associado à liberação do resíduo na BRD.

### Resultados e discussão

A partir da distribuição geoquímica, proposta pelo método BCR, amostras de solo (SL) e sedimento (SD) coletadas ao longo da BRD, enumeradas de 0 a 8, foram avaliados os seguintes parâmetros: Código de avaliação de risco (RAC), Fator de contaminação ( $C_f$ ), Grau de contaminação ( $C_d$ ) e Potencial risco ecológico (ER)<sup>4</sup>.

De acordo com o RAC (Figura 1), o Mn é o elemento de maior risco, de médio a muito alto, seguido pelo Zn, com risco médio, atribuído à maior fração solúvel. A análise via  $C_f$  demonstrou maior risco, associado ao enriquecimento dos EPT em todos os pontos de amostragem, quando comparados aos pontos de referência (SL). A ordem geral de  $C_f$  foi:  $Cd > Co > Ni \approx Ag > Pb > Zn \approx Cu$  (muito alto) e  $Cr > Mn > Al > As$  (moderado). Por outro lado, a avaliação pelo ER inclui a toxicidade individual, expressa pelo fator de resposta tóxica ( $t_r$ ) e segue a seguinte ordem:  $Cd > Co > Ag > Ni > Pb > Cu > As > Cr > Zn \approx Sb \approx Al \approx Mn$  (Figura 2). Dessa forma, a avaliação pelo ER depende da distribuição geoquímica, do grau de enriquecimento e do valor individual de  $t_r$ .

Uma avaliação geral dos índices demonstra relevância da distribuição geoquímica para o risco associado a Mn, Sb e Pb, do grau de enriquecimento, para Cd, seguido por Co, Ag, Ni, Pb, Zn e Cu, e o  $t_r$  para Cd, Co e Ag.

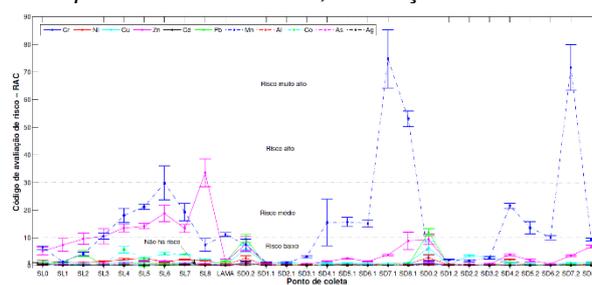


Figura 1. RAC para as amostras de SL e SD da BRD.

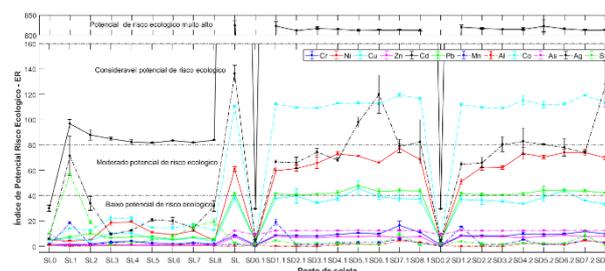


Figura 2. Índice de Potencial risco Ecológico para as amostras de SL e SD da BRD.

### Conclusões

Os índices apresentados demonstram o risco ambiental à BRD devido à liberação dos resíduos da barragem do Fundão associado à liberação de EPT, como Mn, Sb, Pb, Cd, Co, Ag, Ni, Cu e Zn. Adicionalmente, a avaliação do risco ambiental depende de três parâmetros principais: o fator de enriquecimento dos EPT, a distribuição geoquímica e a toxicidade individual. Portanto, estudos e políticas visando a remediação do resíduo e a diminuição do risco ambiental são fundamentais.

### Agradecimentos

Capex, UEL, UFRGS, LEEIMA

### Referências e notas

- (1) As, F. *et al. Sci Total Environ.* **2021**, 769, 144532.
- (2) Almeida, P. N. I. *et al. Environ. Res.* **2023**, 216, 114710.
- (3) Aguiar, V. M *et al. Reg Stud Mar Sci.* **2023**, 63, 103001.
- (4) Remeikait\_e-Nikien\_e, N. *et. al. Oceanologia*, **2018**, 60, 193-206.



Categoria: Trabalho Completo

## Preparação de polímero precursor no sistema Si—C em diferentes condições de cura

Cauan C. Lemes<sup>1</sup>(GD)\*, Karen L. B. Santos<sup>1</sup>(PG), César R. T. Tarley<sup>1</sup>(PQ), Mariana G. Segatelli<sup>1</sup>(PQ)

lms.cauancarvalho@uel.br

<sup>1</sup> Departamento de Química, Universidade Estadual de Londrina. PR - Brasil.

Palavras-Chave: SiC, Hidrossililação, Polímero Precursor, Caracterização.

### Introdução

As cerâmicas derivadas de polímeros (PDC) têm propriedades superiores às cerâmicas tradicionais, como alta dureza, resistências mecânica e térmica e resistência ao desgaste e à corrosão [1]. O carbeto de silício (SiC) é um material promissor conhecido por sua alta resistência e como dispositivo eletrônico de potência [2]. Neste estudo, o polímero foi obtido através da reação de hidrossililação, na qual um átomo de silício, proveniente de um grupo Si—H, é adicionado a uma ligação insaturada de um composto orgânico. A reação ocorreu entre o difenilsilano e divinilbenzeno e foi catalisada por platina sob atmosfera inerte de N<sub>2</sub>. A mistura foi colocada em banho de glicerina a 100 °C até ponto de gel e dividida em duas porções. A primeira foi para o processo de cura na capela durante 24 horas e depois pós-cura na estufa a 100 °C por 5 horas. Já a segunda porção passou apenas pelo processo de pós-cura na estufa a 100 °C por 5 horas. Visando as propriedades das PDCs e as propriedades do SiC, este trabalho buscou obter um polímero com maior grau de reticulação, submetendo-o às técnicas de caracterização FT-IR e TGA.

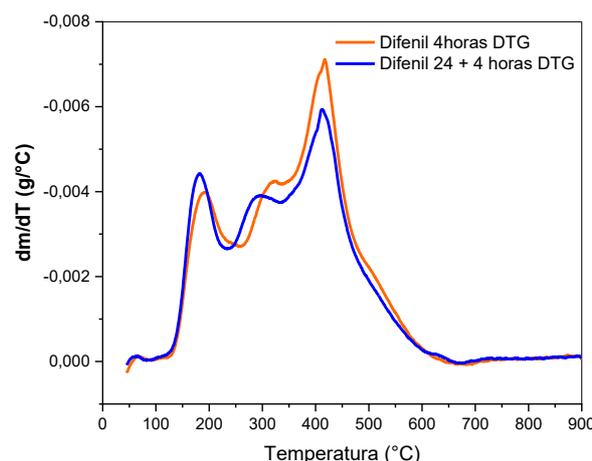
### Resultados e discussão

**Tabela 1.** Porcentagem relativa das ligações Si-H obtidas por FT-IR do difenilsilano e do polímero nas diferentes condições de cura.

Material	vSi-H	vSi-Ph	vSi-H/ vSi-Ph	Porcentagem de ligações Si—H disponíveis (%)
Difenilsilano	0,56	0,39	1,41	100
Polímero pós-cura	0,054	0,09	0,60	43
Polímero cura + pós-cura	0,02	0,05	0,48	34

A porcentagem de ligações Si—H disponíveis revela a efetividade da hidrossililação, sendo a menor porcentagem referente ao processo mais eficaz. Assim, conclui-se que o polímero obtido do processo de cura seguido pela pós-cura apresentou uma melhor reticulação.

**Figura 1.** DTG do precursor polimérico em diferentes condições de cura.



O pico associado à degradação da estrutura do polímero é menor no processo de cura mais longo. Isso indica que esse material é mais estável termicamente. É possível concluir, então, que o polímero com processo de cura e pós-cura obteve melhor reticulação.

### Conclusões

O polímero que passou pela etapa de cura e pós-cura apresentou maior grau de reticulação.

### Agradecimentos

Agradeço ao CNPq e a CAPES.

### Referências

- (1) IOSIPOV, A A. et al. **Journal of Manufacturing Processes**, v. 73, p. 316-325 (2022).
- (2) BROOK, R. J.; **Concise Encyclopedia of Advanced Ceramic Materials**, Pergamon Press, 1991.



Categoria: Trabalho Completo

## Caracterização de cerâmicas de carvão de silício (SiC) ricas em carbono em diferentes temperaturas de pirólise

Karen L. B. Santos<sup>1</sup>(PG)\*, Cauan de C. Lemes<sup>1</sup>(GD), César R. T. Tarley<sup>1</sup>(PQ), Mariana G. Segatelli<sup>1</sup>(PQ)

karen.laissa.balbino@uel.br

<sup>1</sup> Departamento de Química, Universidade Estadual de Londrina. PR - Brasil.

Palavras-Chave: SiC, Sensor de SiC, Fase Condutora.

### Introdução

O carvão de silício (SiC) é um material amplamente utilizado na produção de desenvolvimento de compostos de alta resistência e como dispositivo eletrônico de potência [1]. O SiC tem sido utilizado como composto na fabricação de eletrodos modificados para determinação de diferentes analitos [2,3]. Neste trabalho, além das ligações Si-C, a microestrutura contém uma fase residual de carbono incorporada na matriz. Com base nessas características, este estudo visa obter cerâmicas de SiC a partir de precursores poliméricos ricos em carbono em diferentes temperaturas de pirólise e avaliar seu potencial como um sensor eletroquímico a partir de medidas voltamétricas. O precursor polimérico foi preparado por reação de hidrossililação entre 50% (m/m) de difenilsilano e 50% (m/m) de divinilbenzeno, após a obtenção deste polímero foram realizadas pirólises em temperaturas de 1000°C, 1300°C e 1500°C com tempos de recozimento de 1,3 e 5 horas para a cerâmica de maior temperatura, sob atmosfera de Ar. Resultando nas respectivas cerâmicas de SiC, sendo submetidas às técnicas de FT-IR e DRX. Foram preparados eletrodos de pasta com 80% (m/m) do material e 20% (m/m) de Nujol para registrar o comportamento eletroquímico da sonda ferri-ferro nos eletrodos de cerâmica e de carbono vítreo (CV) por voltametria cíclica.

### Resultados e discussão

Os espectros de FT-IR das amostras obtidas mostraram vibrações  $\nu_{\text{Si-CH}_3}$   $\text{cm}^{-1}$  e  $\nu_{\text{Si-CH}_2\text{-CH}_2\text{-fenil}}$ . Não foi possível observar a banda da ligação Si-H, logo todos os hidrogênios foram substituídos ou retirados da amostra durante o processo de pirólise.

Nos difratogramas de raio-X as cerâmicas pirolisadas a 1300 e 1500 °C apresentaram picos específicos de carbono e de SiC em 35,5° (111). As cerâmicas que foram pirolisadas a 1500°C

apresentaram picos característicos de SiC também em 60° (220) e 72° (311), confirmando assim a cristalização mais eficaz da amostra em temperatura mais alta. As cerâmicas de 1000 °C não apresentaram picos característicos de SiC.

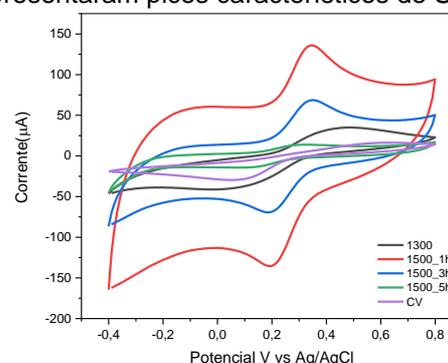


Figura 1. Voltamogramas cíclicos referentes a 2 mmol L<sup>-1</sup> de K<sub>4</sub>[Fe(CN)<sub>6</sub>], em KCl 1,0 mol L<sup>-1</sup>, pH 7,0 e velocidade de varredura de 50 mVs<sup>-1</sup>, em eletrodos de carbono vítreo e cerâmica de SiC

Os eletrodos de SiC apresentaram melhor resposta para a eletrooxidação do par Fe<sup>2+/3+</sup> em comparação ao eletrodo de GC, esse resultado foi corroborado com os valores de área eletroativa (Ae). A 1500 °C com recozimento de 1 hora, a Ae foi mais alta, indicando que este material é promissor para determinar analitos com diferentes interesses.

### Conclusões

As cerâmicas de SiC fabricadas em temperaturas mais elevadas são promissoras para determinação de analitos com diferentes interesses.

### Agradecimentos

CNPq e CAPES.

### Referências

- (1) IOSIPOV, A. A. et al. *Journal of Manufacturing Processes*, v. 73, p. 316-325 (2022).
- (2) PETRIE, C. M. et al. *Journal of Nuclear Materials*, v. 552, p. 153012 (2021).
- (3) PALM, I. et al. *ACS Applied Energy Materials*, v. 5, n. 3, p. 2949-2958 (2022).



**Categoria: Trabalho Completo**

## Desenvolvimento de adsorventes multifuncionais e processo de recuperação por fotocatalise

Letícia Lakatos<sup>1</sup> (IC), Eduardo Custódio Vilas Boas<sup>1</sup> (PG), Renato S. G. de Oliveira<sup>1</sup> (IC), Odair P. Ferreira<sup>1\*</sup> (PQ). [opferreira@uel.br](mailto:opferreira@uel.br)

1 - Departamento de Química, Universidade Estadual de Londrina, PR-Brasil.

Palavras-Chave: Biomassa, tratamento térmico, carbonização hidrotérmica, adsorção, nanocompósitos

### Introdução

A produção de efluentes aquosos é uma consequência das atividades industriais. Estes podem conter substâncias potencialmente tóxicas que se não tratados devidamente, antes de serem descartados ao meio ambiente, podem comprometer a fauna e flora em questão.<sup>1</sup> Diante disso, o desenvolvimento de métodos de tratamento eficazes e sustentáveis é uma questão importante. Dentre os métodos utilizados para o tratamento de efluentes aquosos, a adsorção vem obtendo grande destaque; contudo, a adsorção gera poluição secundária decorrente do poluente permanecer na superfície do adsorvente.<sup>2</sup> Deste modo, faz-se necessário o desenvolvimento de métodos de recuperação e reuso dos adsorventes. Assim, o objetivo deste Trabalho será o desenvolvimento de nanocompósitos TiO<sub>2</sub>@carvão para uso como adsorventes e, posterior, recuperação deste por meio de fotocatalise utilizando luz UV-visível.

### Resultados e discussão

Os adsorventes multifuncionais foram produzidos a partir da carbonização hidrotérmica de bagaço de cana-de-açúcar, tendo a fase inorgânica semicondutora em suspensão, e tratados termicamente em temperaturas de 400 a 800 °C, visando obter melhoras em sua capacidade de adsorção. Para avaliar as características estruturais e composicionais dos nanocompósitos após a carbonização hidrotérmica, realizou-se medidas de espectroscopia na região do infravermelho (FTIR), onde, ao se comparar os espectros obtidos da biomassa e nanocompósitos, demonstrou a desidratação da biomassa e a presença de TiO<sub>2</sub>, além disso, os espectros de duas amostras de carvão hidrotérmico de reações sucessivas sugere excelente reprodutibilidade composicional e estrutural. Os nanocompósitos também foram analisados em um espectrômetro UV-VIS por reflectância difusa no intervalo de 200 a 800 nm, onde observou-se que o TiO<sub>2</sub>, que absorve apenas na luz UV, quando encapsulado

no carvão hidrotérmico obteve um aumento exponencial na absorção da luz visível. Adicionalmente, mediu-se às isotermas de adsorção-dessorção de nitrogênio 77K, obtendo-se a área superficial específica (pelo método BET), diâmetro médio de poros e volume de poros (pelo método BJH) dos (nano)compósitos e carvão hidrotérmico (material carbonáceo sem a fase TiO<sub>2</sub>). Pode-se observar queda significativa do diâmetro de poros do carvão hidrotérmico para o (nano)compósito, além de baixa área superficial específica e baixo volume de poros para ambos. Após o tratamento térmico, realizou-se o teste de adsorção com o corante azul de metileno (catiônico). Observou-se que o carvão hidrotérmico e o nanocompósito obtiveram maior capacidade de adsorção comparada aos precursores e ao carvão hidrotérmico tratado a 400 °C. Já para o corante azul de remazol (aniônico), a adsorção foi muito pouco significativa, por volta de 1 mg/g. Ensaio dos materiais tratados a outras temperaturas ainda serão realizados para verificar se o tratamento térmico do carvão hidrotérmico e do (nano)compósito a temperaturas superiores intensificarão as suas capacidades de adsorção para os dois corantes

### Conclusões

Este projeto tem como enfoque a produção de adsorventes multifuncionais para tratamento de efluentes contendo corante, assim como, a recuperação dos mesmos por meio da degradação dos compostos poluentes adsorvidos usando fotocatalise com o intuito de reutiliza-los em novos ciclos de adsorção.

### Agradecimentos

Ao CNPq pela bolsa concedida e ao Laboratório de Materiais Funcionais Avançados (LaMFA).

### Referências e notas

- (1) Al-Tohamy et al. *Ecotoxicology and Environmental Safety*, v. 231, 113160, 2022.
- (2) Katheresan et al. v. 6, p. 4676-4697, 2018.



Categoria: Trabalho Completo

## Adsorventes Multifuncionais $\text{TiO}_2$ @carvão ativado e Recuperação por Fotocatálise

Renato S. G. de Oliveira<sup>1</sup> (IT), Eduardo C. V. Boas<sup>1</sup> (PG) Letícia Lakatos<sup>1</sup> (IT), Odair P. Ferreira<sup>1</sup> (PQ)\*.  
*opferreira@uel.br.*

<sup>1</sup> - Departamento de Química, Universidade Estadual de Londrina, PR - Brasil.

Palavras-Chave: Remediação Ambiental, Nanotecnologia, Carbonização Hidrotérmica, Adsorção, Fotocatálise.

### Introdução

A grande geração de efluentes industriais desafia inovações contínuas em tratamentos para remediação ambiental. A presença de corantes como contaminantes em determinados efluentes gera impactos ambientais negativos ao corpo receptor, como rios e lagos, se descartados sem tratamentos prévios. O tratamento de efluentes por meio da adsorção utilizando carvão ativado é uma opção eficiente, no entanto, geram problemas de poluição secundária decorrente na presença do poluente na superfície do adsorvente.<sup>1</sup>

O trabalho propõe o desenvolvimento de um adsorvente multifuncional a partir de biomassa advinda do agronegócio; e uma fase semicondutora, que irá atuar na recuperação do adsorvente por fotocatálise.<sup>2</sup>

### Resultados e discussão

A preparação do nanocompósito foi realizada com bagaço de cana-de-açúcar, como biomassa, e  $\text{TiO}_2$  anatase, como fase semicondutora, em um processo de carbonização hidrotérmica a  $215 \pm 15$  °C por 12 h. Após lavagem com água ultrapura e processo de secagem, o nanocompósito preparado foi denominado  $\text{TiO}_2$ @CH,23% e o carvão hidrotérmico sem  $\text{TiO}_2$  como CHBC.

As amostras foram caracterizadas quanto à sua estrutura, composição, morfologia, tamanho de partícula, textura e propriedades ópticas. A Figura 1 traz imagens de microscopia eletrônica de varredura (SEM) para amostras de CHBC e  $\text{TiO}_2$ @CH,23%. As imagens SEM indicam que o  $\text{TiO}_2$  não altera de forma significativa a morfologia das partículas carbonáceas e sugere distribuição uniforme do  $\text{TiO}_2$  na amostra.

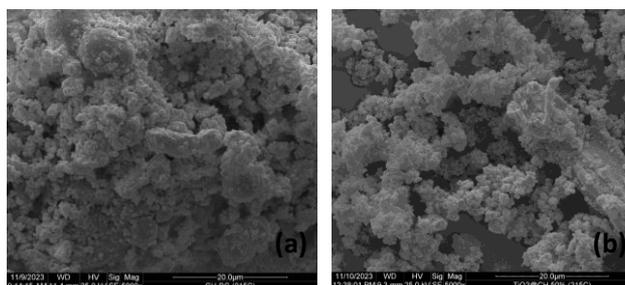


Figura 1. Imagens SEM para as amostras (a) CHBC e (b)  $\text{TiO}_2$ @CH,23% .

Os carvões foram submetidos a ativação termoquímica com KOH na proporção 1:4 (m:m), em forno tubular a 700 °C sob fluxo de argônio.

Ensaio de adsorção foram realizados com os corantes azul de metileno (catiônico) (MB) e azul brilhante de remazol R (aniônico) (RB) em soluções de 25 e 50 mg L<sup>-1</sup>, respectivamente, para as amostras de CHBC,  $\text{TiO}_2$ @CH,23%, biomassa e  $\text{TiO}_2$  anatase. A amostra  $\text{TiO}_2$ @CH,23% apresentou melhor capacidade de adsorção para o MB, enquanto que para o RB, para todas as amostras, a capacidade de adsorção foi cerca de 1,0 mg g<sub>adsorvente</sub><sup>-1</sup>.

O adsorvente será submetido a uma etapa de fotocatálise a fim de degradar o corante adsorvido pela ação do  $\text{TiO}_2$  como fotocatalisador e, com isso, espera-se que ocorra a recuperação do adsorvente para novos ciclos de adsorção.

### Conclusões

O adsorvente proposto gera vantagens ao fazer uso de biomassa como matéria-prima, agregando valor a subprodutos do agronegócio, além de ser uma alternativa para o combate da poluição secundária e, com isso, pode substituir adsorventes convencionais como o carvão ativado no tratamento de efluentes.

### Agradecimentos

CNPq, FINEP, LaMFA e UEL

### Referências e notas

- (1) Anbaya, T. G. et al. *Int. J. Environ. Sci. Technol.* 2021. 18, 3273–3294.
- (2) Vieira, L. H. S. et al. *Carbon.* 2020, 161, 758.



Categoria: Revisão

## Materiais carbonáceos para dispositivos de armazenamento de energia

Pedro R. D. Pereira<sup>1</sup> (PG), Luiz Henrique Dall'Antonia<sup>1</sup> (PQ), Odair P. Ferreira<sup>1</sup> (PQ), [opferreira@uel.br](mailto:opferreira@uel.br)

<sup>1</sup> - Departamento de Química, Universidade Estadual de Londrina, PR - Brasil.

Palavras-Chave: (Biomassa, Supercapacitores, Armazenamento de energia).

### Introdução

A demanda pela portabilidade cada vez maior de dispositivos eletrônicos é a força motriz para o desenvolvimento de soluções em energia de alta potência. O mais comum destes dispositivos é a bateria. Por outro lado, supercapacitores são dispositivos com capacidade de armazenar grande quantidade de energia em curto período e liberá-la de forma igualmente rápida. Diferentes materiais podem apresentar caráter capacitivo, como, por exemplo, os materiais carbonáceos, que além de contribuir na parte energética, também auxiliam na parte de consumo e desenvolvimento sustentável, pois podem ser preparados a partir de biomassas tais como subprodutos do agronegócio. Os materiais carbonáceos derivados de biomassa têm se demonstrado promissores devido à suas propriedades já conhecidas como elevada área superficial e alta porosidade contribuindo de forma significativa para uma maior área eletroquimicamente ativa. Além disso, do ponto de vista ambiental e econômico, os produtos gerados podem agregar valor aos subprodutos do agronegócio e reduzir o uso dos derivados de petróleo<sup>1</sup>.

### Probabilidades

Um fator significativo nas respostas a serem observadas nas propriedades dos materiais carbonáceos é a escolha da matéria-prima. Biomassas advindas do agronegócio, por exemplo, possuem características composicionais que dependem do local onde foram cultivadas e das respectivas espécies que são oriundas. Desta forma, afetará a composição, morfologia, tamanho de partículas, área superficial dos (nano)materiais carbonáceos, por exemplo. Além disso, as distintas rotas de preparação possibilitam produzir diferentes materiais tais como, grafeno, nanotubos de carbono, aerogel, biocarvões, entre outros. No tocante aos supercapacitores, materiais carbonáceos usados nestes dispositivos podem ser preparados por diferentes métodos, tais como,

carbonização hidrotérmica, deposição química por vapor, pirólise etc. Cada método pode levar a alterações nas propriedades físico-químicas e, conseqüentemente, impactar no comportamento capacitivo destes nanomateriais.

Ainda, os materiais carbonáceos podem apresentar múltiplas estruturas que permitem realizar estudos comparativos a fim de determinar qual delas apresentará o melhor desempenho, por exemplo, quanto a capacitância: nanotubos de parede única tem capacitância por volta de 42.2 F g<sup>-1</sup>, por outro lado, nanotubos de parede múltipla possuem 15.34 F cm<sup>-3</sup>, uma diferença substancial entre os valores<sup>2</sup>.

### Conclusões

Existem múltiplas maneiras de se engenhar supercapacitores para o armazenamento de energia. Por isso, o planejamento da parte experimental de como serão preparados os constituintes ativos torna-se uma etapa fundamental, pois permite entender como processos métodos e precursores (matérias-primas) poderão afetar as propriedades capacitivas.

### Agradecimentos

Capes, CNPq, FINEP, LaMFA

### Referências e notas

1. Dhandapani, E.; Thangarasu, S.; Ramesh, S.; Ramesh, K.; Vasudevan, R.; Duraisamy, N.; *J Energy Storage* **2022**, *52*, 104937. [<https://doi.org/10.1016/j.est.2022.104937>]

2. Zhai, Z.; Zhang, L.; Du, T.; Ren, B.; Xu, Y.; Wang, S.; Miao, J.; Liu, Z.; *Mater Des* **2022**, *221*, 111017. [<https://doi.org/10.1016/J.MATDES.2022.111017>]



Categoria: Projeto

## Ancoragem de nanopartículas de macro e micronutrientes em (nano)biocarvão para aprimorar a fertilidade do solo.

Antonio Casaroto<sup>1</sup> (PG), Odair Pastor Ferreira<sup>1</sup> (PQ)\*

opferreira@uel.br

<sup>1</sup> - Departamento de Química, Universidade Estadual de Londrina, PR - Brasil.

Palavras-Chave: Biocarvão, Funcionalização, Sustentabilidade, Agricultura.

### Introdução

O presente trabalho tem como objetivo a síntese e caracterização de (nano)biocarvões funcionalizados com (nano)partículas de macro e micronutrientes. A ancoragem dessas (nano)partículas à matriz carbonácea do biocarvão visa conferir novas propriedades e funcionalidades aos materiais, como maior capacidade de retenção e liberação controlada de nutrientes. Espera-se que esses materiais inovadores contribuam para o desenvolvimento de fertilizantes inteligentes e mais eficientes.

### Metodologia

Através da carbonização de biomassas residuais, como o bagaço de cana-de-açúcar, obtém-se o biocarvão. Esse material poroso será submetido a um tratamento químico para aumentar capacidade de adsorção. Após a fixação (ou ancoragem) de nutrientes como fósforo e cobre, o biocarvão funcionalizado será caracterizado por diversas técnicas, como DRX, FTIR e SEM, adsorção de N<sub>2</sub>, para avaliar sua estrutura, composição, morfologia e textura. Além disso, testes de lixiviação serão realizados para avaliar a liberação gradual dos nutrientes ancorados no biocarvão quando em contato com água ou soluções (simuladas) do solo.

### Resultados esperados

Através deste projeto, buscaremos otimizar a ancoragem de nanopartículas de estruvita e óxido de cobre em (nano)biocarvões, visando aprimorar suas propriedades e expandir suas aplicações em diversos setores. Cientificamente, o objetivo será compreender os mecanismos de interação entre as nanopartículas e a matriz carbonácea,

otimizando a funcionalização da superfície do biocarvão. Buscaremos, ainda, correlacionar a natureza das nanopartículas e as condições de funcionalização com as propriedades finais do material tais como natureza da superfície, área superficial e volume de poros e estabilidade térmica. Essa compreensão profunda nos permitirá projetar materiais com propriedades específicas para cada aplicação desejada.

### Considerações finais

O projeto proposto representa um avanço significativo na área de nanotecnologia aplicada à agricultura, com o objetivo de desenvolver fertilizantes inteligentes baseados em (nano)biocarvão funcionalizados com (nano)partículas de macros e micro nutrientes. Ao combinar as propriedades únicas do (nano)biocarvão com a alta reatividade das nanopartículas, espera-se obter materiais com capacidade de retenção e liberação controlada de nutrientes, otimizando a nutrição das plantas e promovendo a sustentabilidade dos sistemas agrícolas.

### Agradecimentos

UEL, PPGQ-UEL, CAPES e LAMFA

### Referências e notas

- (1) Sani, M. N. H. et al. Waste-derived nanobiochar: A new avenue towards sustainable agriculture, environment, and circular bioeconomy. *STE* (2023), 905, 166881.
- (2) Akhil, D. et al. Production, characterization, activation and environmental applications of engineered biochar: a review. *Environ. Chem. Lett.* 2021, 19, 2261–2297



Categoria: Projeto

## NANOESTRUTURAS DE $\text{BaSnO}_3$ PARA APLICAÇÕES EM FOTOCATÁLISE

Bruno Rodrigues (PG)<sup>1\*</sup>, Tânia Inuma (PG)<sup>1</sup> e Felipe de Almeida La Porta (PQ)<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup> Departamento de Química, Universidade Estadual de Londrina, Pr - Brasil.

<sup>2</sup> Departamento de Química, Universidade Tecnológica Federal do Paraná, Pr - Brasil.

\* [bruno.rafael.rodrigues@uel.br](mailto:bruno.rafael.rodrigues@uel.br)

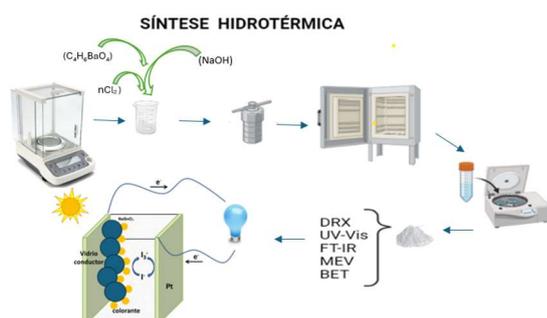
Palavras-Chave: Fotocatálise,  $\text{BaSnO}_3$ , Nanomateriais, Sustentabilidade, Optoeletrônicos.

### Introdução

O estannato de bário ( $\text{BaSnO}_3$ ) é um semicondutor promissor com estrutura perovskita que apresenta um amplo bandgap ( $\sim 3,1$  eV), alta mobilidade de elétrons e excelente estabilidade [1,2]. Essas características o tornam uma alternativa interessante ao dióxido de titânio ( $\text{TiO}_2$ ) em aplicações fotocatalíticas.

Neste trabalho, investigamos a síntese hidrotérmica de nanoestruturas de  $\text{BaSnO}_3$  com diferentes morfologias, visando otimizar sua atividade na degradação do azul de metileno sob irradiação solar e UV. Acreditamos que este estudo contribuirá para o desenvolvimento de fotocatalisadores de  $\text{BaSnO}_3$  mais eficientes para aplicações ambientais emergentes.

### Metodologia



### Resultados esperados

Este projeto pretende sintetizar nanoestruturas de  $\text{BaSnO}_3$  altamente cristalinas e com diferentes morfologias por meio do método hidrotérmico. Para atingir esse objetivo, serão investigados diversos parâmetros de síntese, tais como: solvente, temperatura, concentração dos reagentes, surfactantes, pH da solução e assim por

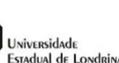
diante. A variação sistemática desses parâmetros permitirá a obtenção de nanoestruturas de  $\text{BaSnO}_3$  com diferentes morfologias, que serão caracterizadas e avaliadas quanto às suas propriedades físico-químicas e aplicações em fotocatalise.

Em seguida, pretende-se otimizar as propriedades fotocatalíticas do  $\text{BaSnO}_3$ , a partir do estudo de fatores como intensidade da luz (solar ou UV), concentração do catalisador, pH da solução e presença de interferentes que afetam a eficiência de degradação. Além disso, pretendemos comparar a eficiência das nanoestruturas de  $\text{BaSnO}_3$  com diferentes morfologias com o  $\text{TiO}_2$  (comercial), um fotocatalisador tradicional, nas mesmas condições experimentais, para avaliar o desempenho do novo material.

### Considerações finais

Este projeto visa desenvolver novos fotocatalisadores à base de  $\text{BaSnO}_3$  para aplicações no tratamento de efluentes com características diversas. A versatilidade na obtenção de nanoestruturas de  $\text{BaSnO}_3$  com diferentes morfologias, aliada à simplicidade do método de fabricação, torna este material uma alternativa promissora para enfrentar os desafios ambientais atuais.

### Agradecimentos



### Referências e notas

- 1) E. Raphael, M. N. Silva, R. Szostak, M. A. Schiavon, and A. F. Nogueira, "CÉLULAS SOLARES DE PEROVSKITAS: UMA NOVA TECNOLOGIA EMERGENTE," Jan. 01, 2018, Sociedade Brasileira de Química. doi: 10.21577/0100-4042.20170127.



Categoria: Projeto

## Avaliação das propriedades estruturais, composicionais e do tamanho de partícula no desempenho eletroquímico de nanobiocarvões

Eduardo C. Vilas Boas (PG)<sup>1</sup>, César R. T. Tarley(PQ)<sup>1</sup>, Odair P. Ferreira(PQ)<sup>1\*</sup>

opferreira@uel.br

1 - Departamento de Química, Universidade Estadual de Londrina, PR - Brasil.

Palavras-Chave: Biomassa, Bagaço de cana-de-açúcar, Materiais carbonáceos, Sensor eletroquímico.

### Introdução

Este projeto traz a hipótese de que nanomateriais carbonáceos obtidos a partir de biomassa apresentarão melhor desempenho eletroquímico quando apresentarem maior ordem estrutural e menor tamanho de partícula.

Na literatura não são reportados trabalhos que apresentem uma relação clara da estrutura, composição, tamanho de partícula de nanobiocarvões e sua resposta eletroquímica como sensores. Contudo, podem ser encontrados trabalhos, por exemplo, que comparam a respostas eletroquímicas de materiais carbonáceos com diferentes tamanhos de partícula como sensores <sup>(1)</sup>, e, as propriedades eletroquímicas de materiais preparados por diferentes biomassas, apresentando estruturas e composição distintas <sup>(2)</sup>.

Com o objetivo de compreender o comportamento eletroquímico dos (nano)materiais carbonáceos obtidos a partir de biomassa, será conduzido um estudo utilizando diferentes metodologias de preparação e matérias-primas (precursores), ou seja, este estudo buscará elucidar as relações entre estrutura de (nano)biocarvões e suas propriedades eletroquímicas.

### Metodologia

Os precursores utilizados serão bagaço de cana-de-açúcar e celulose microcristalina comercial. Os materiais serão preparados por carbonização hidrotérmica a 200 °C durante 12h; por pirólise, em atmosfera de argônio a 400, 700, 1000 e 1300 °C durante 1 h; e tratamento térmico em atmosfera com baixo teor de oxigênio, a 400 e 500 °C durante 0,5 e 1 h. Após o preparo será feita a moagem, em moinho de bolas de alta energia (Pulverisette 6 – Fritsch). Para otimizar a moagem quanto ao menor tamanho de partícula será feito um planejamento experimental 2<sup>3</sup> com ponto central, avaliando os seguintes parâmetros: tamanho das esferas de

moagem, tempo de moagem e velocidade de rotação do moinho. Os (nano)materiais carbonáceos serão caracterizados por: espalhamento dinâmico de luz (DLS); difração de raios X (DRX), espectroscopia no infravermelho por transformada de Fourier (FTIR) e espectroscopia Raman; análise elementar via CHNS/O e por espectroscopia de fotoelétrons excitados por raios X (XPS), microscopia eletrônica de varredura (SEM) e microscopia eletrônica de transmissão (MET). Como caracterizações eletroquímicas, serão utilizadas as técnicas de voltametria cíclica (VC) e espectroscopia de impedância eletroquímica (EIE).

### Resultados esperados

Do ponto de vista científico, dar racionalidade para o controle da relação composição-estrutura-propriedades eletroquímicas, assim como o efeito do tamanho de partícula sobre tais propriedades; Do ponto de vista tecnológico, o entendimento da relação supramencionada indicará as melhores aplicações para os nanobiocarvões como, por exemplo, sensores e/ou capacitores;

### Considerações finais

A utilização de matérias-primas renováveis, como biomassas, contribui para a sustentabilidade dos processos produtivos minimizando impactos ambientais causados pelo seu manejo não adequado. Além disso, pode agregar valor ao material precursor. Ainda, compreender o comportamento dos materiais carbonáceos obtidos a partir de biomassa influenciará decisivamente na tomada de decisão para suas respectivas aplicações.

### Agradecimentos

CAPES, CNPq, FINEP e LaMFA

### Referências e notas

- (1) Ferlazzo et. al., Journal of Electroanalytical Chemistry 928 (2023) 117071.
- (2) Zhang et. al., International Journal of Electrochemical Science 18 (2023) 100190.



Categoria: Projeto

## Desenvolvimento de nanopartículas de $ZnSnO_3$ para aplicações fotocatalíticas e biomédicas

Gabriela A. Veloso<sup>1</sup> (PG)\*, Felipe A. La Porta<sup>2</sup> (PQ). gabriela.assis@uel.br

1- Departamento de Química, Universidade Estadual de Londrina, PR - Brasil.

2- Departamento de Química, Universidade Tecnológica Federal do Paraná, PR - Brasil

Palavras-Chave: Fotocatálise, Estanato de Zinco, Nanopartículas, Perovskita

### Introdução

O estanato de zinco ( $ZnSnO_3$ ) é um material fotocatalítico promissor com potencial aplicação em diversas áreas, como remediação ambiental, produção de energia e na biomedicina. O  $ZnSnO_3$  é um óxido ternário com estrutura do tipo perovskita, observada na Figura 1. Tem despertado um grande interesse científico devido às suas excelentes propriedades físico-químicas para aplicações em fotocatálise e biomédicas<sup>1</sup>. Com um band gap direto (aproximadamente 3.52 eV) adequado para a absorção de luz no ultravioleta-visível (UV-VIS), alta área superficial e estabilidade química, o  $ZnSnO_3$  apresenta potencial para diversas tecnologias emergentes<sup>2</sup>. Além disso, os óxidos de zinco-estanho exibem excelente transparência, boa condutividade, baixo custo, boa estabilidade térmica e química e não toxicidade<sup>3</sup>. Este projeto propõe sintetizar o  $ZnSnO_3$  pelo método hidrosolvotérmico para aplicações fototérmicas e fotocatalíticas, objetivando obter propriedades fotocatalíticas superiores em comparação com os óxidos binários ( $ZnO$  e  $SnO_2$ ).

### Metodologia

Partículas de  $ZnSnO_3$  serão obtidas pelo método hidrosolvotérmico assistido por microondas, utilizando precursores nitrato de zinco ( $Zn(NO_3)_2$ ) e cloreto de estanho ( $SnCl_4$ ) sob aquecimento a 140°C por 2 horas e posterior resfriamento pelo período de 1 hora, até temperatura de 30°C.

### Resultados esperados

Espera-se obter nanocristais de  $ZnSnO_3$  em tempos de reação reduzidos, baixas temperaturas e alta pureza. Além disto espera-se obter uma boa

avaliação da eficiência de conversão fototérmica e de fotocatálise do óxido, bem como avaliar os parâmetros estruturais, e as fases presentes nas amostras preparadas, além de obter as bandas eletrônicas e as medidas de band gap para o material alvo.

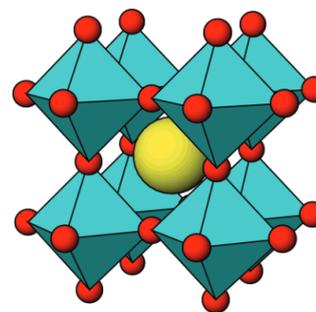


Figura 1. Estrutura perovskita cúbica ideal para  $ABO_3$ <sup>4</sup>.

### Considerações finais

Neste projeto buscamos desenvolver  $ZnSnO_3$  com estrutura perovskita, com o objetivo de aprofundar os estudos fotocatalíticos do material, investigando sua estrutura, morfologia, assim como medidas de energia de “gap”.

### Agradecimentos



### Referências e notas

- (1) Guo R, Tian R, Shi D, Li H, Liu H. S-Doped  $ZnSnO_3$  Nanoparticles with narrow band gaps for photocatalytic wastewater treatment. *ACS Applied Nano Materials*. **2020**,2(12):7755-65.
- (2) Gao, S., Wu, C., Zhang, Y., & Li, H. Dielectric regulation of high-graphitized fine ash wrapped cube-like  $ZnSnO_3$  composites with boosted microwave absorption performance. *Ceramics International*, **2021**, 47(4), 4994-5002.
- (3) Acharya, R., Zhang, Y.Q. and Cao, X.A. Characterization of zinc-tin-oxide films deposited by thermal co-evaporation. *Thin Solid Films*, **2012**, 520(19), pp.6130-6133.
- (4) Kubacka, A.; Fernandez-Garcia, M.; Colon, G.. Advanced nanoarchitectures for solar photocatalytic applications. *Chemical reviews*, **2012**, v. 112, n. 3, p. 1555-1614.



Categoria: Trabalho Completo

## Abordagem *in silico* visando a identificação de potenciais inibidores da arginase de *Leishmania amazonensis*

João G. A. Cavalcanti (GD)<sup>2</sup>, Mariana L. Silva (PG)<sup>1</sup>, Kaio M. S. Silva (PQ)<sup>1</sup>, Ana C. R. Gimenes (PG)<sup>1</sup>, Marcelle L. F. Bispo (PQ)<sup>1\*</sup>. mlfbispo@uel.br.

<sup>1</sup> - Departamento de Química, Universidade Estadual de Londrina, PR - Brasil.

<sup>1</sup> - Departamento de Farmácia, Universidade Estadual de Londrina, PR - Brasil.

Palavras-Chave: *Leishmania* spp, Docking molecular, Modelagem molecular, ADMET.

### Introdução

As leishmanioses abrangem um grupo de doenças negligenciadas causadas por mais de 20 espécies do gênero *Leishmania* spp, que afetam 1 milhão de pessoas anualmente<sup>1</sup>. Atualmente, os tratamentos para tais doenças está disponível no Sistema Único de Saúde, mas estes devem ser administrados via parenteral, dificultando o acesso para comunidades carentes<sup>2</sup>. Além de apresentarem efeitos adversos, podendo levar a hospitalização do paciente.<sup>2</sup> Dessa forma, há a necessidade de novas alternativas terapêuticas acessíveis e que promovam qualidade de vida ao paciente. Para isso, estratégias triagem virtual destacam-se pela possibilidade de explorar possíveis ligantes em alvos biológicos com um menor custo e tempo, otimizando a pré-seleção de compostos possivelmente bioativos<sup>3</sup>. Assim, este trabalho objetiva realizar uma triagem virtual utilizando moléculas da quimioteca do Laboratório de Síntese de Moléculas Medicinais (LaSMMed) para identificar possíveis inibidores da enzima arginase de *L. amazonensis* (LaARG), a qual é vital para a sobrevivência e consolidação do parasito.

### Resultados e discussão

A arginase é uma metaloenzima responsável pela conversão de L-arginina em L-ornitina e ureia, gerando assim poliaminas, compostos importantes para a sobrevivência do parasito<sup>4,5</sup>. A partir do programa MODELLER 10.1 foi possível obter o modelo 3D da enzima LaARG por meio de homologia, utilizando como molde a arginase da *L. mexicana* (PDB: 4ITY; 1.8 Å), visto que compartilham 95,4% de identidade em suas estruturas primárias. Em seguida, a estrutura foi submetida a protocolos de validação. Assim, no programa PROCHECK obteve-se o gráfico de Ramachandran, que demonstrou que todos os aminoácidos se encontravam fora de regiões não permitidas, apresentando uma confiabilidade de 100%<sup>6</sup>. Ainda, pelo score Z, obtido no site ProSA, obteve-se um valor de -8,37 para estrutura 3D,

sendo que são necessários valores abaixo de -6 para validação<sup>6</sup>. Dessa forma, a estrutura de LaARG obtida estava apta para a triagem por *docking molecular*. Utilizando-se do GOLD (v. 2020.3.0), realizou-se o *docking* das moléculas da quimioteca do LaSMMed nas funções de pontuação ASP, ChemPLP, GoldScore, ChemScore. A partir dos valores de *fitness score* (FS) obtidos as moléculas foram ranqueadas por três metodologias de validação: média, votação e escala<sup>7</sup>, resultando na seleção de quatro estruturas (indóis: LMed-27, LMed-36; tiazolidinonas: (R/S)-LMed-47) (Figura 1). Posteriormente, analisou-se as interações ligante-alvo dos complexos obtidos, sendo que todos apresentaram coordenação com o Mn<sup>+2</sup> e resíduos importantes do sítio catalítico. Em seguida, as avaliações de ADME-Tox (Swiss ADME) demonstraram que todas tiveram uma boa disponibilidade oral, porém algumas apresentaram interação com enzimas do citocromo P450.

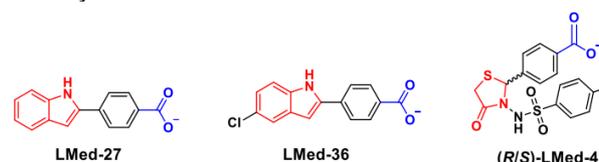


Figura 1. Moléculas selecionadas após análises *in silico*.

### Conclusões

Conclui-se que as estruturas selecionadas apresentam promissores parâmetros *in silico* de atividade inibitória da enzima arginase, podendo guiar futuros ensaios *in vitro*.

### Agradecimentos

A CAPES e a UEL pela oportunidade.

### Referências e notas

- (1) World Health Organization. Leishmaniosis. **2023**.
- (2) Ministério da Saúde. Manual de Vigilância da Leishmaniose Tegumentar Americana. **2007**.
- (3) Rath, S. *et al. Química nova*, **2003**, 26, 550.
- (4) Pham, T.N. *et al. Drug Discovery Today*. **2018**, 23, 871.
- (5) Mortier, J. *et al. Scientific Reports*. **2017**, 7.
- (6) Méndez-Cuesta, C *et al. J. Mol. Graphics Mod.* **2012**, 38, 50.
- (7) Wiggers, H. J. *et al. Molecular Informatics*. **2011**, 30, 565.



Categoria: Trabalho Completo

## Síntese de arilpirazóis e avaliação de interação com grupo heme.

Ana Eliza Zielinski<sup>1</sup>(GD), Matheus Bordin<sup>1</sup>(GD), Anna Paola Butera<sup>1\*</sup>(PQ)

\*paolabut@uel.br.

1 - Departamento de Química, Universidade Estadual de Londrina, PR - Brasil.

Palavras-Chave: Pirazóis, Malária, Síntese, Antiplasmodial.

### Introdução

A malária, uma doença tropical negligenciada, afeta milhões de pessoas em condição de vulnerabilidade todos os anos, devido à dificuldade de acesso a tratamentos. A resistência emergente aos medicamentos antimaláricos traz a necessidade urgente de desenvolvimento de novos fármacos. Compostos que interagem com o grupo heme são potencialmente ativos frente a malária, pois podem inibir a formação da hemozoína no vacúolo digestivo do *Plasmodium*, agente etiológico da doença, causando a sua morte.<sup>2</sup> No presente trabalho, foi proposto a síntese de uma série de arilpirazóis e avaliação do perfil de interação com heme, visando estimar o potencial antiplasmodial desses compostos.<sup>3</sup> A série de arilpirazóis proposta está apresentada na Figura 1.

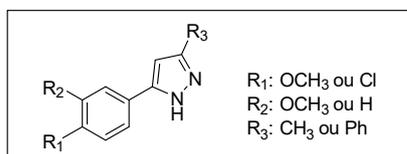


Figura 1. Série de arilpirazóis planejada.

### Resultados e discussão

Até o presente momento, foram obtidos dois arilpirazóis, **3** e **5**. A obtenção do composto **3**, com 37% de rendimento, envolveu a metodologia descrita por Zhang *et al.*,<sup>4</sup> que se emprega cetonas  $\alpha,\beta$ -insaturadas e hidrazina para construção do anel pirazólico, requerendo duas etapas, a partir do benzaldeído **1**. Para a obtenção de **5**, com 66% de rendimento, por outro lado foi utilizada a metodologia de reação multi-componente descrita por Aegurla e Peddinti<sup>5</sup>, na qual se parte diretamente do benzaldeído **4** (Figura 2). Os compostos **2**, **3** e **5** foram caracterizados por RMN de <sup>1</sup>H. Os arilpirazóis **3** e **5** foram preliminarmente avaliados quanto ao seu perfil de interação com grupo heme, em ensaio de titulação UV-vis.

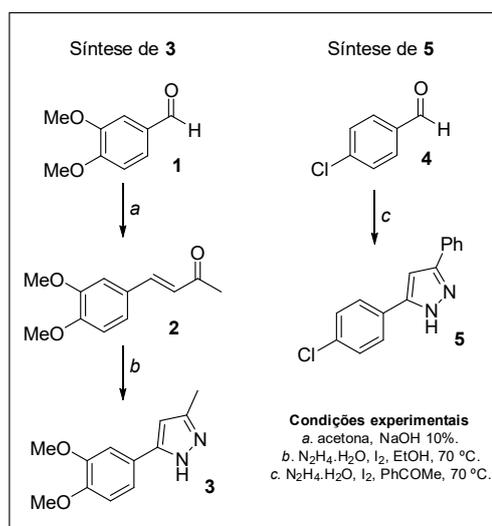


Figura 2. Obtenção de **3** e **5**.

O composto **3** apresentou-se como um ligante com afinidade pelo grupo heme, com  $K_d$  menor que 5  $\mu\text{mol L}^{-1}$ . O composto **5** precipitou na solução em análise, não sendo possível determinar seu perfil de interação com grupo heme, pelo método aplicado.

### Conclusões

O presente trabalho foi movido pela intenção de submeter uma série de pirazóis sintéticos a ensaio de interação com o grupo heme. Dentre os dois arilpirazóis obtidos, um mostrou-se ligante do grupo heme e será posteriormente avaliado quanto a sua atividade antiplasmodial e potencial antimalárico.

### Agradecimentos

ESPEC-UEL. LPMBA-UEL

### Referências

- (2) Phillips, M. A. et al. *Nature Reviews*. **2017**, 3, 1.
- (3) Karrouchi, K.; et al. *Molecule*. **2018**, 23, 134.
- (4) Zhang, X. et al. *The J. Org. Chem.*, **2014**, 79, 10170.
- (5) Aegurla, B.; Peddinti, R. K.; *Org. Biomol. Chem.*, **2017**, 15, 9643.



Categoria: Trabalho Completo

## Síntese de Derivados Cumarina-Ácido Protocatecuico com Potenciais Antioxidante e Fotoprotetor

Ana H. F. Ayala (PG)<sup>1</sup>, Gabriel F. S. Gomes (PG)<sup>1</sup>, Maria L. Zeraik (PQ)<sup>2</sup>, Marcelle L. F. Lima (PQ)<sup>1</sup>, Carla C. Perez (PQ)<sup>1\*</sup>

anaheloayala@uel.br; perezcc@uel.br\*

<sup>1</sup> Laboratório de Síntese de Moléculas Mediciniais (LaSMMed), Dept. de Química- UEL, PR - Brasil.

<sup>2</sup> Laboratório de Fitoquímica e Biomoléculas (LabFitoBio), Dept. de Química- UEL, PR - Brasil.

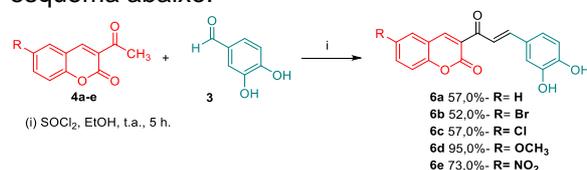
Palavras Chave: Polifênóis; Cumarinas; Antioxidante; Fotoprotetor.

### Introdução

As espécies reativas de oxigênio (EROs) e a radiação solar desempenham papéis centrais nos processos de envelhecimento da pele. A estreita correlação entre a exposição aos raios UV e a geração de EROs reforça a importância de estratégias preventivas, como o uso de filtros solares e compostos específicos com atividade antioxidante. Diversas substâncias de origem natural têm se destacado por essas propriedades, sendo as cumarinas e os polifenóis dois exemplos de núcleos biológicos riquíssimos e com grande potencial de exploração. Esses compostos possuem uma vasta gama de atividades biológicas reportadas, fazendo-os particularmente promissores para diversas aplicações, não apenas no campo cosmético. Dado o potencial das espécies citadas, propõe-se a síntese de uma série de híbridos de cumarina-ácidos protocatecuico, com avaliação *in vitro* de suas potenciais atividades antioxidantes e fotoprotetora. Além de, uma avaliação *in silico* de parâmetros ADMET, para uma análise de seu perfil farmacológico.<sup>1</sup>

### Resultados e discussão

Os compostos **6a-e** foram sintetizados com a metodologia adaptada de Petrov *et al.*, 2007, obtendo-se esses derivados com rendimentos brutos entre 52,0 e 95,0%, como ilustrado no esquema abaixo:



#### Esquema 1. Síntese dos derivados 6a-e.

A formação dos novos derivados foi confirmada por RMN <sup>1</sup>H e <sup>13</sup>C. Após a síntese, purificação e caracterização, os compostos foram submetidos a testes de atividade antioxidante (DPPH) e de potencial fotoprotetor (FPS). O ensaio antioxidante, baseia-se na capacidade da substância de neutralizar o radical DPPH, através da doação de elétrons ou átomos de hidrogênio. A porcentagem de radical reduzido é calculada, bem como o valor de IC<sub>50</sub>, com os menores valores demonstrando um maior potencial antioxidante. O teste de FPS, por sua vez, avalia a eficácia dos compostos frente a

radiação UVB. De acordo com a RDC 30, 2012 da ANVISA, uma substância é considerada fotoprotetora quando apresenta um valor de FPS superior a 6. A **figura 1** exibe os valores de IC<sub>50</sub> e FPS dos 5 compostos sintetizados.<sup>2 e 3</sup>

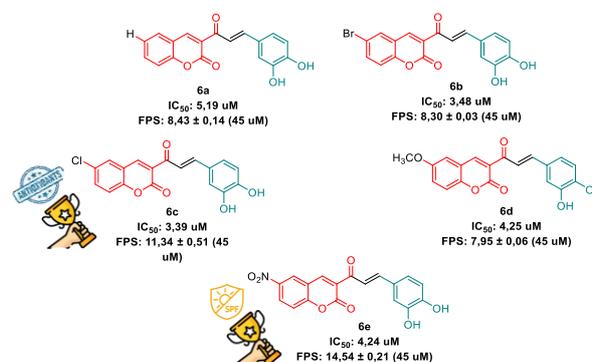


Figura 1. Derivados **6a-e**, seus valores de IC<sub>50</sub> e FPS na concentração de 45uM.

### Conclusões

Os resultados dos testes de atividades biológicas *in vitro* revelaram valores de IC<sub>50</sub> no teste antioxidante entre 3,39 e 5,19 uM, com destaque para os híbridos moleculares **6b** e **6c**. No que diz respeito à fotoproteção, os derivados apresentaram valores de FPS superior a 6 a partir da concentração de 35uM, com ênfase para os derivados **6c** e **6e**. Uma predição *in silico* também foi realizada, com o híbrido **6d** tendo os melhores resultados, sendo predito como não tóxico na maioria das vias de administração. No entanto, novos testes *in vitro* devem ser realizados para uma análise mais abrangente das propriedades dos novos compostos. Esses achados abrem perspectivas promissoras para o desenvolvimento de novos produtos para cuidados da pele e medicamentos. Vale ressaltar, que dos 5 compostos apresentados, 4 são inéditos na literatura.

### Agradecimentos

À Capes pelo fomento pelo fomento.

#### Referências e notas

- (1) De Lima Cherubim, D. J. et al. *Journal of Cosmetic Dermatology*, 19:33-37, 2020.
- (2) Blois, M. S. *Nature*, v. 181, n. 4617, p. 1199-1200, 1958.
- (3) Mansur, J. De S. et al. *An. bras. dermatol.*, v. 61, n. 3, p. 121-124, 1986.



Categoria: Trabalho Completo

## Otimização do Acoplamento $C_{Alk}-C_{Ar}$ para Reações Estratégicas de Síntese de Novos Canabinoides Bioativos

Dimitri Costa<sup>1\*</sup>(GD), Camila Bernardes<sup>2</sup> (PQ), Henrique Esteves<sup>2</sup> (PQ)

\*[dimitri.alves.costa@uel.br](mailto:dimitri.alves.costa@uel.br)

<sup>1</sup> Departamento de Bioquímica e Biotecnologia, Universidade Estadual de Londrina, PR - Brasil.

<sup>2</sup> Departamento de Química, Universidade Estadual de Londrina, PR - Brasil.

Palavras-Chave: Transtornos Ansiosos, Canabinoides Sintéticos, Acoplamento CC, DFT

### Introdução

Os transtornos de ansiedade têm se apresentado como condições de saúde mental alarmantes, afetando cerca de 4% da população mundial, segundo a OMS.<sup>(1)</sup> Compostos canabinoides, como o CBD, têm ganhado atenção como alternativas no tratamento de ansiedade, dores neuropáticas e da doença de Alzheimer.<sup>(3)</sup> Este trabalho explora as condições para acoplamento  $C_{Ar}-C_{Alk}$  entre síntons canabinoides aromático e alifático, além da predição de sua estereosseletividade, utilizando cálculos de DFT.

### Resultados e discussão

O acoplamento do 2-bromoresorcinol com  $\alpha$ -pineno foi utilizado como prova-de-conceito. Cálculos de DFT foram realizados (PBE0/Def2SVP), indicando que o estado de transição de menor energia ( $\Delta^{\ddagger}G = 4,8 \text{ kcal mol}^{-1}$ ,  $201i \text{ cm}^{-1}$ ) deve favorecer o acoplamento no  $C_{\beta}$  em relação à cabeça de ponte (Figura 2). A Tabela 1 enumera os testes realizados na tentativa de se obter o acoplamento. As Entradas 1-3 relatam a tentativa da obtenção do acoplamento na ausência de base e ligante, quando o  $\alpha$ -pineno é utilizado como solvente. Nenhuma das modificações resultou na formação do produto, como demonstrado pela ausência de acoplamentos  $C_{Ar}-H_{Alk}$  no espectro de HMBC (Figura 1, em azul).

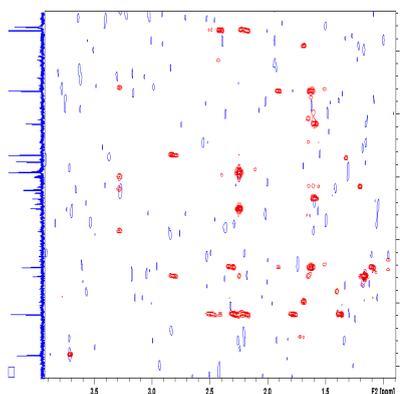


Figura 1. HMBC.

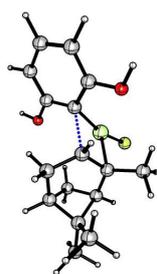


Figura 2. TS1.

Tabela 1. Otimização do acoplamento  $C_{Ar}-C_{Alk}$ .

#	Desvio das condições iniciais	CBD
1	-	-
2	50 °C	-
3	Et <sub>3</sub> N 1 eq.	-
4	$\alpha$ P 1 eq., PPh <sub>3</sub> 15 mol%, K <sub>2</sub> CO <sub>3</sub> 1 eq., MeOH 2 mL, 25 °C	-
5	$\alpha$ P 1 eq., PPh <sub>3</sub> 15 mol%, K <sub>2</sub> CO <sub>3</sub> 1 eq., MeOH 2 mL, 50 °C	-
6	PPh <sub>3</sub> 15 mol%, K <sub>2</sub> CO <sub>3</sub> 1 eq., MeOH 1 mL, 25 °C	3-Ar HMBC

Na presença de base e ligante clássicos, em metanol, o acoplamento também não foi obtido, mesmo quando a reação foi feita a 50 °C (Tabela 1, Entradas 4-5). Após o aumento da quantidade de  $\alpha$ -pineno para 1 mL (Entrada 6), finalmente foram visualizados sinais de acoplamento no HMBC, majoritariamente  $\delta_H$  2,3/2,5 ( $H_{Y,Y}$  diast.) com  $\delta_C$  107 ( $C_{ipso}$ ) / 152 ( $C_{orto}$ ), que indicaram a presença majoritária do produto previsto pelos cálculos de DFT.

### Conclusões

Este trabalho apresenta a viabilidade da obtenção de derivados de canabinoides, por meio do acoplamento  $C_{Ar}-C_{Alk}$  no problema modelo. Os cálculos de DFT indicaram que o estado de transição de menor energia favorece o acoplamento no  $C_{\beta}$  em relação à cabeça de ponte.

### Agradecimentos

Ao ESPEC/UEL e ao Heimdall/IQ-USP.

### Referências e notas

- (1) WHO. *Anxiety Disorders*, 2023, <https://who.int>.
- (2) Li, K. et al. *Nat. Commun.*, 2024, 15, 8228.
- (3) Crippa, J. et al. *Neuropsychopharmacol.*, 29, 2024, 417.



Categoria: Trabalho Completo

## Síntese de feniltriazóis e avaliação do potencial antiplasmodial

Fabrizio Santos<sup>1</sup>(PG), Gustavo Ribeiro-Viana<sup>2</sup>(PG), Renato Ribeiro-Viana<sup>3</sup>(PG); Anna Paola Butera<sup>1</sup>(PQ).

fabrizio.santos@uel.br

<sup>1</sup>Departamento de Química, Universidade Estadual de Londrina, PR - Brasil. <sup>2</sup>Departamento de Biotecnologia, Universidade Federal de São João Del Rei, MG - Brasil. <sup>3</sup>Departamento de Química, Universidade Tecnológica Federal do Paraná, PR - Brasil.

Palavras-Chave: Malária, Triazóis, Heme, Antiplasmodial.

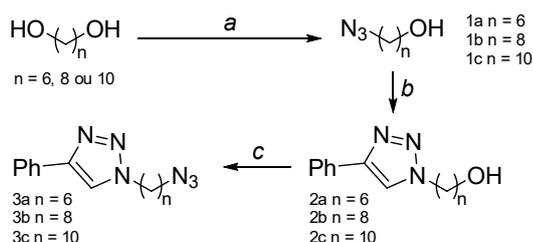
### Introdução

A malária é uma doença infecciosa grave, ocasionada por protozoários do gênero *Plasmodium*, que preocupa pelo alto número de casos e também pelo aparecimento de resistências aos tratamentos disponíveis.<sup>2</sup> Em trabalhos anteriores, demonstramos que representantes de uma série de 3-alkilpiridinas apresentam atividade antiplasmodial frente à cepa de *Plasmodium falciparum* resistente à cloroquina (<5 μM), entretanto, com baixo índice de seletividade citotóxica (IS) sendo também evidenciado que essas substâncias interagem com grupo heme com alta afinidade ( $K_d$  22-38 μM).<sup>3,4</sup> Supõe-se que isso impede a formação do polímero hemozoína pelo parasito, a partir do consumo de hemoglobina, processo necessário para sua sobrevivência no hospedeiro humano.<sup>2</sup> Visando identificar compostos ativos como maior IS, no presente trabalho, uma série de alquiltriazóis análogos às 3-alkilpiridinas foi sintetizada e avaliada quanto o perfil de interação com heme por titulação UV-Vis<sup>5</sup> e espectrometria de massas.<sup>3</sup>

### Resultados e discussão

Os derivados alquiltriazóis foram preparados de acordo com a rota sintética apresentada na Figura 1. A síntese dos derivados triazólicos envolveu a reação click alcino-azida.

Figura 1. Rota de síntese para obtenção dos derivados 2a-c e 3a-c.



#### Condições reacionais:

a) 1. HBr 48%; 2. NaN<sub>3</sub>/DMSO b) RC≡CH/Cu(I) c) 1. MsCl/Et<sub>3</sub>N;  
2. NaN<sub>3</sub>/DMSO d) H<sub>2</sub>/Pt-C

A formação de complexos estável alquiltriazol-heme EM-ESI. Nos espectros de massas de soluções contendo heme e um alquiltriazol (ligante), para a maioria dos ligantes avaliados, observou-se pico referente ao complexo 1:1 heme-ligante. Em nenhum dos casos, foram observados picos de m/z referentes ao complexo de estequiometria 2:1. As constantes de dissociação ( $K_d$ ) da interação heme-ligante foram determinadas por titulação UV-vis. Os valores encontrados para 2a-b e 3a-b indicam que esses compostos se associam com alta afinidade com o grupo heme. Os rendimentos globais e os valores de  $K_d$  determinados estão apresentados na Tabela 1.

Tabela 1: Rendimentos globais e constantes de dissociação ( $K_d$ ) dos triazóis com grupo heme.

Composto	Rendimentos	$K_d$ (μM)
2a	22%	3,935±2,164
2b	43%	2,547±0,918
2c	18%	ND
3a	89%	1,286±1,070
3b	48%	2,278±0,819
3c	34%	ND

### Conclusões

Com base nos resultados obtidos, conclui-se que componentes da série de alquiltriazóis avaliada ampliam a quimioteca de promissores agentes antiplasmodiais. Esses compostos foram encaminhados para avaliação de atividade citotóxica frente a *Plasmodium falciparum* e células humanas.

### Agradecimentos

CAPES. LasMMed-UEL. ESPEC-UEL. LAMM-UEL

### Referências e notas

- (1) OMS, World Malaria Report 2023.
- (2) Phillips, M. A.; et al. *Nature Reviews*. **2017**. 3, 1-24.
- (3) Ribeiro-Viana, R. M.; et al. *J. Chem. Inf. Model.* **2016**. 56, 571.
- (4) Guimarães, D. S. M.; et al. *Euro. J. Pharma. Sciences*. **2019**. 138, 105015.
- (5) Thordarson, P. *Chem. Soc. Rev.* **2011**. 40. 1305.



## Síntese de alquiltriazóis e avaliação do potencial antimalárico.

Giovana Marcatto<sup>1</sup> (IT), Anna Butera<sup>1</sup> (PQ), Fabricio Santos<sup>1</sup> (PG), Suzana Nixdorf<sup>1</sup> (PQ)\*

\*snixdorf@uel.br

1 - Departamento de Química, Universidade Estadual de Londrina, PR - Brasil.

Palavras-Chave: malária; atividade antiplasmodial; triazóis; reação click alcino-azida; heme; titulação UV-vis.

### Introdução

A malária é uma doença grave, transmitida pela picada da fêmea do mosquito *Anopheles*. Devido à resistência do parasita aos tratamentos atuais, há uma necessidade de desenvolvimento de novos fármacos. Estudos prévios do grupo de pesquisa identificaram que compostos derivados de 1,2,3-triazóis, baseados em 3-alkilpiridinas, apresentam atividade antiplasmodial, interferindo na polimerização do grupo heme<sup>2</sup>. O objetivo deste trabalho foi realizar a síntese dos derivados triazólicos usando uma reação click alcino-azida, além do estudo de interação destes compostos com o grupo heme ( $\beta$ -hematina) através da titulação espectroscópica de absorção no UV-vis.

### Resultados e discussão

A rota sintética desenvolvida para a obtenção dos 4-isoamiltriazóis está apresentada da Figura 1, onde mostra-se os rendimentos reacionais (em vermelho) para obtenção dos precursores sintéticos e produtos finais (em azul). Para construção do núcleo triazólico empregou-se a reação *click* alcino-azida, partindo-se do isoamilacetileno comercial e alquilazida preparadas por síntese (1-3), a partir de *n*-dióis (etapa b).

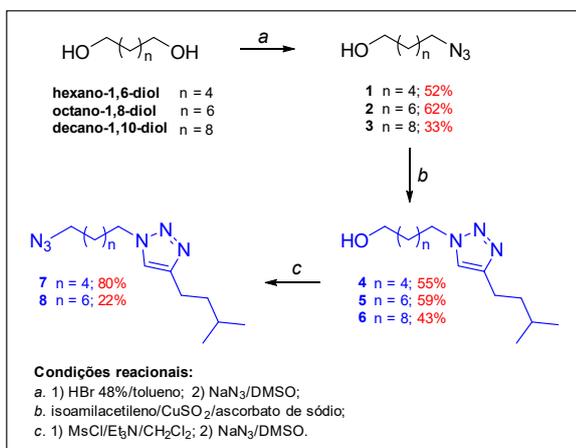


Figura 1. Rota sintética para a obtenção dos alquiltriazóis e rendimentos reacionais de cada etapa.

Os compostos sintetizados, foram caracterizados por RMN de <sup>1</sup>H e <sup>13</sup>C. Entre os compostos sintetizados, os compostos 4, 5, 7 e 8 foram submetidos a um estudo de interação com o grupo heme ( $\beta$ -hematina). A análise revelou que esses compostos apresentaram valores de  $K_d$  baixos (Figura 2), destacando-se como ligantes eficazes ao grupo heme.

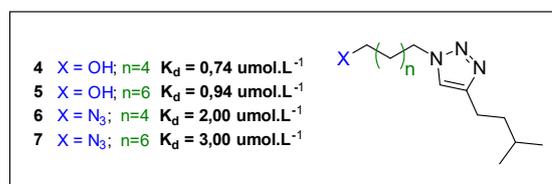


Figura 2. Resultados da titulação UV-vis com heme para os alquiltriazóis, 4, 5, 7 e 8.

Por outro lado, o composto 6, apresentou baixa solubilidade, resultando em precipitação no meio de análise, não sendo possível determinar seu perfil de interação com grupo heme, pelo método aplicado.

### Conclusões

Os ensaios de titulação no UV-vis mostraram que o espaçamento da cadeia carbônica não teve uma influência significativa nos valores das constantes de dissociação. Contudo os valores baixos de  $K_d$  sugerem sua capacidade como inibidores da formação de hemozoina, sendo potenciais agentes antimaláricos.

### Agradecimentos

À Fundação Araucária pela concessão de bolsa PROITI. Ao ESPEC-UEL. Ao LPMBA-UEL.

### Referências

- (1) Ravindar, L. et al.. *European Journal of Medicinal Chemistry*. **2023**. 259, 115694.
- (2) Ribeiro-Viana, R. M. et al. *Journal of Chemical Information and Modeling*. **2016**. 56. 571.



Categoria: Trabalho Completo

## Formulação e Validação de Odorizante de Ambiente Utilizando o Marketing Olfativo

Guilbert Gavioli<sup>1</sup> (TC)\*, Lucas Capello<sup>1</sup> (TC), Steve Moise<sup>1</sup> (TC), Daniel Bonfim<sup>1</sup> (orientador), wallacegavioli23@gmail.com, daniel.vitor.bonfim@gmail.com

1 – Centro Estadual de Educação Profissional Professora Maria do Rosário Castaldi, PR - Brasil.

Palavras-Chave: Odorizante, Marketing Olfativo, Fragrâncias, Sentidos Humanos.

### Introdução

Uma estratégia eficaz para a criação de um odorizante de ambiente é o marketing olfativo, que utiliza um conjunto de técnicas voltadas para atrair e fidelizar clientes por meio de aromas personalizados<sup>1</sup>. Um odor, ao se conectar à memória olfativa de um indivíduo, pode remeter a um produto ou experiência específica, promovendo uma associação emocional. Fragrâncias afetam as percepções humanas, e uma combinação de notas pode evocar lembranças e despertar emoções<sup>2</sup>. Por exemplo, notas de camomila e lavanda proporcionam sensações de relaxamento, enquanto notas cítricas despertam sensações energizantes<sup>3,4</sup>. Com base nisso, o presente trabalho tem como objetivo desenvolver um odorizante de ambientes que provoque sensações de sensualidade, luxo e romantismo.

### Resultados e discussão

As seguintes matérias-primas foram utilizadas na formulação do odorizante: manjeriço, hera, mandarina, bergamota, cravo, limoneno, coentro, lírio, jasmim, lírio-do-vale, sândalo, baunilha, almíscar, fava tonka, dipropilenoglicol, álcool de cereais e água. A seleção das fragrâncias foi baseada em referências da literatura, com foco em provocar as sensações de sensualidade, luxo e romantismo. Para isso, foram priorizadas fragrâncias florais, cítricas e amadeiradas (sândalo)<sup>3</sup>.

Todas as notas remetem a um cheiro mais feminino devido ao uso predominante de flores, enquanto as notas cítricas equilibram a doçura e proporcionam uma sensação energética. Já os temperos foram incorporados para sustentar as notas de base e intensificar o aroma.

Todas as palavras utilizadas no teste de atributos que são evocadas pelo odorizante foram submetidas a um teste de concordância de Kappa, sendo consideradas apenas aquelas com valores iguais ou superiores a 0,4.

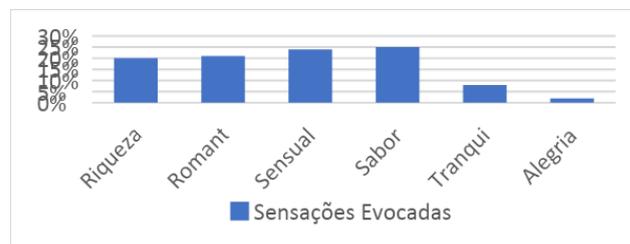


Figura 1. Atributos relacionados a fragrância. Fonte: Autores

Os resultados obtidos são consistentes com os achados de Cho (2015), que identificou que os atributos de sensualidade e luxo são aspectos importantes, associados à lembrança de lojas de roupas por parte dos consumidores.

O atributo "romantismo" apresentou valores altos, o que está relacionado à composição floral do odorizante. O atributo "sabor" recebeu o maior número de votos, embora isso provavelmente esteja associado ao fato de que os participantes relacionaram "gostoso" ao gosto de algo agradável, quando, na verdade, o atributo está vinculado a lembranças gustativas nostálgicas, de acordo com os participantes do teste de concordância.

### Conclusões

Diante dos resultados da pesquisa, o odorizante atingiu o objetivo proposto. Sendo necessário mais testes para determinar o tempo de fixação no ambiente e aceitação do produto.

### Agradecimentos



### Referências e notas

- (1) Dupont, J. J. *Braz. Chem. Soc.* **2004**, 15, 341.
- (2) Salomão, V.; et al. *Rev. Fatec Sebra em Debate*, **2018**, 5(9), 1.
- (3) Botelho, D.; Luca, R. *Gvexecutivo*, **2017**, 16(1), 37.
- (4) Filho, M. *Rev. Fatec Sebra em Debate*, **2023**, 10(18), 1.



**XXXIX Semana da Química e  
IX Jornada de Pós-Graduação**  
REFLETINDO OS PRÓXIMOS 50 ANOS: NOVOS HORIZONTES  
PARA O PROFISSIONAL DA QUÍMICA

Realização



proex  
PROFESSOR ORIENTADOR

(5) Cho, E.; Fiore, A. *J. of Consumer Marketing*, 2015, 32(4), 255.



Categoria: Trabalho Completo

## DERIVADOS CÍCLICOS DO AMINOÁCIDO TRIPTOFANO COM POTENCIAL ATIVIDADE ANTIVIRAL

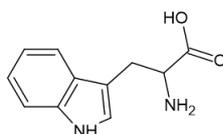
Isadora Sales<sup>1</sup> (IT), [isadora.mariah@uel.br](mailto:isadora.mariah@uel.br), Alexandre Orsato<sup>\*</sup>, [orsato@uel.br](mailto:orsato@uel.br).

Departamento de Química, Universidade Estadual de Londrina, PR - Brasil.

Palavras-Chave: Beta-carbolinas, dengue, reação de Pictet-Spengler, inibição viral.

### Introdução

A dengue é uma doença viral que possui como vetor principal o mosquito *Aedes aegypti*<sup>1</sup>. Ela se tornou mundialmente uma ameaça, principalmente em países em desenvolvimento. Dessa maneira, o desenvolvimento de fármacos específicos para a dengue é uma demanda urgente. Compostos indólicos demonstraram atividades biológicas interessantes, onde algumas carbolinas apresentam atividade antiviral<sup>2</sup>. Logo, o projeto tem como objetivo a síntese de derivados indólicos por meio de modificações estruturais no aminoácido L-triptofano para obtenção de tetraidro- $\beta$ -carbolinas e  $\beta$ -carbolinas, com potencial atividade antidengue.



L-triptofano

Figura 1. Estrutura do aminoácido L-triptofano

### Resultados e discussão

Os resultados obtidos através das sínteses orgânicas demonstram um bom rendimento na esterificação do L-triptofano. Então, a reação de ciclização do éster metílico apresentou baixo rendimento, e, portanto, foi realizada outra rota sintética através da ciclização direta do L-triptofano, a qual gerou uma tetraidro- $\beta$ -carbolina e apresentou ótimo rendimento. O produto da reação de aromatização da tetraidro- $\beta$ -carbolina com  $\text{KMNO}_4$  gerou a  $\beta$ -carbolina desejada, mas apresentou baixo rendimento, sendo necessário a avaliação de outra rota sintética para a obtenção do produto. Todos os produtos obtidos foram caracterizados e confirmados por meio de RMN de  $^1\text{H}$ .

### Conclusões

Após realizar as sínteses de uma série de derivados do L-triptofano através dos métodos citados, e analisar os rendimentos obtidos e as caracterizações por RMN de  $^1\text{H}$ , esses compostos foram adicionados a uma biblioteca de carbolinas, de grande variedade estrutural, e caso a atividade antiviral de algum candidato seja altamente potente e sua citotoxicidade suficientemente baixa, será sugerida a adoção de testes pré-clínicos, de modo a investigar a sua toxicidade em organismos vivos. Caso o candidato a fármaco antidengue obtiver sucesso em todas as etapas de avaliação biológica, ele será submetido aos ensaios clínicos como potencial fármaco para o tratamento da dengue.

### Agradecimentos

Primeiramente, gostaria de agradecer ao meu orientador, ao grupo de pesquisa LaSMMed e ao órgão de fomento CNPq pelo auxílio à pesquisa.

### Referências e notas

- (1) World Health Organization. Dengue: Guidelines for Diagnosis, Treatment, Prevention and Control. WHO/HTM/NTD/DEN/2009.1 (World Health Organization, 2009)
- (2) Girgis AS, Panda SS, Kariuki BM, et al. Indole-Based Compounds as Potential Drug Candidates for SARS-CoV-2. *Molecules* (Basel, Switzerland). 2023 Sep;28(18):6603



Categoria: Trabalho Completo

## Formulação de Tintas à Óleo a partir do Pigmento de Repolho Roxo e Óleo Reutilizado.

Ana Ramos<sup>1</sup> (TC), Emanuelle Ribeiro<sup>1</sup> (TC), Emily Broniera<sup>1</sup> (TC), Iago Santos<sup>1</sup> (TC), Julya Silva<sup>1</sup> (TC), Ygor Peres<sup>1</sup> (TC), \*Daniel Bonfim<sup>1</sup> (orientador). [julyaverlingue@gmail.com](mailto:julyaverlingue@gmail.com), [daniel.vitor.bonfim@gmail.com](mailto:daniel.vitor.bonfim@gmail.com)

1 - Centro Estadual de Educação Profissional Professora Maria do Rosário Castaldi, PR - Brasil.

### Introdução

As primeiras evidências da origem da tinta à óleo foram encontradas nas cavernas, sendo usada desde o século V. A tinta é um material cujo princípio é ser utilizada para colorir tecidos, quadros e papéis. Sua composição inclui aglutinantes, diluentes e pigmentos, sendo o óleo de linhaça o aglutinante mais amplamente utilizado<sup>(1)</sup>. É um produto vegano, sustentável e natural, que não traz prejuízos para o meio ambiente ou para os indivíduos que fazem uso desse material. Os pigmentos podem ser de origem orgânica ou inorgânica, obtidos naturalmente ou por síntese. Nesse contexto, o extrato de repolho roxo destaca-se pela fácil extração com água e pela ampla gama de cores que exibe conforme a variação do pH do meio. Além disso, é uma opção que contribui para a redução de resíduos e do impacto ambiental<sup>(2)</sup>. O presente trabalho possui como objetivo o desenvolvimento de tintas a óleo utilizando como pigmento o extrato de repolho roxo e reutilizando o óleo de soja.

### Resultados e discussão

A tinta formulada apresenta a seguinte composição (m/v): alúmen de potássio 10 g/L; carbonato de sódio 5 g/L; 24 g de repolho roxo; NaOH 0,1 M q.s.; NH<sub>4</sub>OH 0,1 M q.s.; NaHCO<sub>3</sub> q.s.; Ácido Acético q.s.; Acetato de Sódio q.s.; óleo de soja reutilizável q.s; glicerina q.s.

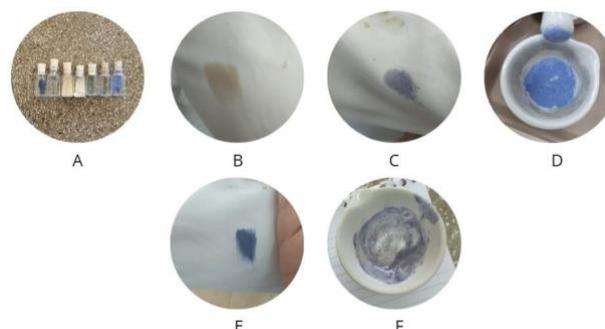
A mudança de coloração ocorreu antes da adição dos reagentes responsáveis pela formação do hidróxido de alumínio. Após a obtenção do extrato aquoso de repolho roxo, meios com pH variando de 1 a 13 foram preparados e misturados com porções do extrato.

No entanto, apenas os meios com pH entre 7 e 12 produziram precipitados coloridos. Isso se deve à solubilidade do hidróxido de alumínio em meios ácidos ou fortemente básicos, onde ele se

transforma no íon Al<sup>3+</sup> ou no complexo aluminato [Al(OH)<sub>4</sub>]<sup>-</sup>.

O precipitado de cor amarela, apesar de estar em um meio fortemente básico (pH entre 12 e 13), formou-se em menor quantidade do que os demais. Já os precipitados de coloração azul/roxo escuro foram os que apresentaram a maior quantidade, devido ao pH estar próximo de 7.

Foto 1. Etapas do processo



Fonte: os próprios autores

### Conclusões

Conclui-se, a partir deste projeto, que o extrato de repolho roxo apresentou um potencial fonte de pigmentação para formulação de tintas. Porém, é necessário ter controle sobre o pH do meio para ocorrer a formação do precipitado.

### Agradecimentos



### Referências e notas

- (1) Pinheiro, B.; Bezzera, C. *Mens Agitat*. **2022**, 17, 66.
- (2) Silva, J.; Silva, A.; Antero, R.; Borges, E. *Enciclopédia Biosfera*, **2009**, 5(7).



Categoria: Trabalho Completo

## Formulação de Batom Natural à Base de Extratos de Amora (*Morus sp*) e Beterraba (*Beta vulgaris L.*)

Bárbara Xavier<sup>1</sup>(TC), Beatriz Guadanhani<sup>1</sup>(TC), Isabele Leme<sup>1</sup>(TC), \*Marcela Vitória<sup>1</sup>(TC), Natália Carvalho<sup>1</sup>(TC), Rebeca Cristina<sup>1</sup>(TC), Thayana Geovana<sup>1</sup>(TC), \*Daniel Bonfim<sup>1</sup> (orientador), [marcela.barbosa.oliveira@escola.pr.gov.br](mailto:marcela.barbosa.oliveira@escola.pr.gov.br), [daniel.vitor.bonfim@gmail.com](mailto:daniel.vitor.bonfim@gmail.com)

1 - Centro Estadual de Educação Profissional Professora Maria do Rosário Castaldi, Londrina, PR - Brasil

Palavras-Chave: Batom, Cosmético, Amora, Beterraba.

### Introdução

O batom é um dos cosméticos mais antigos e populares do mundo, utilizado por diversas culturas ao longo da história. A sua origem vem de muitas civilizações antigas, como a egípcia, que usava as substâncias naturais para colorir e hidratar os lábios. Com o tempo, o batom foi evoluindo, incorporando novas fórmulas e ingredientes, tornando-se um dos maiores símbolos de beleza e autoexpressão do mundo<sup>(1)</sup>. A amora (*Morus sp*) é um fruto rico em pigmentos naturais com propriedades antioxidantes e anti-inflamatórias. Dessa forma, este trabalho tem como objetivo desenvolver formulações de batons utilizando a tinta da amora como pigmento.

### Resultados e discussão

A formulação de ambos os produtos foi adaptada de X e consistiu de (m/m): lanolina refinada 20,7%; manteiga de karité 25,9%; cera de abelha 10,37%; parafina 5,18%; óleo de rícino 15,55%; extrato aquoso de amora/beterraba 22,22%; glicerina q.s..

A formulação contendo beterraba apresentou resultados insatisfatórios, a pigmentação não ocorreu de forma homogênea e a cor resultante não se adequou a um cosmético. Além, da textura resultante assemelhar-se mais com a de uma manteiga do que com um batom.

A segunda formulação, contendo amora, apresentou resultados mais satisfatórios. A textura assemelhou-se a de um batom comercial. E a cor atingiu uma cor satisfatória para um cosmético.

A pigmentação do produto na pele humana somente foi testada pelos analistas para a formulação contendo amora, pois, a formulação contendo beterraba, após 24 horas, apresentou odor desagradável. A pigmentação na pele apresentou resultados satisfatórios para um cosmético pigmentado com produto natural.



Figura 1. Formulação contendo a) Amora b) Beterraba. Fonte: Próprios Autores



Figura 2. Teste de coloração em pele.

### Conclusões

A presente pesquisa demonstrou a viabilidade da utilização da tinta natural da amora (*Morus sp*) como pigmento em formulações de batom, superando a formulação com beterraba em termos de pigmentação e estabilidade. No entanto, são necessárias pesquisas adicionais para avaliar a estabilidade a longo prazo da formulação e a percepção dos consumidores.

### Agradecimentos



### Referências e notas

- (1) FLOR, J.; MAZIN, M.; FERREIRA, L. *Cosmetics & Toiletries*, **2019**, 31, 1.
- (2) COSTA, A.; JESUS, F.; ORNELLAS, R.; MARISCO, G. *Textura*, **2020**, 14(2), 59.
- (3) OLIVEIRA, T.; *et. al.* *Archives of Health Investigation*. **2018**, 70(10), 1.



Categoria: Trabalho Completo

## Descoberta de novos derivados híbridos de cumarina e ácido fenólico como agentes potenciais contra a influenza A

Mariana Luiza Silva (PG)<sup>1</sup>, Ana Heloisa Fonseca Ayala (PG)<sup>1</sup>, Maria Laura G. Dário (PG)<sup>2</sup>, Mateus de S. Pedroza (IC)<sup>1</sup>, Priscila G. Camargo (PQ)<sup>1</sup>, Ligia Carla F. Galhardi (PQ)<sup>2</sup>, Carla C. Perez (PQ)<sup>1</sup> e Marcelle de L. F. Bispo (PQ)<sup>1\*</sup>

1 - Departamento de química – Universidade Estadual de Londrina, Londrina, PR - Brasil.

2 - Departamento de microbiologia – Universidade Estadual de Londrina, Londrina, PR - Brasil.

Palavras-Chave: Influenza, Cumarinas, Docking e Polimerase.

### Introdução

A gripe é uma doença respiratória causada pelo vírus influenza, que pode levar a pandemias, como a de 2009, causada pelo H1N1 que levou a 12.800 óbitos no mundo e 2.051, apenas no Brasil.<sup>1</sup> Os antivirais disponíveis, como oseltamivir e zanamivir, têm eficácia limitada devido a cepas resistentes e alto custo.<sup>2</sup> Embora a vacinação seja eficaz, sua disponibilidade pode ser tardia. Para o combate à futuras pandemias, é essencial desenvolver novos fármacos, especialmente contra alvos ainda não explorados, como a RNA polimerase (RNAP), uma enzima vital para a replicação viral composta pelas subunidades PA, PB1 e PB2, cuja inibição pode ser uma estratégia promissora na busca por novos antigripais.<sup>3</sup>

### Resultados e discussão

Dentre os 118 compostos da quimioteca própria do LaSMMed, que apresenta uma grande diversidade estrutural, foram selecionados por meio de *docking* molecular, 11 substâncias promissoras. A seleção foi feita com base em suas interações com duas partes do complexo da RNA polimerase do vírus H1N1 (IVA): a primeira, composta pelas subunidades PB1 (que contém o sítio ativo) e PA (importante para a montagem do complexo funcional) (PDB ID: 2ZNL, resolução 2,3 Å)<sup>3</sup>, e a segunda, pela subunidade PB2 (domínio de reconhecimento de capped-RNA) (PDB ID: 7AS0, complexada com VX-78). Das 11 selecionadas (**LMed 47, 87, 88, 92, 93, 96, 97, 98, 99, 100, 101**), 10 pertencem à classe das cumarinas fenólicas, enquanto apenas 1 é representante da classe das tiazolidinonas. A triagem antiviral *in vitro* foi conduzida utilizando ensaios de MTT e Formação de Foco (FFU/mL), determinando-se a concentração citotóxica (CC<sub>50</sub>) em células MDCKII e a concentração inibitória de 50% (CI<sub>50</sub>) em WSN/33/H1N1. Os compostos que apresentaram os melhores índices de seletividade (IS: CC<sub>50</sub>/CI<sub>50</sub>) foram submetidos a ensaios adicionais para elucidar seus mecanismos de ação. Nos ensaios

antivirais, apenas a **LMed 88** e **47** (a única tiazolidinona) não demonstraram atividade inibitória significativa, os demais compostos cumarinas-ácidos fenólicos inibiram o IAV em baixas concentrações, com CI<sub>50</sub> variando de 0,4225 a 6,376 µg/mL. Dentre esses, o **LMed 99** e **LMed 93** se destacaram pelos melhores IS, apesar da citotoxicidade maior da **LMed 99** (Tabela 1).

Substância	CI <sub>50</sub>	CC <sub>50</sub>	IS
<b>LMed 93</b>	1,69 ± 0,6	≥ 100	≥ 59,2
<b>LMed 99</b>	0,42 ± 0,1	45,17	106,9

Tabela 1. Resultados dos testes *in vitro*.

Esses resultados foram corroborados pelos estudos *in silico*, os quais indicaram esses compostos como os de melhor interação com o alvo PB1-PA da RNAP e também boas interações com a PB2, principalmente devido ao átomo de cloro e ao grupo hidroxila presentes em suas estruturas.

### Conclusões

Este estudo destaca o potencial terapêutico de **LMed 93** e, especialmente, de **LMed 99** como alternativas promissoras e seguras para o tratamento da Influenza A H1N1, devido à sua eficácia antiviral significativa e baixos níveis de citotoxicidade, reforçando sua viabilidade como novos agentes antivirais, especialmente em um cenário de crescente resistência aos tratamentos convencionais. E ainda, comprova a eficiência de métodos *in silico* na seleção de compostos mais ativos.

### Agradecimentos

À capes pelo fomento.

### Referências e notas

- (1) Bellei, N. Melchior, T. B. J Bras Patol Med Lab. **2011**, 47, 611-617.
- (2) Chauhan, R. P.; Gordon, M. L. Virus Gene. **2022**, 58 (4) 255-269.
- (3) Obayashi, E. et al. Nature. **2008**, 454 (7208), 1127-1131.



Categoria: Trabalho Completo

## TRIAGEM VIRTUAL E SÍNTESE DE IMINOIDANTOÍNAS FRENTE A ENZIMA DIIDROOROTATO DESIDROGENASE DE *TRYPANOSOMA CRUZI*

Mateus Pedroza de Souza Alves (IC), Murilo da Silva Lopes Rodrigues (IC), Mariana Luiza Silva (PG), Marcelle L. F. Bispo (PQ)\* [mlfbispo@uel.br](mailto:mlfbispo@uel.br)

1- Laboratório de Síntese de Moléculas Mediciniais (LaSMMed), Departamento de Química, Universidade Estadual de Londrina, PR - Brasil

Palavras-Chave: Docking Molecular, Doença de Chagas, Síntese Orgânica.

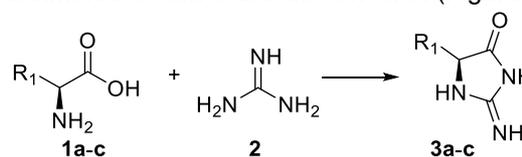
### Introdução

A Doença de Chagas (DC), causada pelo protozoário *Trypanosoma cruzi*, é uma doença tropical negligenciada (DTN) de presença global. Com cerca de 30 mil novos casos por ano, é a responsável por 76% das mortes relacionadas com DTNs em países da América Latina.<sup>1</sup> A DC apresenta uma série de desafios quanto ao tratamento, como a baixa eficácia, a longa duração e ainda, alguns efeitos adversos como anorexia e alergias cutâneas. Diante disso, novos alvos estão sendo investigados para ampliar a gama restrita de medicamentos para a DC. Um alvo promissor é a enzima diidroorotato desidrogenase (DHODH), que está diretamente relacionada à síntese de DNA e RNA pelo protozoário.<sup>2</sup> Nesse contexto, substâncias como as iminoidantoínas emergem como candidatas para o tratamento da DC, pois apresentam regiões que permitem diversas modificações estruturais, além de conter grupos que podem atuar como aceptores ou doadores de ligações de hidrogênio.<sup>3</sup> Essas características favorecem interações com o alvo de interesse, aumentando assim seu potencial farmacológico.

### Resultados e discussão

Foram planejados 11 derivados de iminoidantoínas, que foram submetidos a um estudo de docking molecular com a enzima DHODH de *T. cruzi* (PDB ID: 2E6F). As substâncias foram ancoradas próximo ao sítio catalítico desta enzima, que contém um cofator co-cristalizado (mononucleotídeo de flavina - FMN), moléculas de água e alguns resíduos de aminoácido chave (Lys43, Asn67 e Asn194). O protocolo de docking foi realizado no programa GOLD Suite (v. 2020-1), nas suas 4 funções de pontuação e validado com base no desvio quadrático médio (RMSD = 0, 1889 Å, CHEMPLP). O estudo de estrutura-reatividade demonstrou que compostos com substituintes pequenos e alifáticos apresentaram melhores interações com alvo do que com substituintes volumosos e aromáticos. Entre as selecionadas, três (**3a-c**) se destacaram

por suas interações mais fortes com o alvo, como por exemplo as ligações de hidrogênio com resíduos catalíticos ou  $\pi$ - $\pi$  com FMN. Sendo assim, foram realizadas as tentativas de síntese dessas moléculas por ciclização direta entre o cloridrato de guanidina e L-aminoácidos, sob aquecimento e sem o uso de solvente. (Figura 1).



R<sub>1</sub> = **3a** i-Pr, **3b** (CH<sub>2</sub>)<sub>2</sub>SCH<sub>3</sub> e **3c** Pirrolidina

Figura 1. Síntese dos derivados **3a-c**.

Até o momento, apenas **3c** foi obtida com 1% de rendimento. Apesar do baixo rendimento, foi possível a caracterização completa da substância utilizando técnicas de RMN como <sup>1</sup>H, <sup>13</sup>C, COSY, HSQC e por ponto de fusão (PF).

### Conclusões

Dentre as 11 substâncias, três (**3a-c**) mostraram as melhores interações com o sítio ativo da DHODH. A síntese bem-sucedida da molécula **3c**, apesar do baixo rendimento, indica que serão necessários ajustes no protocolo de síntese para que os demais derivados sejam obtidos em melhores rendimentos. Como próximos passos, serão conduzidos ensaios *in vitro* para avaliar o potencial dessas substâncias frente a formas epimastigotas de *T. cruzi* e a avaliação de suas citotoxicidades em células de mamíferos.

### Agradecimentos

A UEL, ao CNPq e a CAPES pelas bolsas concedidas.

### Referências e notas

- (1) WORLD HEALTH ORGANIZATION. **Chagas disease**. [https://www.who.int/news-room/fact-sheets/detail/chagas-disease-\(american-trypanosomiasis\)](https://www.who.int/news-room/fact-sheets/detail/chagas-disease-(american-trypanosomiasis))
- (2) INAKA, D. K. et al. **Biochemistry**, v. 47, n. 41, p. 10881-10891, 2008.
- (3) CAMARGO, P. G. et al. **ChemistrySelect**, v. 6, n. 38, p. 10429–10435, 2021.



Categoria: Trabalho Completo

## Formulação de Protetor Solar com incorporação de *Camellia sinensis*

Luiza Lima<sup>1</sup> (TC), Laura Montezin<sup>1</sup> (TC), Gabrielly Oliveira<sup>1</sup> (TC), Miguel Cristovão<sup>1</sup> (TC), \*Daniel Bonfim<sup>1</sup> (orientador). [miguel.cristovao.200@gmail.com](mailto:miguel.cristovao.200@gmail.com), [daniel.vitor.bonfim@gmail.com](mailto:daniel.vitor.bonfim@gmail.com)

1 - Centro Estadual de Educação Profissional Professora Maria do Rosário Castaldi, PR - Brasil.

Palavras-Chave: Protetor Solar, Hidratante, Chá-preto

### Introdução

Conforme a ANVISA, os protetores solares são definidos como cosméticos que protegem a pele e os lábios contra a radiação UVB e UVA. A formulação de protetores solares é composta por uma combinação de ingredientes, tais como filtros químicos ou físicos, emolientes, hidratantes, antioxidantes, estabilizadores, conservantes, etc. A adição de substâncias químicas auxiliam na proteção contra danos oxidativas causados pela exposição ao sol, como vitaminas ou extratos de produtos naturais<sup>1</sup>. A *Camellia sinensis*, popularmente conhecida como chá-preto, possui ação antioxidante e anti-inflamatória<sup>2</sup>. O uso de extratos de *Camellia sinensis* em protetores solares pode potencializar a eficácia do produto, ajudando a reduzir os danos celulares causados pela exposição prolongada ao sol. Além disso, a combinação de seus efeitos antioxidantes e anti-inflamatórios pode promover uma proteção mais abrangente contra o envelhecimento precoce e a degradação da pele<sup>3</sup>. Dessa forma, o presente trabalho possui como objetivo a formulação de protetor solar incorporado com *Camellia sinensis*.

### Resultados e discussão

O protetor solar formulado possui a seguinte composição (m/m): óleo de coco (16,7%), óxido de zinco (16,7%), óxido de zinco (55,55%), chá preto (11,11%).

Foto 1. Protetor solar desenvolvido



Fonte: os próprios autores (2024)

Os ensaios organolépticos foram adaptados dos procedimentos recomendados pela ANVISA

(2008). O objetivo desses ensaios é verificar a conformidade na produção do protetor solar. A amostra de referência utilizada foi um protetor solar comercial.

A aderência e a sensação do produto na pele apresentaram resultados satisfatórios, 77,5% e 85%, respectivamente, comparados com a amostra padrão. No entanto, a cor e o aroma apresentaram resultados não conformes, 35% e 42,5%, respectivamente.

O resultado tanto da cor, quanto do aroma não divergem do objetivo do trabalho, visto que a composição do protetor possui diferenças em relação à amostra padrão, por conta da adição da *Camellia sinensis*.

A avaliação sensorial do aroma não foi efetuada quanto à aceitação, mas o produto não apresenta atributos desagradáveis.

### Conclusões

Os resultados obtidos demonstram a viabilidade do projeto, culminando no desenvolvimento de um protetor solar. Os testes sensoriais indicaram uma similaridade parcial entre o produto desenvolvido e os produtos comerciais disponíveis no mercado. No entanto, são necessários ensaios complementares para confirmar a presença de *Camellia sinensis*, determinar o fator de proteção solar e avaliar a aceitação do produto pelos consumidores.

### Agradecimentos



### Referências e notas

- (1) Sarruf, F. J. *Cosmet. Dermatol.*, **2019**, 19(8), 1.
- (2) Vishnoi, H.; KANT, R. *Int. J. Pharm. Sci. Res.*, **2018**, 9(5), 1723
- (3) ANVISA. Guia de Controle de Qualidade de Produtos Cosméticos, **2008**.



Categoria: Trabalho Completo

## Estudos de docagem molecular de potenciais inibidores da proteína nsP1 do vírus Chikungunya

Miguel L. da Silva<sup>1</sup> (PG), Luiz Henrique S. Martins<sup>2</sup> (GD), Nathália V. do Amaral<sup>2</sup> (IC), Marcelle L. F. Bispo<sup>2</sup>(PQ)\*. mlfbispo@uel.br.

1 - Instituto de Química e Biotecnologia, Universidade Federal de Alagoas, AL - Brasil.

2 - Departamento de Química, Universidade Estadual de Londrina, PR - Brasil.

Palavras-Chave: *In silico*, Arboviroses, Proteína não estrutural, Antivirais

### Introdução

O vírus Chikungunya (CHIKV) é um arbovírus da família Togaviridae e do gênero Alphavirus, responsável pela doença Chikungunya. Desde o primeiro surto em 2014, o Sistema de Vigilância Epidemiológica Brasileira registrou mais de 300 mil casos de chikungunya, e 40% dos municípios brasileiros já relataram casos confirmados. Em 2022, os casos de chikungunya ultrapassaram 383 mil globalmente, com o Brasil registrando mais de 265 mil ocorrências<sup>1</sup>. Um dos fatores críticos para o sucesso do CHIKV em causar infecção e disseminar-se é a ação de uma de suas proteínas não estruturais, como a nsP1. Essa proteína tem um papel essencial na replicação viral, atuando especificamente no processo de capping do RNA. Essa modificação serve como uma "capa protetora" contra a degradação do RNA, além de favorecer a evasão do sistema imunológico do hospedeiro. Dada sua importância no ciclo replicativo do vírus, a proteína nsP1 foi selecionada como alvo para estudos de docagem molecular, com o objetivo de se avaliar as interações existentes entre três possíveis inibidores, previamente descritos na literatura com comprovadas atividades anti-CHIKV. Assim, pretende-se identificar a substância-protótipo mais interessante para ser otimizada via modificações estruturais futuramente.

### Resultados e discussão

Inicialmente, a validação do protocolo de docagem molecular ocorreu por redocagem, utilizando a estrutura 3D da nsP1 de CHIKV, depositada no *Protein Data Bank* (7FGI)<sup>2</sup>. Para isso, utilizou-se apenas uma unidade proteica contendo o ligante co-cristalizado (SAH - Figura 1), sob uma raio de 18 Å, nas quatro funções de pontuação. A validação ocorreu na função CHEMPLP, uma vez que ela apresentou o menor valor de desvio médio

quadrático (RMSD = 0,9841 Å). Uma vez que o ligante co-cristalizado SAH não é um inibidor da nsP1, mas sim um mediador da reação de metilação promovida por ela, para os estudos de docagem molecular foram escolhidos na literatura, três potenciais inibidores de nsP1, os quais apresentaram boas atividades *in vitro* frente ao CHIKV (Figura 1)<sup>3</sup>.

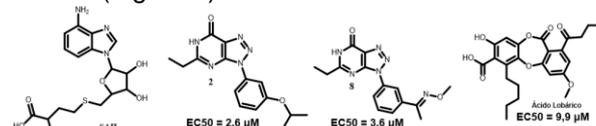


Figura 1: Moléculas com anti-CHIKV submetidas ao Docking Molecular.

Dentre os três ligantes, o ácido lobárico foi o mais promissor, interagindo por meio de interações fortes com o sítio de ligação, o que resultou em um maior valor de fitness score. Ademais, observou-se que os inibidores interagem com resíduos hidrofóbicos da proteína que são diferentes para o SAH. Com isso, pode-se inferir que tais ligantes podem interferir no mecanismo reacional promovido pelo SAH, que é fundamental para o funcionamento da nsP1..

### Conclusões

Conclui-se que os ligantes avaliados podem interferir na reação promovida pela nsP1, uma vez que ocupariam uma região hidrofóbica bem próxima ao agente de metilação SAH. Entretanto, essa hipótese necessita ser corroborada por evidências experimentais para ser validada.

### Referências e notas

- (1) BRASIL. Ministério da Saúde, Coordenação-Geral de Vigilância das Arboviroses. Boletim epidemiológico 2022.
- (2) <https://www.rcsb.org/structure/7FGI>
- (3) Gigante, A. et al. *Antiviral Research*, 2017, 144, 216.



Categoria: Trabalho Completo

## Determinação de cafeína em folhas de café por RMN

Nayara Bergo<sup>1</sup>(IC), Aline D. Batista (PQ), Fernando Macedo Jr.<sup>1</sup>(PQ)

<sup>1</sup>Laboratório de Moléculas Bioativas, Departamento de Química, Centro de Ciências Exatas, Universidade Estadual de Londrina (UEL), Londrina, PR.

Palavras-Chave: cafeína, alcalóides, RMN.

### Introdução

O café possui alcalóides bioativos, tais como cafeína, teobromina e teofilina (metilxantinas)<sup>1</sup>, sendo uma das bebidas mais consumidas no planeta<sup>1</sup>. A cafeína (1,3,7-trimetilxantina) apresenta atividade sobre o sistema nervoso central, e é encontrada em altas quantidades em espécies de *Coffea sp.* (família Rubiaceae). Variados métodos instrumentais<sup>2</sup> são usados para quantificar alcalóides de plantas, incluindo a espectroscopia de RMN de <sup>1</sup>H<sup>3</sup>. Entretanto, a maioria destes casos envolvem procedimentos de extração e purificação das amostras, podendo interferir nos resultados<sup>1</sup>. Neste trabalho descrevemos uma metodologia simples e direta para a quantificação de cafeína em extratos aquosos de folhas de café por RMN de <sup>1</sup>H.

### Resultados e discussão

A quantificação de cafeína usando os sinais de RMN de <sup>1</sup>H das metilas ligadas à N1, N3 e N7 é dificultada pela sobreposição de picos de açúcares e aminoácidos presentes no extrato aquoso das folhas (Fig. 1).

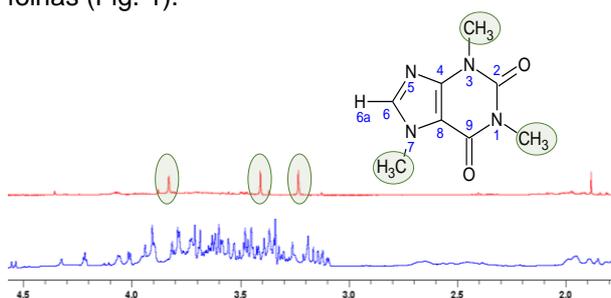


Figura 1. Ampliação (1,8 – 4,5ppm) de espectros de RMN de <sup>1</sup>H do extrato de folhas (abaixo-azul) e do padrão de cafeína (acima-vermelho).

Assim, neste trabalho, aplicamos a técnica eletrônica ERETIC2 (*Electronic to Access In Vivo Concentration*)<sup>4</sup> para comparar quantitativamente, a área do sinal de RMN do H ligado ao C6 (Fig. 2) com um sinal de RMN calibrado de um padrão externo (trimetilsilil-propanossulfonato de sódio 0,5mM).

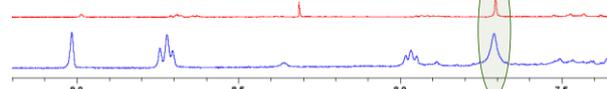
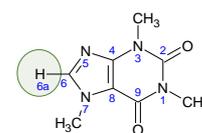


Figura 2. Ampliação (7,3 – 9,2ppm) de espectros de RMN de <sup>1</sup>H do extrato de folhas (abaixo-azul) e do padrão de cafeína (acima-vermelho).

Tabela 1. Dados de quantificação.

Folhas <sup>a</sup> (g)	[cafeína] (mM)	Teor <sup>b</sup> (%)
10,804	2,60	0,47

<sup>a</sup> Massa seca de folhas extraída em 100mL de água.

<sup>b</sup> Teor de cafeína por massa seca de folhas.

Os dados obtidos no ERETIC2 (concentração de cafeína na solução aquosa) foram relacionados com o teor de cafeína com base na massa seca de folhas. Os valores se encontram dentro da faixa de teores descritos na literatura para quantificação de cafeína em folhas de *C. arábica* por outros métodos.

### Conclusões

Neste trabalho foi utilizada uma metodologia para quantificação do teor de cafeína em extratos aquosos de folhas de *Coffea arabica*. Este protocolo dispensa o uso de padrões internos e a eliminação de metabólitos predominantes.

### Agradecimentos

Laboratório Multiusuário de Espectroscopia - UEL

### Referências e notas

- (1) Tavares L. A., Ferreria G. A. Análises quali- e quantitativa de cafés comerciais via Ressonância Magnética Nuclear. *Quim. Nova*, Vol. 29, No. 5, 911-915, 2006.
- (2) De Maria C. A. B., Moreira R. F. A. Cafeína: revisão sobre métodos de análise. *Quim Nova*. Vol 30, n° 1, 99-105, 2007.
- (3) Bosco, M., Toffanin, R., Palo, Dd, Zatti, L. e Segre, A. (1999), High-resolution <sup>1</sup>H NMR investigation of coffee. *J. Sci. Food Agric.*, 79: 869-878.
- (4) Wider G & Dreier L., *J. Am. Chem. Soc.*, 2006, 128 (2571-2576).



Categoria: Trabalho Completo

## Uso de Resido Industrial de Própolis em Possíveis Antimicrobianos Naturais

Paulo Sergio Romanin Zaia<sup>1</sup> (PG), Maria Carolina Carneiro<sup>2</sup> (PG), Nilton Syogo Arakawa<sup>1,2</sup> \* (PQ);  
arakawans@uel.br; paulo.sergio.romanin@uel.br

1 - Departamento de Química, Universidade Estadual de Londrina, PR - Brasil.

2 - Departamento de Ciências Farmacêuticas, Universidade Estadual de Londrina, PR - Brasil.

Palavras-Chave: Própolis, Fitoterapia, Fungicida.

### Introdução

A própolis apresenta um grande espectro de usos, tanto pelas abelhas quanto para o ser humanos, tal resina produzida pelas abelhas apresenta como funcionalidade principal a proteção da colmeia contra ameaças externas.<sup>1</sup>

O emprego da própolis em saúde humana se deve *a priori* pela observação da natureza, onde o ser humano aprendeu a utilizar seus benefícios notando a interação dela com agentes externos à colmeia, os fungos são uma dessas possíveis ameaças podendo levar a colmeia a erradicação. Atualmente a própolis é comercializada em forma de extrato hidroalcolólico, em sua produção é gerado um rejeito resinoso de alta viscosidade que representa de 40 a 60% da massa inicial na extração.<sup>2</sup> Esse rejeito é comumente utilizado para iscas de novas colmeias e seu excedente é direcionado a aterros sanitários ou lixões, contribuindo na diminuição da vida útil deles.

Considerando que fungos e bactérias tendem a apresentar um grande problema para a saúde humana, com grande dispersão e alta propagação e adaptabilidade aos fármacos existentes, que por sua vez apresentam alta toxicidade, infecções e micoses tem se mostrado cada vez mais intensas, ocasionado a necessidade de descobertas de novos tratamentos e novos fármacos.<sup>3</sup> Em vista do supracitado, o trabalho objetivou verificar a potencial atividade antimicrobiana de extratos e frações de resíduo de própolis em cultivos de microrganismos de referência.

### Resultados e discussão

As frações desenvolvidas pela equipe do LabBioTransFito (figura1) passaram por processo de salinização controlada para aumentar a solubilidade em solventes polares. Posterior à salinização, a fração de interesse foi solubilizada, e submetida a bioensaios de microdiluição em caldo,

em meio de cultivo Sabouraud caldo e ágar caldo. Para determinação da concentração inibitória mínima, foi realizado o teste de microdiluição em caldo, onde amostra salinizada foi adicionada nos poços de uma microplaca contendo meio Sabouraud, após 24hrs uma alíquota foi retirada do poço onde não se observou crescimento em; *Escherichia coli* ATCC 25922 em 500µg/mL, em *Staphylococcus aureus* ATCC 25923 em 125µg/mL e com *Candida albicans* ATCC 10231 em 250µg/mL e fungistático em 125 µg/mL. como resultado obtido da amostra salinizada apresentou atividade fungicida em uma concentração de cinquenta por cento menor que o fármaco mais utilizado comercialmente.



Figura 1. Frações de rejeito industrial de própolis. Autoria própria.

### Conclusões

Os resultados obtidos neste trabalho evidenciaram que o rejeito industrial da própolis apresenta um grande potencial para o desenvolvimento de fármacos mais econômicos e eficientes para o tratamento de micoses.

### Agradecimentos

CAPES, UEL, LABBA, LabBioTransFito, LabSPEC, Fazendas Zaia, Eletrônica Santa Maria.

### Referências e notas

- (1) Castaldo, S.; Capasso, F., *Fitoterapia*, 73, Supplement 1, 2002, Pages S1-S6da Silva, J. F. M.; Garden, S. J.; Pinto, A. C. J. *Braz. Chem. Soc.* 2001, 12, 273.
- (2) HEIMBACH, Natália da Silva, *et al.* RESÍDUO DA EXTRAÇÃO DE PRÓPOLIS COMO INIBIDOR BACTERIANO IN VITRO. *Rev. Bras. Saúde Prod. Anim.*, Salvador, v.17, n.1, p.65-72 jan./mar., 2016
- (3) WHO fungal priority pathogens list to guide research, development and public health action. 2022, 16, 90.



Categoria: Trabalho Completo

## Desenvolvimento e Avaliação de Sabonete Repelente

Alice Cruz<sup>1</sup> (TC), Daniela Mello<sup>1</sup> (TC), Gabriel Paulino<sup>1</sup> (TC), Gabrielly Alves<sup>1</sup> (TC), Giovanna Dias<sup>1</sup> (TC), Julie de Oliveira<sup>1</sup> (TC), Raissa De Oliveira<sup>1</sup> (TC), \*Tauany Dos Santos<sup>1</sup> (TC), \*Daniel Bonfim<sup>1</sup> (orientador).  
tauany581@gmail.com, daniel.vitor.bonfim@gmail.com

1 - Centro Estadual de Educação Profissional Professora Maria do Rosário Castaldi, PR - Brasil.

Palavras-Chave: Sabonete, Repelente, Cravo-da-Índia.

### Introdução

Sabonetes são definidos como sais de ácidos graxos, com uma estrutura química anfífilica, onde uma parte do ácido graxo é hidrofóbica (não se dissolve na água) e outra é hidrofílica (interage com a água). Essa característica permite que o sabonete tenha a propriedade de limpar<sup>1</sup>. Seu uso tornou-se socialmente relevante quando a higiene pessoal passou a ser valorizada. Hoje em dia, o sabonete é um item essencial para remover impurezas, bactérias e oleosidade, contribuindo para a saúde pública como agente desinfetante e antisséptico<sup>2</sup>. Além dessas propriedades, o sabonete pode ser enriquecido com substâncias que agregam novas funções, como a adição de óleo de cravo-da-índia, que confere propriedades repelentes de insetos<sup>3</sup>. No entanto, este óleo apresenta um odor forte e característico, provocando sensações olfativas desagradáveis em algumas pessoas<sup>4</sup>.

Neste contexto, o presente trabalho visa formular sabonetes repelentes utilizando a extração de óleos de cravo-da-índia, limão e maracujá.

### Resultados e discussão

Os sabonetes foram formulados com glicerina, óleo de amêndoas, lauril líquido, extrato glicólico de aveia, corantes azul e amarelo, álcool de cereais, e óleos essenciais de maracujá, cravo-da-índia e limão. Os óleos essenciais foram extraídos por meio de processos de destilação.

Os ensaios organolépticos realizados foram adaptados dos procedimentos recomendados pela ANVISA (2008). Os resultados, apresentados no quadro a seguir, indicam a avaliação sensorial do produto, expressa em porcentagem de conformidade.

Teste organoléptico	Sabonete - Limão	Sabonete - Maracujá
Separação de fase	100%	20%

Aspecto - Precipitação	100%	0%
Cor	0%	100%
Odor	0%	10%

Quadro 1. Avaliação Sensorial. Fonte: Os autores

A avaliação sensorial dos sabonetes revelou desvios em relação ao perfil aromático desejado. No sabonete de maracujá, a nota de cravo apresentou maior projeção olfativa, sobrepondo-se à fragrância do maracujá obtida. O sabonete de limão apresentou um perfil aromático mais fraco. A aparência do limão ficou uniforme, em contrapartida o maracujá apresentou precipitação na parte inferior. A cor do sabonete de limão não correspondeu com a cor do padrão.

Os parâmetros de controle de qualidade, como pH e alcalinidade, estão de acordo com as exigências da ANVISA, com o pH inferior a 10,4 e a alcalinidade próxima de 0%.

### Considerações finais

A incorporação de essência de cravo da Índia à formulação do sabonete mostrou-se viável. Contudo, as tentativas de mascarar o odor característico do cravo com outras fragrâncias não obtiveram sucesso, sendo a nota aromática do cravo predominante. Ademais, as características visuais do produto final não atenderam aos padrões estabelecidos.

### Agradecimentos



### Referências e notas

- (1) Arasaretnam, S.; Venujah, K. *Natural Products Chemistry & Research*. **2019**, *7*, 1.
- (2) Miranda, V.; et. al. *Revista Brasileira de Extensão Universitária*. **2021**, *12*, 1.
- (3) Santos, W.; Stadler, J.; Giusti, E.; Chendynski, L.; Gomes, S. *Ensaio e Ciência: Ciências Biológicas, Agrárias e da Saúde*. **2023**, *27*, 89.
- (4) Singh, J.; Baghotia, A. *Int. J. Res. Pharm. Biomed. Sci*. **2012**.
- (5) ANVISA. *Guia de Controle de Qualidade de Produtos Cosméticos*, **2008**.



Categoria: Projeto

## Selenocianatos: em busca de seletividade citotóxica para agentes antiplasmodiais.

Amanda Figueiredo<sup>1</sup> (IC), Gustavo Viana<sup>2</sup> (PQ), Anna Paola Butera<sup>1</sup> (PQ).

\*paolabut@uel.br

1 - Departamento de Química, Universidade Estadual de Londrina, PR - Brasil.

2 - Departamento de Biotecnologia, Universidade Federal de São João Del Rei, MG - Brasil

Palavras-Chave: Malária, Antiplasmodial, Heme, Selenocianatos

### Introdução

A malária é uma doença infecciosa endêmica de regiões tropicais e subtropicais no planeta, com altas taxas de mortalidade e morbidade causada pelo parasita do gênero *Plasmodium*, na qual o *P. falciparum* está envolvido nas complicações da doença e na resistência aos medicamentos indicados para o tratamento<sup>1</sup>. O parasito, ao infectar os eritrócitos degrada a hemoglobina para obtenção de nutrientes. Como resultado, ocorre a liberação no meio do grupo heme, que é tóxico por gerar espécies reativas de oxigênio capazes de causar danos a células do parasito. Com isso, como forma de escape ele transforma o grupo heme tóxico em hemozoína, um polímero insolúvel e atóxico<sup>2</sup>. No presente trabalho, propõe-se a síntese de isómeros de **1a/b**<sup>3</sup>, com vistas a encontrar derivados com melhor índice de citotoxicidade seletiva (IS) (Figura 1). Chao, *et al.*<sup>4</sup>, identificaram, previamente, agentes tripanosomidas a partir desta abordagem.

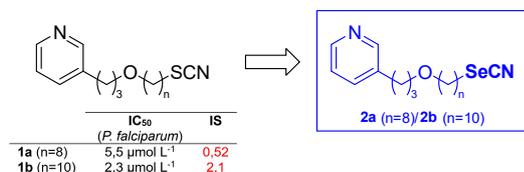


Figura 1. Planejamento de **2a/2b**.

### Metodologia

Os compostos **2a/b** serão obtidos pela reação de **4a/b** com KSeCN em presença de éter 18-cora-6 e THF<sup>4</sup>. O precursor **4a/b** será obtido a partir de **3a/b**, cuja síntese foi descrita anteriormente. Os compostos **2a/b** serão avaliados frente à interação com o grupo heme, a partir da determinação das respectivas constantes de dissociação dessas interações através da titulação espectroscópica de absorção UV-vis e em ensaio de atividade

antiplasmodial (*P. falciparum*) e citotóxica em células humanas (para determinação do IS).

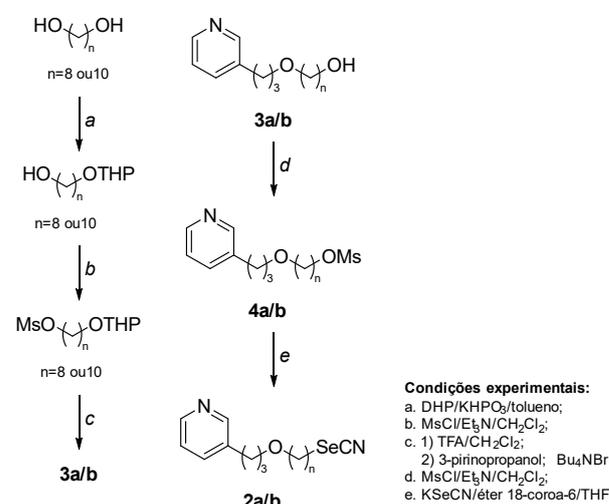


Figura 2. Rota de síntese proposta para obtenção de **2a/b**.

### Resultados esperados

O presente trabalho visa ampliar uma quimioteca de derivados heterocíclicos sujeita sistemática avaliação frente a ensaios celulares, como ensaios de atividade antiplasmodial e de seletividade citotóxica, bem como a estudos complementares de interação com grupo heme.

### Agradecimentos

À Fundação Araucária pela concessão da bolsa PIBIS.

### Referências

- (1) WHO. 2020. Report on antimalarial drug efficacy, resistance and response: 10 years of surveillance (2010–2019).
- (2) Chugh, M. *et al.* PNAS. 2013. 110, 5392.
- (3) Barbosa, M. C. *et al.* MRGTEM. 2018. 825, 31.
- (4) Chao, M. N. *et al.* Bioorg. Med. Chem. 2017. 25, 6435.



Categoria: Projeto

## Síntese de polímero de manose e fucose para aplicação como componente de sistema lipossomal vetorizado para tratamento de tuberculose

Carolina Kovelis<sup>1</sup>(PG), Anna Paola Butera<sup>1</sup>(PQ), Renato Ribeiro-Viana<sup>2</sup> (PQ), Marcelle Bispo<sup>1</sup> (PQ)\*

\*mlfbispo@uel.br

<sup>1</sup>Departamento de Química, Universidade Estadual de Londrina, PR-Brasil, <sup>2</sup>Departamento de Química, Universidade Tecnológica Federal do Paraná, PR-Brasil

Palavras-Chave: Lipossoma, Glicoconjugado, Carboidratos, *Mycobacterium tuberculosis*

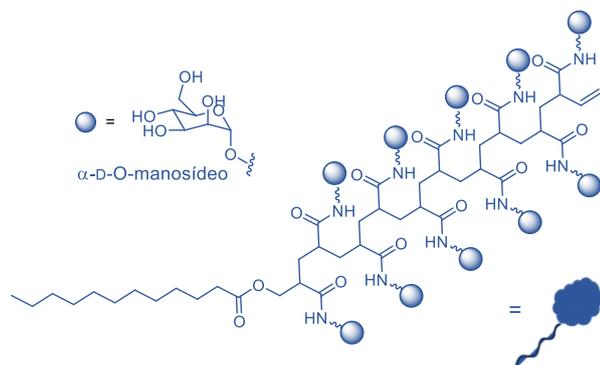
### Introdução

A tuberculose (TB) é a segunda doença infecciosa que causa mais mortes em todo o mundo. Trata-se de uma doença provocada por uma bactéria intracelular, *Mycobacterium tuberculosis*<sup>1</sup>. A eficácia da terapia para TB é geralmente limitada. Nesse contexto, os lipossomas funcionalizados sacarídeos de D-manose e L-fucose apresentam-se como alternativas de vetorização de antibióticos específicos a macrófagos infectados por *M. tuberculosis*<sup>2</sup>. A encapsulação de fármacos pelos lipossomas e sua liberação controlada prolonga o tempo de circulação do fármaco no sangue, diminui sua toxicidade em comparação ao ativo na forma livre e melhora sua biodisponibilidade<sup>3</sup>.

### Metodologia

Glicoconjugados de D-manose e L-fucose serão sintetizados via reação de polimerização de glicosídeos correspondentes, funcionalizados com grupo acrilóila, empregando-se peróxido de dilauróila como iniciador radicalar. Estes serão caracterizados pela determinação de tamanho (RMN/DLS) e estrutura (RMN <sup>1</sup>H e <sup>13</sup>C) (Figura 1).

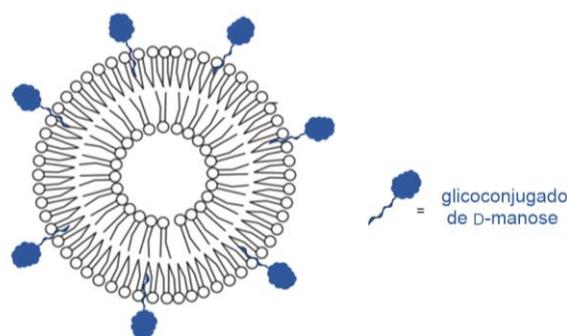
Figura 1. Estrutura do glicoconjugado de D-manose.



Para a montagem do sistema lipossomal serão utilizadas proporções diferentes de fosfatidilcolina (PC) e colesterol (COL), em presença dos glicoconjugados supracitados. Estes serão

caracterizados em relação à eficiência de encapsulamento do fármaco e tamanho. Os lipossomas funcionalizados serão avaliados quanto às suas capacidades de direcionamento seletivo de fármacos, em modelos de macrófagos infectados e não infectados por *M. tuberculosis*. Na Figura 2 representa-se o lipossoma funcionalizado com o glicoconjugado de D-manose.

Figura 2. Sistema lipossomal funcionalizado com o glicoconjugado de D-manose.



### Resultados esperados

Espera-se desenvolver formulações eficientes contendo lipossomas vetorizados com glicoconjugados de D-manose ou L-fucose que apresentem boa resposta no direcionamento de fármacos a macrófagos infectados com *M. tuberculosis*.

### Agradecimentos

LP MBA-UEL; LasMMed-UEL Ao CNPq pelo fomento.

### Referências e notas

- (1) HUCK, B. C. et al. *Adv. Healthc. Mater.* **2022**. 11. 2102117.
- (2) SONG X. et al. *Pharm. Res.* **2015**. 32, 1741.
- (3) MO et al., *Nanomedicine: NBM.* **2018**. 14. 557.



Categoria: Projeto

## CARACTERIZAÇÃO ANATÔMICA, HISTOQUÍMICA E FITOQUÍMICA DAS PARTES ALADAS DE *Baccharis myriocephala* DC. (Asteraceae)

Isabela B. Piacenti (IC)<sup>1</sup>, Pedro A. Souza (PG)<sup>2</sup>, Cristiano Medri (PQ)<sup>\*1</sup>, isabaptistotti@gmail.com, pedroaugusto.souza@uel.br, [cristianomedri@uel.br](mailto:cristianomedri@uel.br)\*

<sup>1</sup>Departamento de Biologia Animal e Vegetal, Universidade Estadual de Londrina, PR – Brasil.

<sup>2</sup>Departamento de Ciências Farmacêuticas, Universidade Estadual de Londrina, PR – Brasil.

Palavras-Chave: *Baccharis myriocephala*, histoquímica, fitoquímica, Asteraceae.

### Introdução

O gênero *Baccharis*, conhecido popularmente como “carquejas” ou “vassourinhas”, apresenta cerca de 180 espécies no Brasil.<sup>3</sup> Muitas delas são utilizadas na medicina popular para tratamentos de enfermidades como úlceras, ferimentos, febre, problemas gastrointestinais, aplicadas na maioria das vezes como chás.<sup>1</sup> Os metabólitos mais encontrados nesse gênero compreendem óleos essenciais, flavonoides, diterpenos, triterpenos e cumarinas.<sup>2</sup> Durante a revisão bibliográfica realizada sobre *Baccharis myriocephala* DC., foram encontrados poucos trabalhos sobre a espécie. O presente projeto tem como objetivo realizar caracterizações, anatômicas, histoquímicas e fitoquímicas das partes aladas de *B. myriocephala*, com a finalidade de documentar sua organização anatômica e localizar compostos de interesse reservados nos tecidos a fim de contribuir com conhecimentos científicos e o desenvolvimento de futuras pesquisas sobre a espécie.

### Metodologia

O material vegetal a ser utilizado será coletado no Morro da Pedra Branca, Ortigueira – PR. O material fresco será utilizado para a caracterização anatômica por meio de secções transversais, longitudinais e paradérmicas feitas manualmente, com posterior coloração em azul de toluidina para a evidenciação dos tecidos. A caracterização histoquímica investigará a presença de 1) fenólicos totais; 2) taninos; 3) alcaloides; 4) flavonoides; 5) lipídios; e 6) amido, através de reações colorimétricas e de precipitação. Para os testes fitoquímicos será utilizado material seco em estufa a 30°C, com posterior trituração e armazenamento em frasco âmbar. Este material será utilizado para a confecção de extratos que serão utilizados na

identificação de metabólitos secundários por reações com solventes orgânicos.

### Resultados esperados

Espera-se caracterizar os tecidos e identificar e localizar os compostos biossintetizados por *B. myriocephala*.

### Considerações finais

O projeto proporcionará a oportunidade da elaboração de artigos científicos, que serão publicados em revistas indexadas, dessa forma contribuindo para o desenvolvimento e fortalecimento de pesquisas em produtos naturais a partir de *B. myriocephala*.

### Agradecimentos

Os autores agradecem ao NAPI - Biodiversidade, Recursos Genéticos e Biotecnologia, LAMAVE e LabBioTransFito pela oportunidade e incentivo para a realização deste projeto.

### Referências e notas

- (1) ABAD, M. J.; BERMEJO, P. *Baccharis* (Compositae): a review update. *ARKIVOC*, v. 7, p. 76–96, 2007.
- (2) FERNANDES, G. W.; OKI, Y.; BARBOSA, M. *Baccharis*: from evolutionary and ecological aspects to social uses and medicinal applications. Cham, Switzerland: Springer, 2021.
- (3) Heiden, G. *Baccharis in Flora e Funga do Brasil*. Jardim Botânico do Rio de Janeiro. Available at: <<https://floradobrasil.jbrj.gov.br/FB5151>>. consulta.publica.uc.citacao.acesso.em22 set. 2024.



Categoria: Trabalho Completo

## Formulação e aceitação de perfume artesanal utilizando produtos naturais.

Alessandra Isidoro<sup>1</sup> (TC), Asafe De Lucas<sup>1</sup> (TC), Geovanna Beatriz<sup>1</sup> (TC), \*Leticia Coelho<sup>1</sup> (TC), Maria Beatriz<sup>1</sup> (TC), \*Daniel Bonfim (Orientador). [leticia Coelho1997@gmail.com](mailto:leticia Coelho1997@gmail.com)  
[daniel.vitor.bonfim@gmail.com](mailto:daniel.vitor.bonfim@gmail.com)

1 - Centro Estadual de Educação Profissional Professora Maria do Rosário Castaldi, PR - Brasil.

Palavras-Chave: *Perfume, Limoneno, Cítrico.*

### Introdução

O perfume se origina na idade antiga, predominantemente nas civilizações egípcias, mesopotâmicas e indianas, por volta de 3.000 a.C. Eram utilizadas fragrâncias feitas de flores, óleos e resinas para cuidados pessoais e rituais religiosos. Para a sociedade, o perfume simboliza individualidade, formas de expressão pessoais e confiança. Além de ser utilizado em diversas práticas sociais e religiosas, também é ligado às memórias olfativas, bem-estar e mudança de emoções e sentimentos<sup>1</sup>. As notas olfativas de um perfume são classificadas em três categorias: notas de topo ou iniciais (as primeiras fragrâncias percebidas), notas de coração ou corpo (que formam o núcleo do perfume) e notas de base (responsáveis pela fixação e fundo da fragrância). Cada grupo de fragrâncias é capaz de evocar diferentes sensações, como as notas cítricas, que frequentemente transmitem frescor e limpeza<sup>2,3</sup>. Com base nessas características, o objetivo deste trabalho é desenvolver um perfume voltado para o público adolescente, proporcionando uma sensação de frescor e ânimo.

### Resultados e Discussão

O trabalho desenvolvido resultou na criação de um perfume cítrico utilizando dois óleos essenciais extraídos diretamente das cascas de limão e laranja. A escolha dos óleos foi baseada na literatura<sup>3</sup>, pois ambos os cítricos são conhecidos por suas propriedades frescas, características essenciais para a base do perfume. Além dos óleos essenciais de limão e laranja, foram incorporadas duas essências prontas: abacaxi e hortelã. O abacaxi apresenta uma fragrância doce<sup>4</sup>, suavizando o toque ácido dos cítricos e adicionando um toque frutal à composição, já a hortelã trouxe uma nota refrescante<sup>3</sup>, reforçando a sensação de frescor e leveza.

Com o perfume pronto, foi feita uma pesquisa com 20 pessoas, meninos e meninas entre a faixa de 16-17 anos, o resultado da pesquisa é apresentado na tabela abaixo,

**Quadro 1.** Resultados da pesquisa sobre aprovação das características do perfume.

COR	85%
AROMA	91%
INTENSIDADE DO PERFUME	89%
SENSAÇÃO NA PELE	83%

Fonte: os próprios autores (2024)

A avaliação do perfume revelou que a cor do frasco foi amplamente aprovada pela maioria dos participantes, destacando seu papel crucial na percepção inicial do produto. Essa escolha estética pode influenciar as expectativas sobre a fragrância. O aroma obteve uma pontuação de 91%, indicando que a combinação das notas olfativas agradou significativamente. Além disso, a sensação na pele, com 83% de aprovação, sugere que a formulação é confortável e não causa irritações.

### Considerações finais

Os resultados da pesquisa indicam que a combinação da cor do frasco e a fragrância do perfume criaram uma experiência positiva para os participantes.

### Agradecimentos



### Referências e notas

- (1) Fadel, D.; *Thematics Journal of History*. 2021, 7(2), 1.
- (2) Silva, C.; Mazzilli, C. *ArcosDesign*. 2020, 13, 27.
- (3) Doucé, L.; Janssens, W. *Environment and Behavior*. 2011, 45(2), 215.
- (4) Pino, J. *Int. Food Sci. + Tech*. 2013, 48(3), 564.



Categoria: Projeto

## Biotransformação fúngica do ácido caurenóico pelo fungo *Cunninghamella echinulata* e investigação do mecanismo de ação molecular antimicrobiano de seus análogos

Maria Carolina Carneiro (PG)<sup>1</sup>, Nilton Syogo Arakawa (PQ)\*<sup>1</sup>.

arakawans@uel.br

<sup>1</sup> - Departamento de Ciências Farmacêuticas, Universidade Estadual de Londrina, PR – Brasil  
Palavras-Chave: Biotransformação, Antimicrobianos, Ácido caurenóico.

### Introdução

As plantas medicinais têm sido utilizadas desde os primórdios da humanidade, e ainda possuem grande importância para a população mundial. A *Sphagneticola trilobata* é uma espécie de planta nativa da região sul do Brasil, e produz diversas substâncias como os diterpenos, dentre essa classe, destaca-se o ácido caurenóico, que possui atividades anti-inflamatórias, antitérmicas e anti-hiperalgésicas.<sup>1</sup> Um meio para obtenção de compostos com atividades melhoradas é por meio de transformações químicas conduzidas por microrganismos, como a biotransformação, um processo biológico onde um composto orgânico é modificado através de uma reação simples. No processo de biotransformação, os fungos do gênero *Cunninghamella* destacam-se por catalisar reações simulando o metabolismo dos mamíferos, além disso, a biotransformação apresenta vários benefícios, e é considerada uma tecnologia inovadora.<sup>2</sup>

### Metodologia

Para o processo de biotransformação, o fungo *C. echinulata* será previamente cultivado em *Potato Dextrose Agar* e incubado a 30°C, em seguida, os esporos serão coletados para contagem em câmara de Neubauer e serão inoculadas alíquotas dessa suspensão, para obter  $1.10^4$  esporos/mL, que serão adicionados a frascos de Erlenmeyer com 400 mL de meio Czapeck, onde serão adicionados 0,2 mg/mL de ácido caurenóico para o processo de biotransformação, sendo diariamente monitorado por cromatografia em camada delgada até o desaparecimento completo da mancha referente ao ácido caurenóico, ou seja, até que a total bioconversão seja observada. Após essa etapa, será realizado o isolamento e purificação do composto biotransformado,

realizando a filtração da biomassa, extração com acetato de etila e purificação através de modalidades cromatográficas com sílica gel. A identificação do composto será realizada por análise em RMN <sup>1</sup>H.

E para a avaliação da atividade antimicrobiana da substância resultante da bioconversão, será realizado o método de microdiluição em caldo, para determinação da concentração inibitória mínima, utilizando cepas de bactérias e fungos cedidas pelo Laboratório de Bacteriologia Básica e Aplicada.

### Resultados esperados

São esperados a biotransformação fúngica do ácido caurenóico e a avaliação da atividade antimicrobiana de seus análogos estruturais visando determinar o mecanismo de ação molecular, além de prever o principal metabólito formado após o processo de metabolização deste diterpeno, para obtenção de novos compostos antimicrobianos.

### Considerações finais

Esse trabalho buscará a realização da biotransformação, uma tecnologia de química verde e verificação da atividade antimicrobiana de um possível novo composto resultante do processo.

### Agradecimentos

Agradeço à CAPES, ao LabBiotransFito, ao LABBA e ao LabESPC pelo incentivo e oportunidade.

### Referências e notas

- (1) Kiem, P. V.; Cai, X. F.; Minh, C. V. *Planta Med.* **2004**, 70, 201.
- (2) Amadio, J.; Murphy, C. D. *Applied Microbiology and Biotechnology.* **2010**, 86, 345-351.



Categoria: Projeto

## Triagem virtual e síntese de híbridos indol-tioureia como potenciais inibidores de urease

Maria Eduarda Crescêncio da Silva (IC)<sup>1</sup>, Mariana Luiza Silva (PG)<sup>1</sup>, Marcelle de L. F. Bispo (PQ)<sup>1\*</sup>

1 - Departamento de Química – Universidade Estadual de Londrina, Londrina, PR - Brasil.

Palavras-Chave: Docking molecular, atividade antiureolítica, antimicrobianos.

### Introdução

A urease é uma enzima que catalisa a hidrólise da ureia em amônia e dióxido de carbono, essencial para a sobrevivência de microrganismos patogênicos como *Helicobacter pylori* e *Cryptococcus spp.* Em *H. pylori*, a urease neutraliza o ácido gástrico, permitindo a colonização do estômago e causando infecções. No caso de *Cryptococcus spp.*, a urease facilita a invasão do sistema nervoso central, contribuindo para a patogenicidade. Como o substrato principal da urease é a ureia, núcleos que possuem semelhanças estruturais podem atuar como potenciais inibidores.<sup>1</sup> Nesse contexto, o grupamento tioureia é um bioisómero da ureia, o que facilita a interação com resíduos e cofatores importantes presentes no seu sítio ativo, aumentando as chances de inibição eficaz da enzima.<sup>2</sup> Além disso, o núcleo indólico é considerado uma estrutura privilegiada, devido ao seu amplo espectro de atividades biológicas, e ainda na literatura foram relatados bons resultados antiureolíticos em híbridos que contêm esses dois grupos.<sup>3</sup> Sendo assim, nesse projeto serão planejados híbridos indol-tioureia, que passarão por uma triagem virtual baseada em docking molecular, que identificará os inibidores mais promissores. Esses, por sua vez, serão sintetizados e terão seus potenciais de inibição testado *in vitro*.

### Metodologia

Serão utilizadas duas estruturas de urease, uma de origem vegetal (*Canavalia ensiformis*, PDB ID: 3LA4) e outra de origem bacteriana (*Helicobacter pylori*, PDB ID: 6ZJA), que serão devidamente otimizadas utilizando o software Discovery (v. 2021). Os protocolos de docking serão realizados utilizando o programa Gold (v. 2024), em suas quatro funções, tendo ancoragem no centro dos íons níquel do bolsão catalítico das enzimas. Serão selecionadas as substâncias com melhores interações com os alvos moleculares para a realização da síntese. A síntese das duas séries de substâncias (Figura 1) inicia-se pela formação dos

intermediários indólicos que será feita via a reação de indolização de Fischer, utilizando fenilhidrazinas e metilcetonas correspondentes em um meio contendo ácido para-toluenossulfônico e tolueno. Após a formação do indol, será realizada a reação com cloreto de tionila, seguida pela adição de tiocianato de amônio. A formação da tioureia será feita com a adição da amina de interesse<sup>4</sup>.

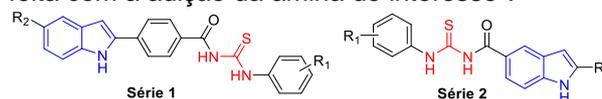


Figura 1. Séries das substâncias. Em azul: núcleo indólico, em vermelho: tioureia.

Os ensaios de inibição *in vitro* serão conduzidos com a urease de *Canavalia ensiformis*, adquirida comercialmente e/ou de *Cryptococcus spp.*, extraída pelos nossos colaboradores. A metodologia utilizada se baseará na formação do composto indofenol, a partir da reação de Berthelot, que ocorre entre o fenol e a amônia, na presença de um agente oxidante e de um catalisador.

### Resultados esperados

Espera-se selecionar por meio do docking molecular ao menos 5 substâncias mais promissoras por meio de melhores interações com as ureases, a fim de sintetizá-las, para que sejam comprovadas sua atividade inibitória por testes *in vitro*.

### Considerações finais

A abordagem computacional otimiza a síntese, priorizando substâncias com maior potencial inibitório, economizando tempo e recursos. Este projeto tem impacto prático no tratamento de infecções bacterianas e fúngicas, oferecendo soluções mais eficientes e inovadoras.

### Agradecimentos

Ao Network for the development of novel urease inhibitors – REDNIU pelo fomento.

### Referências e notas

- (1) Musiani, F. et al. *JBIC*. **2001**. 6, 300-314.
- (2) Balasubramanian, A. et al. *JMB*. **2010**. 3, 274-283.
- (3) Khan, et al. *Bioorganic Chemistry*. **2019**. 83, 595-610.
- (4) Brito, et al. *RSC Advances*. **2015**. 5, 507-515.



Categoria: Projeto

## Bioprospecção de Produtos Naturais Obtidos da Resina de *Araucaria columnaris* (J.R.Forst.) Hook (Araucariaceae)

Pedro A. de Souza<sup>1</sup> (PG), Nilton S. Arakawa<sup>1</sup> (PQ)\*; [arakawans@uel.br](mailto:arakawans@uel.br); [pedroaugusto.souza@uel.br](mailto:pedroaugusto.souza@uel.br)

<sup>1</sup>Departamento de Ciências Farmacêuticas-CCS, Universidade Estadual de Londrina, PR-Brasil.

Palavras-Chave: Biodiversidade; Araucariaceae; *Araucaria columnaris*; Fitoquímica; Bioatividade.

### Introdução

A natureza é fonte diversa de moléculas com várias utilidades comprovadas cientificamente. Boa parte destes compostos provêm de organismos vivos: estima-se que cerca de 40% dos medicamentos disponíveis na terapêutica atual foram desenvolvidos a partir de biomoléculas obtidas dessa origem, sendo 25% obtido de plantas<sup>1</sup>. Portanto, é notório o potencial de obtenção de novos fitofármacos através de estudos da flora, ainda mais considerando a megadiversidade brasileira.

Dos grupos botânicos de interesse científico e industrial, encontram-se as Gimnospermas, presentes no Brasil com 121 espécies, das quais 3 são endêmicas<sup>2</sup>. Grupo este que comporta as araucárias, árvores comumente encontradas nas regiões Sul e Sudeste do Brasil<sup>2</sup>. Deste grupo, *Araucaria angustifolia* é uma célebre, e bem estudada, espécie encontrada, principalmente, no Sul do Brasil e apresenta aplicações alimentícias, ornamentais, madeireiras e medicinais<sup>3</sup>.

Apesar de Araucariaceae, árvores nativas das Américas e Oceania<sup>2</sup>, ser bem estudada, algumas espécies permanecem com lacunas científicas, como a *Araucaria columnaris*: espécie cultivada no Brasil com finalidade ornamental.

Mesmo com estudos fitoquímicos de seus diversos órgãos, pouco se sabe a respeito de sua resina em termos fitoquímicos e de bioatividade.

Desta forma, este estudo objetiva obter e caracterizar, fitoquímica e biologicamente, o extrato etanólico, assim como suas frações e substâncias isoladas, da resina de *A. columnaris*.

### Metodologia

A resina será coletada em indivíduos situados na Universidade Estadual de Londrina, submetidas a limpeza e cominuição manuais com posterior armazenamento em frascos âmbar e extraídas com etanol absoluto por sonicação por 2h seguida de maceração clássica com coleta do extrato e

reposição do líquido extrator semanalmente. O extrato será submetido a filtração e secagem em rotaevaporação a pressão reduzida.

Para o processo de isolamento, o extrato bruto seco será submetido a uma bateria de métodos cromatográficos para obtenção de compostos isolados em quantidade suficiente para sua elucidação estrutural por RMN de <sup>1</sup>H e <sup>13</sup>C.

Para os bioensaios, o extrato, as frações e os isolados serão submetidos a microdiluição em caldo para verificação de atividade antimicrobiana contra *S. aureus*, *E. coli* e *C. albicans*. Bem como serão submetidos a testes antioxidantes (DPPH e ABTS) e fotoproteção *in vitro*.

### Resultados esperados

Espera-se encontrar metabólitos secundários terpênicos com bioatividade antimicrobiana, antioxidante e fotoprotetora.

### Considerações finais

Espera-se, com essa pesquisa, contribuir para o conhecimento científico da espécie, assim como encontrar substâncias potencialmente aplicáveis biotecnologicamente.

### Agradecimentos

Os autores agradecem à CAPES, CNPq, SETI, UEL, e LabBioTransFito pela oportunidade e incentivo para a realização desta pesquisa.

### Referências e notas

- (1) Calixto, J.B., Biodiversidade como Fonte de Medicamentos; *Ciência e Cultura*, São Paulo; **2003**, 55.
- (2) *Gimnospermas in Flora e Funga do Brasil*. Jardim Botânico do Rio de Janeiro. Available at: <https://floradobrasil.jbrj.gov.br/FB128477>. acesso.em16 out. 2024
- (3) Adan, N; Atchison, J.; Reis, M.S.; Peroni, N. Local Knowledge, Use and Management of Ethnovarieties of *Araucaria angustifolia* (Bert.) Ktze. in the Plateau of Santa Catarina, Brazil. *Economic Botany*, **2016**, 70, 353-364.



Categoria: Projeto

## Isolamento e Caracterização de Produtos Naturais Obtidos de Folhas de *Dyckia walteriana* Leme (Bromeliaceae)

Pedro A. de Souza<sup>1</sup> (PG), Cristiano Medri<sup>2</sup> (PQ), Nilton S. Arakawa<sup>1</sup> (PQ)\*; [arakawans@uel.br](mailto:arakawans@uel.br); [pedroaugusto.souza@uel.br](mailto:pedroaugusto.souza@uel.br)

<sup>1</sup>Departamento de Ciências Farmacêuticas-CCS, Universidade Estadual de Londrina, PR-Brasil.

<sup>2</sup>Departamento de Biologia Animal e Vegetal-CCB, Universidade Estadual de Londrina, PR-Brasil.

Palavras-Chave: Biodiversidade; Bromeliaceae; Pitcairnioideae; *Dyckia walteriana*; Fitoquímica; Bioatividade.

### Introdução

Atualmente, o alto risco de extinção de espécies vegetais é um grave problema devido ao desaparecimento e fragmentação de seus habitats<sup>1</sup>. Considerando a diversidade florística brasileira que, apenas de Angiospermas, apresenta 36.349 espécies, das quais 19.363 são endêmicas<sup>2</sup>, é uma perda considerável para a ciência de produtos naturais.

Dentro dessa biodiversidade ameaçada, se enquadra a família Bromeliaceae. Entrementes, este grupo botânico apresenta aplicações conhecidas na alimentação, obtenção de proteases e preparo caseiro de remédios<sup>3</sup>.

Apesar de pouco estudadas, sabe-se que as bromélias apresentam metabólitos característicos como os flavonoides metoxilados, considerados seus marcadores químicos, e diterpenos filocladanos, bem como triterpenos cicloartanos<sup>4</sup>.

Em meio às bioatividades documentadas, a antioxidante e suas derivações, como atividade gastroprotetora e anti-inflamatória, é a mais documentada, bem como sua atividade fotoprotetora.

Portanto, considerando o supracitado, o projeto objetiva investigar, fitoquímica e biologicamente, os extratos foliares de *Dyckia walteriana* Leme, espécie recém descrita pela ciência e ameaçada de extinção.

### Metodologia

Folhas frescas serão coletadas no Jardim de Espécies Ornamentais do CCB-UEL, submetidas a secagem em estufa a temperatura controlada, trituração em moinho de rotor, armazenamento em frascos âmbar e extraídas com etanol absoluto por sonicação por 2 h seguida de maceração clássica com coleta do extrato e reposição do líquido extrator semanalmente. O extrato será submetido a

filtração e secagem em rotaevaporação a pressão reduzida.

Para o processo de isolamento, o extrato bruto seco será submetido a uma bateria de métodos cromatográficos para obtenção de compostos isolados em quantidade suficiente para sua elucidação estrutural por RMN de <sup>1</sup>H e <sup>13</sup>C.

Para os bioensaios, o extrato, as frações e os isolados serão submetidos a microdiluição em caldo para verificação de atividade antimicrobiana contra *S. aureus*, *E. coli* e *C. albicans*. Bem como serão submetidos a testes antioxidantes (DPPH e ABTS) e fotoproteção *in vitro*.

### Resultados esperados

Espera-se encontrar metabólitos secundários fenólicos e terpênicos com bioatividade antimicrobiana, antioxidante e fotoprotetora.

### Considerações finais

Com os resultados desta pesquisa, espera-se preencher lacunas científicas sobre a fisiologia e adaptabilidade deste vegetal, bem como evidenciar potenciais aplicabilidades para a espécie.

### Agradecimentos

Os autores agradecem à CAPES, CNPq, SETI, UEL, LabBioTransFito, LAMAVE pela oportunidade e incentivo para a realização desta pesquisa.

### Referências e notas

1. Leme, E.M.C. *et al.* Miscellaneous new species in the Brazilian Bromeliaceae. *Rodriguésia*, **2010**, 61, 21-67.
2. *Angiospermas in Flora e Funga do Brasil*. Jardim Botânico do Rio de Janeiro. Available at: <https://floradobrasil.jbrj.gov.br/FB128482>. Acesso em 16 out 2024.
3. Lorenzi, H.; Matos, F.J.A. Plantas medicinais no Brasil: nativas e exóticas. 3ª ed. Nova Odessa, SP: Instituto Plantarum de Estudos da Flora, **2021**.
4. Manetti, L.M.; Delaporte, R.H.; Laverde Jr., A. Metabólitos secundários da família bromeliaceae. *Química Nova*, **2009**, 32, 1885-1897.



Categoria: Projeto

## Síntese e Avaliação de Derivados Cumarina-Pirazol com Potencial Atividade Antioxidante

Ryan A. Santos (IC)<sup>1</sup>, Ana H. F. Ayala (PG)<sup>1</sup>, Carla C. Perez (PQ)<sup>1\*</sup>

[ryan.alves.santos@uel.br](mailto:ryan.alves.santos@uel.br); [perezcc@uel.br](mailto:perezcc@uel.br)\*

<sup>1</sup> Laboratório de Síntese de Moléculas Mediciniais (LaSMMed), Dept. de Química, Universidade Estadual de Londrina, PR - Brasil

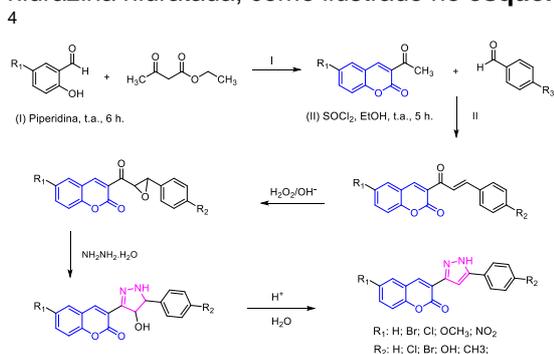
Palavras Chave: Pirazóis; Cumarinas; Antioxidante;

### Introdução

As espécies reativas de oxigênio (EROs) são fundamentais para a manutenção da vida, desempenhando um papel crucial em diversas funções biológicas. No entanto, o excesso dessas espécies pode causar desequilíbrios celulares, causando processos inflamatórios e contribuindo para o desenvolvimento de várias doenças. Com isso, a busca por compostos com propriedades antioxidantes, capazes de neutralizar esse excesso, se torna indispensável. Os núcleos cumarínico e pirazólico destacam-se por seu amplo e diverso potencial biológico, além de rotas sintéticas relativamente simples. Esses fatores associados a possibilidade de hibridização entre esses núcleos, ainda pouco explorada na literatura, os torna promissores para novas investigações. Assim, este trabalho tem como objetivo a síntese de híbridos moleculares de cumarinas e pirazóis com diferentes substituintes, bem como a avaliação e o estudo da relação estrutura-atividade de seu potencial antioxidante.<sup>1 2 3</sup>

### Metodologia

Os precursores cumarínicos serão preparados por meio de uma reação de condensação entre o salicilaldeído e o acetoacetato de etila. Esses precursores serão submetidos a uma nova reação de condensação com o aldeído. Por fim, a cumarilchalconas formadas serão submetidas a reações de epoxidação e serão tratadas com hidrazina hidratada, como ilustrado no **esquema 1**.

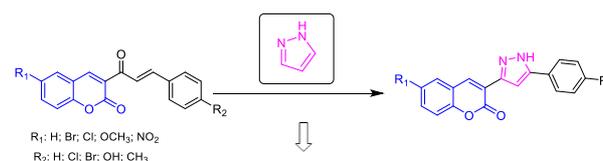


**Esquema 1** – Rota sintética proposta para a obtenção dos derivados Cumarina-pirazol

### Resultados esperados

Espera-se a síntese de 10 novos derivados híbridos, suas caracterizações estruturais e posterior avaliação dos seus potenciais antioxidantes visando estabelecer uma relação estrutura-atividade, como ilustrado no **esquema 2**.

Síntese de 10 novos derivados



Testes *in vitro* antioxidante



**Esquema 2.** Ilustração dos resultados esperados para o projeto.

### Considerações finais

Uma consequência esperada desse trabalho é o desenvolvimento de um novo princípio ativo com atividade antioxidante, que poderá ser incorporado em produtos para diferentes aplicações, tanto farmacêuticas quanto cosméticas. Podendo assim, contribuir para a prevenção de danos causados pelo estresse oxidativo.

### Agradecimentos



### Referências e notas

- JADHAV, N. K. et al. Synthesis and Functionalization of Coumarin-Pyrazole Scaffold: Recent Development, Challenges, and Opportunities. *Current Organic Synthesis*, v. 18, p. 685-710, 2021.
- SRIKRISHNA, D. et al. A Review on Pharmacological Properties of Coumarins. *Mini-Reviews in Medicinal Chemistry*, v. 18, p. 113-141, 2018.
- De Lima Cherubim, D. J. et al. Polyphenols as natural antioxidants in cosmetics applications. *Journal of Cosmetic Dermatology*, 19:33-37, 2020.
- ČAČIĆ, M.; MOLNAR, M.; STRELEC, I. Synthesis and biological evaluation of a novel series of 1,3-dicoumarinyl-5-aryl-2-pyrazolines. *Heterocycles*, v. 83, n. 7, p. 1553-1566, 27 jun. 2011.



Categoria: Projeto

## Síntese de glicoconjugado e aplicação como componente de sistema lipossomal vetorizado para células tumorais

Vitória Almeida<sup>1</sup>(PG), Amanda Figueiredo<sup>1</sup>(IC), Anna Butera<sup>1</sup>(PQ), Renato Ribeiro<sup>2</sup>(PQ) e Fernando Macedo<sup>1\*</sup>(PQ).

macedofc@uel.br

1 - Departamento de Química, Universidade Estadual de Londrina, PR - Brasil.

2 - Departamento de Química, Universidade Tecnológica Federal do Paraná, PR - Brasil.

Palavras-Chave: Lipossomas, Glicoconjugado, Nanocarreadores, Antitumorais.

### Introdução

Os fármacos anticâncer, tipicamente, apresentam sérios efeitos colaterais, uma vez que, ao destruírem as células tumorais, eles também agredem violentamente células normais, prejudicando, em grande medida, o bem-estar do paciente. Tendo-se em vista que alguns tipos de tumores, dentre eles, os de mama, superexpressam receptores de glicose do tipo 1 (GLUT1), o direcionamento de fármacos pode ser conquistado pela incorporação de um glicoconjugado de D-glicose a um sistema lipossomal apropriado para vetorização seletiva.<sup>1,2</sup>

### Metodologia

**(1) Síntese  $\beta$ -O-glicosídeo funcionalizado com grupo vinila:** Inicia-se pela peracetilação da D-glicose anidra, utilizando  $\text{Ac}_2\text{O}/\text{AcONa}$ , seguindo para a glicosilação com 2-(2-cloroetoxi)etanol e  $\text{BF}_3 \cdot \text{Et}_2\text{O}$  em presença de  $\text{CH}_2\text{Cl}_2$  seco. Em seguida, o grupo cloreto será substituído por reação com azida de sódio, seguida de hidrogenação catalítica, condensação com anidrido acrílico e reação com metóxido de sódio e metanol.

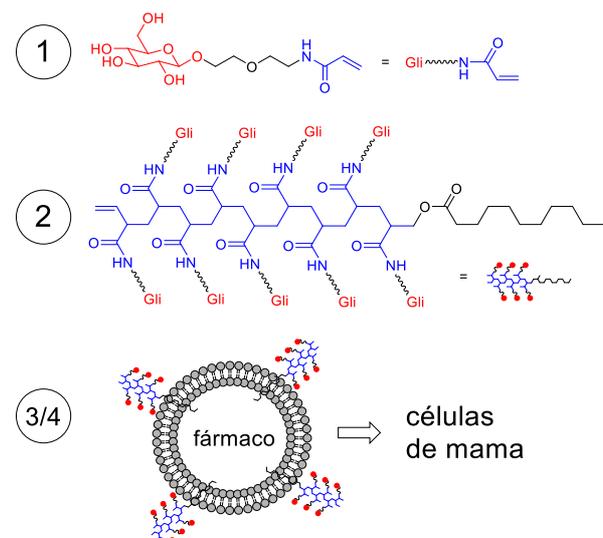
**(2) Síntese do glicoconjugado (GC):** O  $\beta$ -O-glicosídeo obtido na etapa 1 será submetido a reação de polimerização, com peróxido de dilauroíla, como iniciador radicalar, sendo caracterizado pela determinação de seu tamanho (RMN ou DLS) e sua estrutura (RMN  $^1\text{H}$  e  $^{13}\text{C}$ ).

**(3) Montagem e caracterização de lipossoma vetorizado:** Os lipossomas serão preparados a partir de fosfatidilcolina, em presença de GC, e caracterizados em relação à eficiência de encapsulamento do fármaco e tamanho.<sup>3</sup>

**(4) Avaliação da capacidade de direcionamento em modelos *in vitro*:** Os lipossomas

funcionalizados serão avaliados quanto às suas capacidades de direcionamento seletivo de fármacos em modelos celulares, envolvendo células saudáveis e células de carcinoma de mama.

Figura 1. Estratégia metodológica



### Resultados esperados

Espera-se obter um sistema lipossomal vetorizado eficiente, que apresente boa resposta no direcionamento de fármaco a células tumorais, com respostas positivas aos testes *in vitro*.

### Agradecimentos

CAPES. PPGQ-UEL.

### Referências e notas

- (1) MUTHU, M. S.; FENG, S. *Nanomedicine*, **2010**. 5. 1017
- (2) ELOY, J. O. **2016**. Tese de Doutorado. Universidade de São Paulo.
- (3) CAUVI, D. M. *et al. Membranes*. **2023**. 13. 141.