



ANAIS DA III SEMANA DA QUÍMICA E I WORKSHOP DA PÓS-GRADUAÇÃO EM QUÍMICA

2019
150 anos
da Tabela
Periódica

22 47.867 Ti TITAN	23 50.942 V VANADIUM	24 51.996 Cr CHROM		
39 88.906 Y YTTTRIUM	40 91.224 Zr ZIRKON	41 92.906 Nb NIOB	42 95.95 Mo MOLYBDAN	43 Tc TECHNETIUM
71 Lu LUTETIUM	72 178.49 Hf HAFNIUM	73 180.95 Ta TANTAL	74 183.84 W WOLFRAM	75 186.21 Re RHENIUM
104 (267) Rf RUFORDIUM	105 (268) Db DUBNIUM	106 (271) Sg SEABORGIUM		

VOLUME 1, 2019 | ISSN 2965-9248





ANAIS DA III SEMANA DA QUÍMICA E I WORKSHOP DA PÓS-GRADUAÇÃO EM QUÍMICA

2019
150 anos
da Tabela
Periódica

	IVB 5	VB 6	VIB 7
22 47.867	23 50.942	24 51.996	25 50.009
Ti	V	Cr	Mn
TITAN	VANADIUM	CHROMIUM	MANGANESE
39 88.906	40 91.224	41 92.906	42 95.95
Y	Zr	Nb	Mo
YTRITIUM	ZIRCONIUM	NIOBIUM	MOLYBDENUM
72 178.49	73 180.95	74 183.84	75 186.21
Hf	Ta	W	Re
HAFNIUM	TANTALUM	WOLFRAM	RHENIUM
104 (267)	105 (268)	106 (271)	107 (272)
Rf	Db	Sg	Bh
REIFORDIUM	DUBNIUM	SEABORGIUM	BERTHELIUM

VOLUME 1, 2019 | ISSN 2965-9248

De 10 a 13 de Junho de 2019

Organização: Karla da Silva Malaquias

UNIVERSIDADE FEDERAL DE JATAÍ
Cursos de Bacharelado e Licenciatura em Química
Programa de Pós-Graduação em Química

ANAIS DA III SEMANA DA QUÍMICA E I WORKSHOP
DA PÓS-GRADUAÇÃO EM QUÍMICA:
Novos desafios da química para o sudoeste

ORGANIZAÇÃO:
Karla da Silva Malaquias

Jataí - GO
2019

Volume 1: 2019
ISSN: 2965-9248

Projeto Gráfico:
Karla S. Malaquias

Editoração:
Karla S. Malaquias
Douglas Silva Machado
Liliane Nebo
Claudinei Alves da Silva

Revisão:

A revisão linguística e ortográfica é de responsabilidade dos autores. A grafia desta obra foi atualizada conforme o Acordo Ortográfico da Língua Portuguesa, de 1990, que entrou em vigor no Brasil em 1º de janeiro de 2009.

No ano em que celebramos os 150 anos da tabela periódica é realizada a III Semana da Química e I Workshop da Pós-Graduação em Química. Evento que possibilita momentos de aprendizado, descobertas e networking frutífero para todos os participantes. Assim como a reflexões sobre o papel da química na sociedade.

A programação do evento incluiu palestras, minicursos e apresentações de pesquisa. Estudantes de graduação e pós-graduação apresentaram seus trabalhos, sendo os melhores premiados.

Este evento também é uma oportunidade para os estudantes dos cursos de bacharelado e licenciatura em Química expandirem seus horizontes acadêmicos, desenvolverem novas habilidades e se conectarem com profissionais e pesquisadores renomados da área.

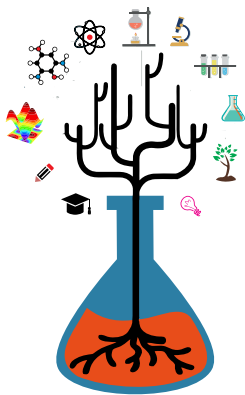
Agradecemos a todos os envolvidos na organização deste evento. Sem o esforço e dedicação deles, sua realização não seria possível.

Karla da Silva Malaquias

*Docente dos Cursos de Bacharelado
e Licenciatura em Química*

APRESENTAÇÃO DO EVENTO

Esse ano temos o prazer de anunciar mais uma Semana da Química! Já na sua terceira edição que ocorre anualmente no *Campus Jatobá* da Universidade Federal de Goiás - Regional Jataí, trazemos uma novidade: I Workshop da Pós-Graduação em Química. O evento envolve palestras, workshops e minicursos para graduandos e profissionais contando com a presença de profissionais renomados na comunidade científica. O tema abordado esse ano será "Novos Desafios da Química para o Sudeste Goiano" e ocorrerá entre os dias 10 a 13 de Junho.



O evento terá como público-alvo alunos de graduação, pesquisadores e alunos de pós-graduação da UFJ-UFJG/Jataí, instituições de ensino e pesquisa do estado de Goiás e de outros Estados, bem como profissionais atuantes em empresas da região.

Professor Douglas Silva Machado

*Docente nos Cursos de Bacharelado e Licenciatura em Química e
no Programa de Pós-Graduação em Química (UFJ)*

UNIVERSIDADE FEDERAL DE JATAÍ

Reitor:

*Prof. Dr. Américo Nunes da
Silveira Neto*

**Cursos de Licenciatura e
Bacharelado em Química**

**Programa de Pós-Graduação em
Química**

COMISSÃO ORGANIZADORA

Coordenação:

Profa. Dra. Tatiana Batista

Prof. Dr. Breno Almeida Soares

Prof. Dr. Douglas da Silva
Machado

Prof. Dr. Francismário F. Santos

Douglas: Prof. Dr. Gildiberto

Mendonça de Oliveira

Profa. Dra. Karla da Silva

Malaquias

Dr. Paulo de Tarso Garcia

Prof. Dr. Ricardo Alexandre

Figueiredo de Matos

Discentes:

Alexia da Costa Feliciano

Josimar Juvenal

Juliana Moraes dos reis

Júlio César Jerônimo

Péricles J.H. Cunha Lemos

Natália Figueiredo Vieira

COMISSÃO CIENTÍFICA /PARECERISTAS

Coordenação:

**Prof. Dr. Douglas da Silva
Machado**

Prof. Dr. Breno Almeida Soares

Prof. Dr. Francismário F. Santos

Douglas: Prof. Dr. Gildiberto

Mendonça de Oliveira

Prof. Dr. Giovanni C. Petrucelli Dr.

Paulo de Tarso Garcia

Prof. Dr. Ricardo Alexandre

Figueiredo de Matos

Profa Dra Tatiana Batista

Prof. Dr. Wesley F. Vaz

AVALIADORES

Prof. Dr. Breno Almeida Soares

Prof. Dr. Douglas da Silva Machado

Profa. Dra. Eveline B. Vilela Ribeiro

Prof. Dr. Gildiberto M. de Oliveira

Prof. Dr. Giovanni Cavichioli Petrucelli

Profa. Dra. Karla da Silva Malaquias

Profa. Dra. Liliane Nebo

Profa. Dra. Maria Helena S. Barroso

Prof. Dr. Nailton Monteiro do

Nascimento Junior

Prof. Dr. Paulo Freitas Gomes

Prof. Dr. Ricardo Alexandre

Figueiredo de Matos

Profa. Dra. Sueli Maria da Silva Profa.

Dra. Tatiana Batista

Profa. Dra. Tatiane Moraes Arantes

PROGRAMAÇÃO

Palestras

Palestra de abertura: Como criar um grupo de pesquisa em Química Medicinal: A origem do LaQMedSOMM

*Prof. Dr. Nailton Monteiro do Nascimento Júnior
Instituto de Química da Universidade Estadual Paulista "Júlio de Mesquita Filho" (UNESP - Araraquara)*

A importância da Revista Química Nova no processo de discussão e socialização das pesquisas da área de Química no Brasil

*Profa. Dra. Nyuara Araújo da Silva Mesquita
Química, Universidade Federal de Goiás,
Laboratório de Educação Química e Atividades Lúdicas*

Aspectos formativos relacionados à Educação Ambiental em cursos de Química em Goiás: do texto ao contexto

*Profa. Dra. Nyuara Araújo da Silva Mesquita
Química, Universidade Federal de Goiás,
Laboratório de Educação Química e Atividades Lúdicas*

Fab Lab: a cultura do faça você mesmo

*Prof. Dr. Marcelo Barbosa Furtini
Departamento de Construção Civil e Arquitetura. Centro de Tecnologia da
Universidade Federal do Piauí-UFPI*

A influência da luz nos materiais com argilas: fotodegradação ou fotoestabilidade?

*Profa. Dra. Josy Antevéli Osajima Furtini
Engenharia de Materiais da Universidade Federal do Piauí*

Sensores analíticos miniaturizados: dispositivos descartáveis e de baixo custo para aplicações no Point-of-Care

*Prof. Dr. Paulo de Tarso Garcia
Química, Regional Jataí, Universidade Federal de Goiás*

Sustentabilidade como tema transversal no ensino da química

*Profa. Dra. Karla da Silva Malaquias
Química, Regional Jataí, Universidade Federal de Goiás*

Zebrafish: uma ferramenta para o desenvolvimento de novos materiais

*Profa. Dra. Mônica Rodrigues Ferreira Machado
Instituto Especial de Biociências, Universidade Federal de Goiás*

Legislação, ética e atribuições dos profissionais da química

*Perito Criminal Luciano Figueiredo de Souza
Presidente do Conselho de Química 12 Região*

Minicursos

Construção e otimização estrutural para estudos de ancoragem molecular: Uma abordagem de baixo custo

*Prof. Dr. Nailton Monteiro do Nascimento Júnior
Instituto de Química da Universidade Estadual Paulista "Júlio de Mesquita Filho" (UNESP - Araraquara)*

Materiais Fotoativos Usando Argila como Suporte

*Profa. Dra. Josy Antevéli Osajima Furtini
Engenharia de Materiais da Universidade Federal do Piauí*

A contextualização do conteúdo em química na aprendizagem dos discentes em uma turma de EJA.....	1
A educação inclusiva e o ensino de ciência: uma breve revisão.....	2
A utilização de aplicativos de leitura como facilitador do processo avaliativo em ciências: a escolha do ideal.....	3
Abordagem CTSA no ensino de ciência e química: uma breve revisão.....	4
Análise da composição química da resina da <i>Croton urucurana</i> (sangra d'água).....	5
Análise da composição química da resina da <i>Mangifera indica</i> L. (mangueira).....	6
Análise espectroscópica de meteoros sobre o Brasil.....	7
Aplicação dos solventes eutéticos naturais profundos (NADEs) na extração de compostos bioativos da espécie <i>Anacardium humile</i>	8
Atividade prática para o ensino de estequiometria.....	9
Avaliação da atividade antibacteriana do óleo essencial da Candeia.....	10
Avaliação da morfologia e expressão gênica em teste de toxicidade aguda de <i>Danio rerio</i> (<i>Teleostei, cyprinidae</i>) sob efeito do defensivo agrícola endossulfan.....	11
Avaliação da toxicidade de atrazina quantificada pela metodologia QueCheRs em urina de gestantes sobre zebrafish.....	12
Avaliação do FPS e antioxidante do óleo essencial e extrato aquoso das folhas e caule da mastruz.....	13
Avaliação do potencial anti-helmíntico do extrato de <i>Anacardium humile</i>	14
Cálculo dos desvios químicos do caulerpenynol NRM 13C usando funcionalismos híbridos.....	15
Comparativo entre funcionais híbridos utilizados na determinação da estrutura da molécula de diversifolina.....	16
Comparativo entre os funcionais híbridos da molécula equinopina.....	17
Composição de metais lixiviados em argila branca de uso cosmético utilizando as técnicas de ICP-MS e ICP-OES.....	18
Contextualizando a problemática da doença de alzheimer e o potencial da modelagem molecular como ferramenta para novos avanços.....	19
Determinação de bisfenol A (BPA) em água: uma investigação na cidade de Jataí-Goiás.....	20
Determinação estrutural do antiviral Efavirenz por cálculos teóricos de RMN de ¹³ C.....	21
Determinação estrutural do Oseltamivir por cálculos do deslocamento químico de ¹³ C RMN.....	22
Educação ambiental escolar e os plásticos como tema gerador.....	23

Efeito antimicrobiano de emulsões de óleo essencial de canela (<i>Cinnamomum verum</i>) na germinação de sementes de Baru (<i>Dipteryx alata</i>).....	24
Efeito da concentração de TiO ₂ suportado em laponita RD na degradação do corante azul de metileno.....	25
Efeito do tipo de aglutinante em eletrodo de pasta de carbono.....	26
Estequiometria.....	27
Estudo da influência das diferentes condições experimentais no preparo de mantas eletrofiadas de PNVC.....	28
Estudo da modificação de argilas orgânicas com óxidos para adsorção de compostos orgânicos.....	29
Estudo do efeito de nanopartícula de sílica (SiO ₂) modificadas com domperidona em embriões de zebrafish (<i>Danio rerio</i>).....	30
Estudo do óleo essencial das folhas, cascas e raízes de mama-cadela (<i>Brosimum gaudichaudii</i> Trécul - Moraceae).....	31
Estudo do potencial catalítico de nanoplates de CeO ₂	32
Estudo eletroquímico de eletrodos de pasta de carbono modificados com nanopartículas de ouro funcionalizadas para a detecção de hantavírus.....	33
Estudo preliminar: levantamento dos princípios ativos dos pesticidas mais utilizados no município de Jataí-GO.....	34
Estudo voltamétrico da eletrodeposição de bismuto em pasta de carbono.....	35
Formação continuada de professores para educação inclusiva: os desafios e compromissos docentes.....	36
Influência da fase móvel na seletividade e simetria dos picos de 3,4-MDA e 3,4-MDMA por RP-UHPLC/DAD.....	37
Influência da variação da temperatura na adsorção em argilas do sudoeste goiano.....	38
Instrução pelos colegas no ensino de química.....	39
Investigação sobre o conteúdo inicial de química orgânica montagem de um polarímetro com material de baixo custo.....	40
Montagem de um polarímetro com material de baixo custo.....	41
Obtenção e caracterização de bixina a partir de extrato de Urucum (<i>Bixa orellana</i> L.).....	42
Os principais problemas em físico-química.....	43
Possibilidades de estudo para o ensino da química do elemento Flúor.....	44
Potencial antioxidante da espécie <i>Caryocar brasiliense</i>	45
Potencial antioxidante do extrato hidroalcolico de folhas (frescas e em cápsulas) e raiz da <i>Moringa oleifera</i>	46
Preparo de blendas de poliestireno/poli(3-metilfenol) dopados com grafeno para aplicações na engenharia tecidual.....	47

Preparo de hidrogéis nanocompósitos de poli(2 -hidróxietil metacrilato) com nanocelulose e bixina para serem utilizados como biomateriais.....	48
Síntese de complexos de curcumina com zinco e manganês.....	49
Síntese e caracterização de fotocatalisadores de TiO ₂ suportado em argila para fotodegradação do corante azul de metileno.....	50
Síntese e caracterização de polianilina em meio de nanopartículas	51
Síntese e caracterização do poli(9,9-dihexilfluoreno-co-tiofeno)	52
Uma proposta para o ensino de química em uma perspectiva em ciências, tecnologia, sociedade e ambiente tendo como tema gerador uma usina de produção de etanol.....	53
Uso da espectrometria de massas para estudo do efeito dirigente do substituinte na nitração do tolueno, uma proposta de roteiro experimental para ensino superior.....	54
Uso do SPME/GC-MS para a caracterização dos voláteis florais de Gabiroba (<i>Campomanesia pubescens</i>)	55
Utilização de TICs como uma ferramenta de ensino e aprendizagem do conteúdo de geometria molecular.....	56

Parecer e revisão por pares

Os resumos que integram esta compilação foram submetidos à avaliação da comissão científica e recomendados para publicação.

A CONTEXTUALIZAÇÃO DO CONTEÚDO EM QUÍMICA NA APRENDIZAGEM DOS DISCENTES EM UMA TURMA DE EJA

Alessandra Ferreira Paiva Gonçalves (IC)^{1*}; Eveline Borges Vilela Ribeiro (PQ)¹

*alessandrapaivah@hotmail.com

¹Universidade Federal de Jataí, UAE de Ciências Exatas/Química

Busca-se por meio dessa pesquisa, problematizar a importância da contextualização à medida que compreendemos que a prática docente traz consigo a necessidade de discussão. Se por um lado a prática repetitiva, automática e descompromissada pode levar alienação ou mesmo a naturalização de determinados discursos, o despertar do senso crítico, tanto de professores como alunos, pode libertar. Sendo assim, pensar sobre didática, a atuação dos professores, a realidade do público discente, bem como a relação escola/comunidade escolar traz consigo a necessidade de refletir sobre o papel social da escola e a gama de possibilidades que podem ser implementadas para trazer mudanças sobre a realidade a qual a escola está inserida. Pensando a responsabilidade da escola além do cognitivo, mas também social e político, contribuindo para que os alunos relacionem os conteúdos educativos com os seus saberes e vivências, facilitando a interligação entre a teoria e a prática, e permitindo que os alunos confirmem sentido e utilidade ao que aprendem. Para isso o projeto procura destacar as possíveis limitações encontradas na aplicabilidade da contextualização nos conteúdos de Química para alunos do ensino de EJA. Sob investigação em didática das ciências mostra que os estudantes desenvolvem melhor a sua compreensão conceptual e aprendem mais sobre a natureza da ciência quando participam em investigações científicas, com tal que haja suficientes oportunidades e apoio para reflexão. Estudos indicam que, além de serem mecânicas e repetitivas, as situações de aprendizagem escolar, geralmente, não estão centradas na construção de significados e na elaboração de estratégias próprias para a resolução de problemas, mas em atividades que envolvem memorização. Para Brousseau, contextualizar significa apresentar o conteúdo ao aluno por meio de uma situação problemática, compatível com uma situação real que possua elementos que deem significado ao conteúdo a ser ensinado. Acrescenta ainda que, o contexto deve estar associado a uma situação que dê sentido aos conhecimentos a serem estudados, que oriente a aprendizagem.

Palavras-Chaves: Contextualização; Ensino; Vivência; Saberes; Prática.

Categoria: Trabalho de Prática como Componente Curricular.

A EDUCAÇÃO INCLUSIVA E O ENSINO DE CIÊNCIA: UMA BREVE REVISÃO

Leonardo Almeida Silva (PCC I)¹; Gildiberto Mendonça de Oliveira (PQ)¹

*Leocpago57@gmail.com

¹Universidade Federal de Jataí, UAE de Ciências Exatas/Química

O objetivo deste trabalho de Prática como Componente Curricular tem sido realizar uma revisão bibliográfica sobre a educação inclusiva e o ensino de ciência. A pesquisa tem envolvido o levantamento de artigos científicos disponíveis nos sítios de busca do Google Acadêmico, utilizando-se as palavras-chaves: o que é educação inclusiva; quais os principais desafios da educação inclusiva; como tem sido aplicado no ensino de ciências e química. A educação inclusiva atualmente tem tido grande ênfase diante de um processo amplo de participação de toda a comunidade escolar. As diferenças exigem práticas docentes mediante adversidades a serem rompidas perante o cotidiano de cada aluno. Mesmo com as dificuldades encontradas frente às práticas docentes, a educação inclusiva visa desenvolver a valorização da diversidade, compreender a necessidade do aluno em sala de aula, assim possibilitando o educador a facilitar o aprendizado do educando. Educando todos os alunos juntos, as pessoas com deficiência têm oportunidade de se preparar para a vida em comunidade, os professores melhoram as suas habilidades profissionais e a sociedade toma a decisão consciente de funcionar de acordo com o valor social da igualdade para todas as pessoas, com os consequentes resultados de melhoria da paz social. Para conseguir realizar o ensino inclusivo, os professores em geral e especializados, bem como os recursos, devem aliar-se em um esforço unido e consciente. As dificuldades para a educação inclusiva são encontradas no ambiente escolar, pois as escolas acabam por espelhar uma sociedade cheia de barreiras de preconceitos e que dificultam fazer adaptações necessárias, inclusive nas condições de estruturas físicas das instituições. A falta de formação de professores com especialidade em educação inclusiva também tem sido um fator que dificulta o aprendizado e adaptação das crianças com necessidades especiais. Há autores que colocam que indicam três elementos fundantes na educação inclusiva, sendo eles: o aluno, o professor e o conhecimento; para o professor deve haver qualificação profissional de maneira que ele saiba distinguir todas as diferentes formas de aprender que os alunos apresentam em uma mesma sala de aula. E, sob essa perspectiva de, não deve existir uma "educação inclusiva", pois não existem excluídos na escola, mas, sim, pessoas com diferentes necessidades de aprendizagem, e é para essas diferenças que o professor deve estar preparado. Postula-se uma necessidade de reestruturação do sistema educacional, ou seja, uma mudança estrutural no ensino regular, cujo objetivo é fazer com que a escola se torne inclusiva, um espaço democrático e competente para trabalhar com todos os educandos, sem distinção de raça, classe, gênero ou características pessoais, baseando-se no princípio de que a diversidade deve não só ser aceita como desejada.

Palavras-Chaves: Educação inclusiva; Ensino em Ciências.

Categoria: Trabalho de Prática como Componente Curricular.

A UTILIZAÇÃO DE APLICATIVOS DE LEITURA COMO FACILITADOR DO PROCESSO AVALIATIVO EM CIÊNCIAS: A ESCOLHA DO IDEAL

Carine Olivia Bertuol (IC)^{1*}; Fernanda C. Silva (PG)¹; Eveline Borges Vilela Ribeiro (PQ)²

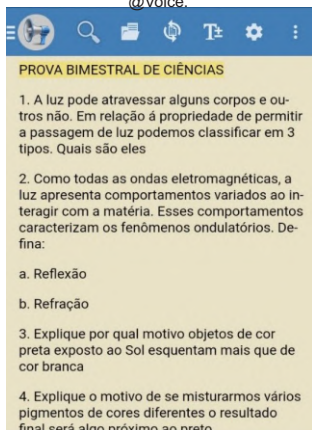
*carine.oliviabertuol@gmail.com

¹Universidade Federal de Jataí, UAE de Ciências Exatas/Química

²Universidade Federal de Jataí, Programa de Pós-Graduação em Química

A cada dia, a tecnologia de informação e comunicação (TIC) se torna mais presente no cotidiano escolar e vem se tornando uma importante ferramenta no processo de ensino e aprendizagem. Além de auxiliar no processo pedagógico, as TICs também podem ser utilizadas como instrumento de auxílio para o processo de ensino aprendizagem das pessoas com transtorno ou deficiência. Tendo em vista que a dislexia é um transtorno específico de aprendizagem, onde a principal dificuldade está relacionada à leitura, escrita e interpretação de textos. O objetivo da pesquisa foi a escolha de um aplicativo (App) de leitura para auxiliar nas avaliações de ciências para os alunos com dislexia. Para a escolha da melhor ferramenta a ser utilizada na pesquisa, buscamos, por aplicativos e softwares, disponíveis para downloads, de forma gratuita, que pudessem ser utilizados como ferramenta pedagógica, na perspectiva inclusiva. O pré-requisito utilizado para a escolha do aplicativo foi ter a opção de transformar arquivos de diferentes formato como Docx, PDF, Html, entre outros. Entre os aplicativos encontrados, se destacou os seguintes: ProDeaf, aplicativo de traduz a fala em português para a língua de sinais libras, outro também foi Que-Fala! aplicativo destinado a facilitar a comunicação de pessoas com deficiências que afetam a fala.

Figura 1: Avaliação inserida no aplicativo @Voice.



O que melhor se enquadrou foi o @Voice Aloud Reader, que possui fácil acesso na internet, e o usuário poderá instalar o app em seu celular, que está disponível, de forma gratuita. Então é só baixar os arquivos de texto no celular e abri-lo diretamente no @Voice Aloud Reader que lê em voz alta os textos exibidos em apps Android, por exemplo páginas web, notícias, emails longos e sms. Ainda no App tem opções de ajustar o tempo de leitura, uma leitura mais rápida, ou mais lenta, assim deixando a critério do utilizador. Dessa forma esse será o app utilizado em sala de aula como leitor de avaliações para estudantes. A avaliação da utilização é objeto de estudo superior.

Palavras-Chaves: Aplicativo; Ensino-Aprendizagem; Dislexia.

Agradecimentos: Universidade Federal de Goiás- Regional.

Categoria: Trabalho de Pesquisa.

ABORDAGEM CTSA NO ENSINO DE CIÊNCIA E QUÍMICA: UMA BREVE REVISÃO

Karla Karita Lourenço da Silva (PCC I)¹; Gildiberto Mendonça de Oliveira (PQ)¹

*kalourencosilva@gmail.com

¹Universidade Federal de Jataí, UAE de Ciências Exatas/Química

O objetivo deste trabalho foi realizar uma revisão bibliográfica sobre o uso da abordagem Ciência, Tecnologia, Sociedade e Ambiente (CTSA) no ensino de ciência e em química. A pesquisa envolveu um levantamento de artigos científicos disponíveis nos sítios de busca do Google Acadêmico e no Periódicos Capes. As palavras-chaves utilizadas foram: Abordagem CTSA; O que é a abordagem CTS e CTSA? Abordagem CTS química; Ensino de química CTS. A abordagem CTS ou CTSA tem como objetivo promover a educação científica e tecnológica dos cidadãos, buscando uma situação problema para que possa ser estudada e solucionada, ou seja, fazendo uma ligação entre o conhecimento científico aprendido em sala com o cotidiano dos alunos. A abordagem CTSA visa uma ampliação do olhar sobre o papel da ciência e da tecnologia na sociedade, além de discutir em sala de aula questões econômicas, políticas, sociais, culturais, éticas e ambientais. Em uma abordagem CTS aplicada ao Ensino de Química, espera-se que não enfatize apenas fórmulas e conceitos levando os alunos a um processo de aprendizagem mecânico, e sim a formação de um ser questionador, crítico perante o desenvolvimento mundial, é preciso superar o enfoque apenas ausência de contextualização, buscando atrair o interesse dos alunos através de: palestras com especialistas, debates e experimentos em laboratório. As áreas mais abordadas na temática CTSA são: saúde; alimentação e agricultura; recursos energéticos; terra, água e recursos minerais; indústria e tecnologia; ambiente; transferência de informação e tecnologia; ética e responsabilidade social. Os pontos positivos dessa abordagem no ensino de química estão no despertar do interesse do aluno nas questões científico-tecnológicas relacionando-as com o cotidiano, favorecendo a compreensão da natureza da ciência e do trabalho dos cientistas na construção de um cidadão pensante. Alguns dos obstáculos à implementação dessa orientação nas escolas são: formação, concepções, crenças e atitudes dos professores; sequência rígida dos programas escolares e os recursos didáticos. A abordagem CTS ou CTSA não visa simplificar currículos ou reduzindo conteúdos, mas sim dar um novo significado, de maneira que facilite a compreensão de conteúdos através da associação com o cotidiano.

Palavras-Chaves: CTSA; Ensino de Ciência; Ensino de Química.

Categoria: Trabalho de Prática como Componente Curricular.

ANÁLISE DA COMPOSIÇÃO QUÍMICA DA RESINA DA *Croton urucurana* (SANGRA D'ÁGUA)

Ailton Carlos Cunha do Nascimento (IC)^{1*}; Ricardo Alexandre Figueiredo de Matos (PQ)¹

***ailton.c.nascimento@outlook.com**

¹Universidade Federal de Jataí, UAE de Ciências Exatas/Química

Croton urucurana, ou Sangra D'água, é uma árvore de porte pequeno abundante no Brasil. Sua resina possui propriedades anti-infecciosas e de cicatrização, além da árvore possuir propriedades antibactericidas, antivirais e antioxidantes. O Trabalho visa a caracterização química da resina bruta, extraída do caule, sua purificação e isolamento de constituintes químicos, para serem analisados quanto as suas propriedades e atividades biológicas. Tal caracterização, em uma primeira etapa, foi realizada com base no trabalho de Radi e Hernandez-Terrones¹. Do extrato bruto foram identificadas as presenças de alcalóides, saponinas e taninos condensados. No atual momento o projeto encontra-se na etapa de purificação e separação de frações para uma análise de composição química mais apurada.

Palavras-Chaves: Sangra D'água; Atividade biológica; Resina.

Agradecimentos: à UFJ.

Categoria: Trabalho de Pesquisa.

ANÁLISE DA COMPOSIÇÃO QUÍMICA DA RESINA DA *Mangifera indica* L. (MANGUEIRA)

Marília Lamparelli (IC)1*; Ricardo Alexandre Figueiredo de Matos (PQ)1

*mahhlamparelli@gmail.com

1Universidade Federal de Jataí, UAE de Ciências Exatas/Química

A mangueira (*Mangifera indica* L.) é uma árvore frutífera da família Anacardiaceae, nativa do sul e do sudeste asiático e introduzida com sucesso no Brasil. Há muitos estudos envolvendo a composição química da resina da mangueira bem como aplicações no tratamento antibacteriano, resfriados e tosse, diarreia e anti-reumatismo. Este trabalho visa a extração, isolamento e caracterização química dos constituintes da resina bruta extraída do caule e do fruto da *Mangifera indica* L., analisando também suas propriedades e atividades biológicas. A caracterização inicial foi realizada com base no trabalho de Radi e Hernandez-Terrones. Do extrato bruto foram identificadas as presenças de taninos condensados e triterpenos. No atual momento o projeto encontra-se na etapa de purificação e separação de frações para uma análise de composição química mais apurada.

Palavras-Chaves: Mangueira; Atividade Biológica; Resina.

Agradecimentos: à UFJ.

Categoria: Trabalho de Pesquisa.

ANÁLISE ESPECTROSCÓPICA DE METEOROS SOBRE O BRASIL

Fabiana Maria Ribeiro (IC)^{1*}; Phablo S. Araújo (IC) 2; Maurício M.J.A. Bolzan (PQ)²

*ribeirom.f@outlook.com

¹Universidade Federal de Jataí, UAE de Ciências Exatas/Química

²Universidade Federal de Jataí, UAE de Ciências Exatas/Física - Laboratório de Astronomia e Física Espacial de Jataí (LAFEJ)

A análise espectral de meteoros, embora seja uma área explorada há um tempo considerável, possui potencial na compreensão dos questionamentos acerca da composição dos meteoroides que atravessam a atmosfera terrestre e a origem do sistema solar, ou seja, a partir de suas constituições pode-se fornecer evidências acerca de suas proveniências. Os espectros analisados neste trabalho são de meteoros que atravessaram a atmosfera terrestre na área do cerrado goiano. Estes foram registrados por câmeras instaladas no Laboratório de Física Espacial de Jataí da Universidade Federal de Jataí, de forma a ser possível capturar a decomposição da luz e as linhas de emissão dos elementos que constituem os meteoroides. A luz emitida por essas espécies ionizadas foi capturada por instrumentos ópticos de alta eficiência como redes de difração que atuaram como seletores de comprimentos de onda. Os espectros obtidos utilizando-se o Software Rspec apresentam a intensidade relativa em u.a. (unidades arbitrárias) em função dos comprimentos de onda em Å (angstroms). A análise forneceu os picos em diversos momentos durante a queima devido a reentrada do meteoro de forma que, sabendo a temperatura desta queima pode-se obter diferentes concentrações das espécies em função da temperatura. No entanto, a temperatura exata não é conhecida e, por isso realizou-se a análise utilizando-se o tempo entre cada frame para avaliar a porcentagem relativa de cada elemento e estes foram obtidos através de tratamentos das imagens de captura. Portanto, através de alguns espectros registrados foi possível determinar as linhas de emissão, que são características da ionização de elementos comuns neste tipo de fenômeno, tais como Ferro, Sódio e Magnésio e suas abundâncias relativas. Em um espectro específico verificou-se a presença de vestígios de água fornecidos pelos picos H₂ e O, referentes à molécula, com valores aproximados de 6,96% e 6,43% respectivamente. Também foram registrados a presença de Ferro e Sódio com porcentagem relativas de 15,76% e 4,67%, respectivamente. Nota-se que esses dados fornecem a abundância relativa dos elementos em um frame de maior intensidade e o restante dos picos observados, são ditos como interferentes advindos do processo de difração da luz. Os resultados obtidos relacionam-se com fatores físicos que influenciam na entrada dos meteoroides na atmosfera terrestre, como ionização atmosférica.

Palavras-Chaves: Espectroscopia; Meteoros; Composição; Porcentagem.

Agradecimentos: Agradecimentos especiais ao Carlos Augusto Di Pietro, pesquisador que auxiliou nas análises, à BRAMON e ao INPE, por fornecerem informações à cerca das capturas e ao orientador desta pesquisa Maurício José Alves Bolzam à quem devo os créditos pelo incansável trabalho de estímulo.

Categoria: Trabalho de Pesquisa.

APLICAÇÃO DOS SOLVENTES EUTÉTICOS NATURAIS PROFUNDOS (NADES) NA EXTRAÇÃO DE COMPOSTOS BIOATIVOS DA ESPÉCIE *Anacardium Humile*

Hellen Bertoletti Barbieri (IC)^{1*}; Rafael Severino da Silva (IC)¹; Karla S. Malaquias (PQ)¹;
Claudinei Alves da Silva (PQ)²; Liliane Nebo (PQ)²

*hellen.hbb@gmail.com

¹Universidade Federal de Jataí, UAE de Ciências Exatas/Química

²Universidade Federal de Jataí, Programa de Pós-Graduação em Química

Introdução: Desde os primórdios da humanidade, as plantas são utilizadas como fonte de alimentos, medicamentos, vestuário e fibras. A *Anacardium humile*, popularmente chamada de cajuzinho-do-cerrado, é amplamente utilizada na medicina popular para o tratamento de diarreia e como expectorante. Além disso, essa espécie apresenta atividade antifúngica, anti-rotavírus, antiinflamatória e hipoglicemiante. O desenvolvimento de solventes verdes de baixa toxicidade e custo tem se tornado uma questão de grande importância ao se avaliar os efeitos tóxicos, a volatilidade e a contribuição na poluição ambiental gerada pelo uso de solventes orgânicos convencionais. Portanto, os chamados solventes naturais eutéticos profundos (ou, em inglês, natural deep eutectic solvents – NADES) surgem como um novo tipo de solvente verde e sustentável, devido a sua baixa toxicidade e a sua capacidade de dissolver compostos apolares e polares. Um NADES é constituído por um doador de ligação de hidrogênio (HBD) e por um aceptor de ligação de hidrogênio (HBA). **Objetivo:** Este trabalho teve como objetivo a preparação de diversos NADES para a realização da extração de compostos fenólicos da espécie *A. humile*. **Metodologia:** Foram selecionados sete reagentes para a preparação dos NADES e foram avaliadas 12 combinações com diferentes proporções molares entre os reagentes. Os NADESs foram preparados através da mistura de dois componentes, um HBD e um HBA, e levados para o aquecimento no aparelho de ultrassom por aproximadamente 20 minutos, a 60°C. Para a extração, utilizou-se 200 mg de material vegetal triturado, 3,2 mL do NADES selecionado e 800 µL de água destilada. O material foi colocado em tubos Falcon e levado ao Vortex por 1 min, em seguida foi levado ao ultrassom por 90 minutos, a 40°C. Em seguida, os tubos foram centrifugados por 40 minutos, a 6000 rpm. Para comparação, foi realizado a extração utilizando 100% e 80% etanol. **Resultados e discussão:** Das 14 combinações realizadas, apenas em 3 combinações foram obtidos líquidos transparentes, sendo elas: etilenoglicol/cloreto de colina 3:1, ácido cítrico/cloreto de colina 1:1 e glicerina/cloreto de colina 1:1. A extração de compostos das folhas de *A. humile* teve um rendimento de aproximadamente 2 mL, com uma concentração de 50 mg de material vegetal seco/mL. Para realizar a análise da eficiência dos NADESs como solvente extrativo, realizou-se a quantificação de fenóis totais e notou-se, conforme encontrado na literatura, que os extratos obtidos via NADES como solvente extrativo apresentaram maior quantidade de fenóis totais em sua composição, principalmente em relação ao extrato obtido com 100% etanol. **Conclusão:** Com os dados obtidos através deste estudo, notou-se que a utilização do NADES como solventes extrativos, como visto na literatura, apresentam alta capacidade na extração de compostos fenólicos de plantas.

Palavras-Chaves: Produtos Naturais; NADES; *Anacardium humile*; Compostos fenólicos.

Agradecimentos: Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico – CNPq.

Categoria: Trabalho de Pesquisa.

ATIVIDADE PRÁTICA PARA O ENSINO DE ESTEQUIOMETRIA

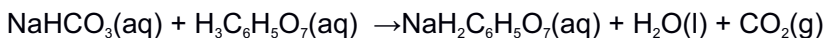
Marya Hedwardda Maia Martins (IC)^{1*}; Hélen Cristine de Rezende (PQ)²

*maryahedwarddamaiamartins@gmail.com

¹Universidade Federal de Jataí, UAE de Ciências Exatas/Química

²Universidade Federal de Jataí, Programa de Pós-Graduação em Química

A estequiometria é um assunto que entre os alunos de ensino médio gera bastante dúvida e dificuldade em sua assimilação, isso pode estar relacionado aos diversos conceitos que são utilizados no desenvolvimento desse tópico, como conceito de mol, relação estequiométrica, balanceamento de equação química, dentre outros, além disso normalmente não são apresentados exemplos com o cotidiano do aluno para que o mesmo possa relacionar com o tema estudado e nem tampouco são utilizadas aulas práticas para abordagem do tema. Diante dessa problematização, o presente trabalho propõe a aplicação de uma atividade prática, para que o aluno possa a partir dos resultados obtidos ser apresentado ao conceito de estequiometria, entendendo sua importância e aplicabilidade no cotidiano. Para o procedimento experimental, vão ser necessários materiais de fácil acesso e presentes no cotidiano dos alunos, como frascos com abertura estreita, balões de borracha, água e comprimidos efervescente. Os comprimidos efervescentes contém normalmente bicarbonato de sódio e algum ácido sólido, como ácido cítrico, quando colocado em contato com a água ocorre uma reação química, formando um sal e liberando gás carbônico, como apresentado pela equação química abaixo.



O gás carbônico liberado vai aumentar a pressão interna e inflar o balão, o experimento pode ser conduzido com diferentes massas do comprimido efervescente para que ocorra diferença no volume produzido de CO_2 , dessa forma os alunos serão instigados a realizarem análise crítica sobre a variação de volume ocorrida na reação. Espera-se que com a utilização do recurso da atividade prática o aluno consiga relacionar o conceito de estequiometria com reações presentes no seu cotidiano, rompendo com o aprendizado mecanizado em que o aluno realiza os cálculos estequiométricos com a visão somente matemática, permitindo assim que os conceitos químicos sejam compreendidos, através de um processo ativo, que leva o aluno a desenvolver o conhecimento, tendo o professor somente com um mediador e facilitador desse processo.

Palavras-Chaves: Estequiometria; Reação Química; Prática.

Agradecimentos: UFJ.

Categoria: Trabalho de Prática como Componente Curricular.

AVALIAÇÃO DA ATIVIDADE ANTIBACTERIANA DO ÓLEO ESSENCIAL DA CANDEIA

Rafaela M. Donato(IC)1*; Guilherme Sastre Souza(IC)2; Karine R. Lima Sousa(IC)1; Wéverton J. E. Freitas (IC)1; Alexandre Braoios (PQ)2; Claudinei A. Silva (PQ)3

*rafagirlx@gmail.com

1Universidade Federal de Jataí, UAE de Ciências Exatas/Química

2Universidade Federal de Jataí, UAE da Saúde/Biomedicina

3Universidade Federal de Jataí, Programa de Pós-Graduação em Química

A candeia é uma planta da família Asteraceae e pertence ao grupo ecológico das ecótonas. Está presente em grande área da América do Sul, e no Brasil, há referências da sua ocorrência nos Estados de Minas Gerais, Bahia, Espírito Santo, Rio de Janeiro, Goiás, Paraná, Rio Grande do Sul, Santa Catarina, São Paulo, e Distrito Federal. A *Eremanthus erythropappus* vem apresentando diversas atividades biológicas como: antinociceptiva, anti-inflamatória, antiulcerogênica, atividade antimicrobiana e como agentes tóxicos e inibidores da alimentação e do desenvolvimento em insetos. Estudos que se dedicam a métodos alternativos com fitoderivados que apresentam atividade biológica vem crescendo a cada ano. Neste sentido, este trabalho busca avaliar a atividade do óleo essencial da Candeia frente *Staphylococcus aureus*. A *S. aureus* é uma bactéria gram positiva, que pertence à família Microcaceae. Essa bactéria está presente em mais 15% dos seres humanos. Ela é uma das bactérias mais encontradas em hospitais e clínicas, que é por onde, a maioria das pessoas é infectada por elas. Há também a forma de contaminação por ingestão de alimentos contaminados, principalmente leite e derivados. O teste antibacteriano foi realizado na faixa de concentração de 3,9 – 500 µg/mL. A concentração de 500 µg/mL apresentou absorbância média estatisticamente diferente da absorbância do controle e do meio demonstrando ação bacteriostática sobre a cepa de *S. aureus* em concentrações mais elevadas. Os resultados indicam que óleo essencial da Candeia pode ser usado como agente bacteriano. Uma avaliação, em concentrações superiores às testada, mostraram sua ação bacteriostática e de toxicidade em culturas celulares.

Palavras chaves: Atividade Antibacteriana; *Staphylococcus aureus*; *E. erythropappus*.

Categoria: Trabalho de Pesquisa.

AVALIAÇÃO DA MORFOLOGIA E EXPRESSÃO GÊNICA EM TESTE DE TOXICIDADE AGUDA DE DANIO RERIO (*Teleostei, Cyprinidae*) SOB EFEITO DO DEFENSIVO AGRÍCOLA ENDOSSULFAN

Gabriela Godinho Mello (IC)1*; Bianca Ferreira Gonçalves(IC)1; Isaac Ferreira C. Souza(IC)2; Gabriela Alba de Oliveira(IC)3; Monica Rodrigues F. Machado(PQ)2; Fernando Gielfi(PQ)3; Fábio Morato de Oliveira(PQ)4; Liliane Nebo(PQ)1; Karla S. Malaquias (PQ)1

*gabryelagodinho@hotmail.com

1Universidade Federal de Jataí, UAE de Ciências Exatas/Química

2Universidade Federal de Jataí, UAE Ciências Biológicas/Biologia

3Universidade Federal de Jataí, UAE Ciências Agrárias/Agronomia

4Universidade Federal de Jataí, UAE da Saúde/Medicina

Introdução: O desenvolvimento das práticas agrícolas proporcionou o aumento da produção e redução da perda de produtividade, no entanto vários defensivos fitossanitários foram inseridos nesse meio visando controlar a ação de insetos e doenças que possam prejudicar as plantações. Alguns desses produtos químicos podem causar efeitos adversos em organismos vivos, como é o caso do endossulfan. Este inseticida foi banido do Brasil em 2010, contudo é adquirido de forma ilegal por alguns produtores. **Objetivos:** Avaliar a toxicidade do defensivo fitossanitário Endossulfan em embriões de zebrafish por meio da análise de alterações morfológicas e na expressão gênica. **Materiais e métodos:** As concentrações de Endossulfan testadas foram quantificadas em alfaces adquiridos em pontos de venda da cidade de Jataí-GO. A qualificação do Endossulfan foi realizada por meio da cromatografia gasosa aliada à espectrometria de massas (CG-EM). O Endossulfan foi extraído do produto comercial Thiodan CE® por meio de extração líquido-líquido quimicamente ativa. Para os ensaios de toxicidade foram usados doze embriões distribuídas em microplaca de cultura de 96 poços. Os testes com os biomarcadores foram realizados utilizando o gene β -actina como gene referência. **Resultados e discussão:** Na análise quantitativa as concentrações encontradas foram de: 0,007mg/L, 0,013mg/L e 0,018mg/L. Estas tiveram efeito de toxicidade testado em zebrafish. Ao fim das 96h, nas respectivas concentrações testadas haviam 58%, 33% e 10% dos peixes vivos. Para o controle: 67%. É possível notar que, até a concentração mais baixa testada apresentou considerável toxicidade. Outros efeitos observados foram: alteração nos batimentos cardíacos, menor % eclosão, edemas de pericárdio, edemas no saco vitelino e deformação do esqueleto. Os ensaios da expressão gênica estão em fase final de análise. **Conclusão:** o bioensaio em zebrafish indica que, ainda que as concentrações encontradas estejam abaixo da ingestão diária aceitável aceitável, o endossulfan pode causar danos no desenvolvimento embrionário, evidenciando a elevada toxicidade deste defensivo agrícola.

Palavras-Chaves: Endossulfan; Toxicidade; Danio Rerio; Expressão gênica.

Categoria: Trabalho de Pesquisa.

AVALIAÇÃO DA TOXICIDADE DE ATRAZINA QUANTIFICADA PELA METODOLOGIA QuEChERS EM URINA DE GESTANTES SOBRE ZEBRAFISH

Juliana Moraes dos Reis (PG)1*; Leandro Oka Duarte (PG)2; Mariana F. da Silva (IC)2; Alisson Benite de Freitas (PQ)4; Liliane Nebo (PQ)1; Monica Rodrigues Ferreira Machado (PQ)3; Karla da Silva Malaquias (PQ)1

*jreisr2@gmail.com

1Universidade Federal de Jataí, Programa de Pós-Graduação em Química

2Universidade Estadual de São Paulo-Ribeirão Preto/ Programa de Pós Graduação em Química

3Universidade Federal de Jataí, UAE Ciências Biológicas/Biologia

4Biomédico vinculado ao Centro Médico de Jataí-GO

O território de Jataí-GO tem uma área equivalente a 717.422,5 ha. Dessa área 238.279,52 ha são utilizados no plantio de lavouras, sendo predominante na região o plantio de soja, milho, feijão e cana-de-açúcar. A atrazina é um defensivo fitossanitário indicado para as plantações de cana e milho amplamente utilizado na cidade. Este tem classificação toxicológica III podendo intoxicar seres vivos por meio de contato com a pele, inalação, ingestão direta ou indireta. Atrazina também apresenta adsorção moderada em matéria orgânica e argila o que possibilita que seus resíduos possivelmente contaminem o solo e o sistema hídrico da região onde foi aplicado. Este herbicida pode afetar a gestação de diferentes modos, alguns deles são: no tempo de gestação, aborto espontâneo, proporção sexual e diminuição da idade gestacional. Em um estudo feito com ratos foi possível, pela absorção da atrazina via trato gastrointestinal, determinar sua concentração através da urina e excreção fecal. O objetivo do presente trabalho foi a determinação da toxicidade da atrazina residual quantificada em urina de gestantes sobre zebrafish (*Danio rerio*). Foram analisadas 53 amostras de urina de gestantes de Jataí - GO cedidas pelo laboratório do Hospital das Clínicas Dr. Serafim de Carvalho. O método QuEChERS foi utilizado no preparo das amostras onde uma alíquota de 10 mL de cada amostra de urina acrescida de 10mL de acetonitrila e 10mL de tampão acetado. O material resultante foi transferido para um tubo falcon de 50mL e agitado vigorosamente por 1min em centrífuga Nova Técnica, NT825. À esta solução foi adicionado: 10mL de Braine. O tubo falcon foi novamente agitado por 1min e levado a centrífuga com rotação de 3000rpm por 7min à 10°C. Para o clean up, foram transferidos 2mL do sobrenadante para um eppendorf e adicionado 50mmg do sorvente PSA (amina primária secundária), 50mg de C-18 e 250mg de sulfato de sódio anidro. A solução foi agitada por 1min e levada à centrífuga com rotação de 3000rpm por 3min à 10°C. As análises quali e quantitativas foram realizadas por cromatografia gasosa aliada a espectrometria de massas com aparelho Perkin Elmer® SQ8, nas seguintes condições: Tinjeção = 290°C; Tiniçial = 160°C; Tfinal = 290°C com taxa de 25°C/min, no modo SIM. Uma solução de atrazina 0,5ppm foi utilizada no ensaio com os embriões. Estes foram monitorados, em ambiente de temperatura e fotoperíodo controlados, por um período de 96 horas afim de determinar os efeitos causados na fase embrionária. Foi possível detectar a atrazina em 38 amostras, nas concentrações entre 0,01 e 0,65 ppm. Os embriões submetidos aos ensaios apresentaram edemas de pericárdio, edemas no saco vitelino e deformação do esqueleto, comprovando que a concentração de atrazina 0,5 ppm causa efeitos deletérios nos embriões. Os ensaios de avaliação das concentrações na faixa quantificada estão em fase de análise. O bioensaio em zebrafish indica que na concentração de 0.5ppm a atrazina pode causar danos no desenvolvimento embrionário, evidenciando a elevada toxicidade deste herbicida amplamente utilizado na agricultura.

Palavras-Chaves: Atrazina; Urina; *Danio rerio*; QuEChERS; CG-EM.

Categoria: Trabalho de Pesquisa de Pós-Graduação

AValiação DO FPS E ANTIOXIDANTE DO Óleo ESSENCIAL E EXTRATO AQUOSO DAS FOLHAS E CAULE DA MASTRUZ

Karine R. L. Sousa (IC)^{1*}; Roberto O. Rodrigues Júnior (IC)¹; Rafaela M. Donato (IC)¹; Wéverton J. E. Freitas (IC)¹; Claudinei A. Silva (PQ)²

*karin.elima@hotmail.com

¹Universidade Federal de Jataí, UAE de Ciências Exatas/Química

²Universidade Federal de Jataí, Programa de Pós-Graduação em Química

As plantas do gênero *Chenopodium* são amplamente usadas na medicina tradicional das Américas Central e Sul. No Brasil, a *Chenopodium ambrosioides*, popularmente conhecida como Mastruz, vem sendo usada para alívio de dor, inflamação, como cicatrizante, em contusão, fraturas, problemas respiratórios, como diurética, em processos inflamação, bronquite, tuberculose, como abortiva e em reumatismo. A identificação e informações obtidas a partir do uso de plantas medicinais podem ser úteis para orientar pesquisas, refinar e/ou aperfeiçoar seu uso popular, desenvolver preparos terapêuticos de baixo custo e isolar substâncias ativas passíveis de síntese pela indústria farmacêutica. O óleo essencial e extrato aquoso da *C. ambrosioides* foram utilizados para avaliar seu potencial biológico em função da atividade antioxidante e o fator de proteção solar (FPS). O teor médio de óleo essencial nas folhas de *C. ambrosioides*, em relação à massa seca, foi de aproximadamente 0,7%, enquanto que para o material in natura de aproximadamente 0,1%. O cromatograma do óleo essencial das folhas e espectro de massas sugerem o espatulenol e óxido de cariofileno como componentes majoritários. A avaliação, in vitro, da ação fotoprotetora apresentou os valores de FPS de 7,8 para o óleo essencial e 12 para o extrato aquoso das folhas e do caule. Em relação a atividade antioxidante, a percentagem de sequestro de radical livre (% SRL) máxima frente ao DPPH, para as concentrações em estudo (10 – 400 mg/L), variaram entre 39% para óleo essencial, 65% para o extrato aquoso das folhas, 78% para o extrato aquoso do caule, enquanto que, para o BHT e o ácido ascórbico de 87 – 91% respectivamente. *C. ambrosioides* apresentou atividade antioxidante significativa nas concentrações testadas, em comparação com as moléculas de referência, e um bom fator de proteção solar. Estes resultados fornecem informações preliminares para desenvolvimento de novas formulações para tal fim terapêutico.

Palavras chaves: Atividade antioxidante; Avaliação do FPS; *Chenopodium ambrosioides*.

Categoria: Trabalho de Pesquisa.

AValiação DO POTENCIAL ANTI-HELMÍNTICO DO EXTRATO DE *Anacardium humile*

Hevelyn Savio Ferreira (PQ)^{1*}; Rafael S. da Silva (IC)²; Karla S. Malaquias (PQ)²; Vanessa F. Carvalho (PQ)³; Rosângela M. Rodrigues (PQ)³; Liliane Nebo (PQ)²

*hevelynsf@gmail.com

¹Universidade Federal de Jataí, Programa de Pós-Graduação em Ciências Aplicadas à Saúde

²Universidade Federal de Jataí, UAE de Ciências Exatas/Química

³Universidade Federal de Jataí / Laboratório de Parasitologia

O Brasil destaca-se pela sua enorme diversidade de espécies de plantas, entretanto estudos apontam que menos de 10% da flora brasileira são avaliados cientificamente por suas propriedades farmacológicas. Neste contexto, a espécie *Anacardium humile* conhecida popularmente como cajuzinho do cerrado, uma planta típica do Centro-Oeste vem sendo muito utilizada pela população para diferentes fins terapêuticos, dentre eles: antiulcerogênico, antimicrobiano, anti-inflamatório e anti-helmíntico, dentre outros. A estrongiloidíase é uma doença parasitária sendo capaz de causar autoinfecção com aumento da proliferação e migração de larvas pelo hospedeiro, com uma estimativa de 30 a 100 milhões de pessoas infectados em mais de 70 países no mundo. Neste contexto, o presente trabalho teve por objetivo avaliar o potencial anti-helmíntico do extrato bruto das folhas da espécie *A. humile* sobre o parasita *Strongyloides venezuelensis*. A atividade anti-helmíntica do extrato das folhas de *A. humile* foi avaliada nas concentrações de 800, 600, 400, 200 e 100 µg/ml, em triplicada, e os resultados foram avaliados após 24h. A eficiência na inibição da mortalidade larval (IML) para cada concentração em relação aos controles negativos com água e PBS foi calculada pela fórmula de Schneider-Orelli. A partir dos ensaios, pode-se observar altas taxas de mortalidade larval (97 à 90%) para as concentrações de 800 e 600 µg/ml. As demais concentrações (400, 200 e 100 µg/ml) apresentaram índices de mortalidade similares, variando entre 35 a 20%. No controle positivo foi utilizado a ivermectina na concentração de 316 µg/mL, sendo esta, a dose letal para 100% das larvas. Os resultados demonstrados apontam potencial larvicida para as concentrações de 800 e 600 µg/ml, sendo estes eficientes, com taxas de mortalidade larval entre 90-97% para *S. venezuelensis*. Como perspectiva, pretende-se avaliar as frações e os compostos oriundos desta espécie, a fim de se verificar quais componentes possam estar correlacionados a atividade anti-helmíntica observada.

Palavras-Chaves: *Anacardium humile*; Atividade anti-helmíntica; Produtos Naturais.

Agradecimentos: CAPES, CNPQ, FAPEG e UFJ/UFG.

Categoria: Trabalho de aluno de pós-graduação PPGQ-UFJ.

CÁLCULO DOS DESVIOS QUÍMICOS DO CAULERPENYNOL NMR ¹³C USANDO FUNCIONALISMOS HÍBRIDOS

Tauã Emanuel Silva (IC)1*; Valdeinei Bueno Lima Filho (PG)2; Leandro Leal Rocha De Oliveira (PG)2; Thais F. Giacomello(PG)3; Fabio Luiz Paranhos Costa(PQ)2; Breno Almeida Soares(PQ)2

*tauaemanuel99@gmail.com

1Universidade Federal de Jataí, UAE de Ciências Exatas/Química

2Universidade Federal de Jataí, Programa de Pós-Graduação em Química

3Universidade Federal de Jataí, Programa de Pós-Graduação em Ciências Aplicadas à Saúde

Atualmente, existe uma grande necessidade de analisar e avaliar os compostos orgânicos na pesquisa científica para obter resultados confiáveis sobre eles. Uma técnica poderosa usada para verificar a estrutura tridimensional, organização e configuração é nuclear ressonância magnética¹⁻². A molécula de interesse nesta pesquisa é Caulerpenynol. Este molécula é um terpeno na classe dos sesquiterpenos, que são compostos orgânicos encontrados em plantas como metabólitos secundários que funcionam como moléculas de adaptação de uma determinada planta. Estes compostos têm grande valor científico para a obtenção de novos fármacos que podem atuar contra doenças infecciosas³. O objetivo deste estudo é fazer um análise realizada no GIAO-HDFT (B3PW91, X3LYP e BhandHLYP) com 6-31G (d) conjunto de bases para determinar os desvios químicos de Caulerpenynol NMR¹³C. Para avaliar qual tem o resultado mais próximo aos dados experimentais e, em seguida, analisar quais técnica é mais confiável usando métodos estatísticos como MAD e RMSD. O BhandHLYP funcional foi posicionada como o melhor resultado ao comparar os valores de MAD e RMSD em relação aos demais funcionais híbridos utilizados no presente trabalho. Seus resultados dos parâmetros estatísticos foram MAD: 3,97 ppm e RMSD: 5,3 ppm. Este demonstra que o nível da teoria BhandHLYP / 6-31G (d) teve o melhor desempenho. Portanto, este nível de teoria poderia ser uma ferramenta eficaz e de baixo custo para a determinação de alterações químicas de NMR ¹³C de sesquiterpenos não aromáticos.

Palavras-Chaves: Computacional; Funcionais híbridos; Diversifolina.

Categoria: Trabalho de Pesquisa.

COMPARATIVO ENTRE FUNCIONAIS HÍBRIDOS UTILIZADOS NA DETERMINAÇÃO DA ESTRUTURA DA MOLÉCULA DE DIVERSIFOLINA

Valdinei Bueno Lima Filho (PG)1*; Tauã Emanuel Silva (IC)2; Leandro Leal Rocha De Oliveira (PG)1; Thais Forest Giacomello (PG)3; Fabio Luiz Paranhos Costa(PQ)1; Breno A. Soares(PQ)1

*valdineibf@hotmail.com

1Universidade Federal de Jataí, Programa de Pós-Graduação em Química

2Universidade Federal de Jataí, UAE de Ciências Exatas/Química

3Universidade Federal de Jataí, Programa de Pós-Graduação em Ciências Aplicadas à Saúde

O composto diversifolina vem de ervas da região do México e da América Central. Este composto é utilizado para tratamentos como diabetes, antimaláricos e antibióticos informalmente pela população, por isso sua pesquisa é necessária para elucidar a real função deste composto. Atualmente, o uso de química computacional para obtenção de estruturas orgânicas comparativas com seus respectivos cálculos experimentais é utilizado para agilizar o estudo envolvendo várias moléculas. O objetivo deste estudo é fazer uma análise computacional utilizando o nível de teoria GIAO-HDFT com o conjunto de funções de base 6-31G (d) e 3 funcionais híbridos: CAMB3LYP, X3LYP e BHandHLYP. Para que a análise seja melhor interpretada, utilizaremos os parâmetros estatísticos MAD e RMSD, que devem ter um número baixo para aproximar o valor calculado com os experimentais. Os conjuntos de bases CAMB3LYP, obteve um MAD de 2,7 ppm e RMSD de 3,16 ppm. O X3LYP obteve um MAD de 6,1 ppm e um RMSD de 6,8 pp, m. BHandHLYP obteve um resultado de MAD 3,0 ppm e RMSD de 3,72 ppm. Portanto, o CAMB3LYP obteve o resultado mais satisfatório. Em estudos posteriores outros triterpenos serão utilizados de modo a ampliar a comparação entre estes 3 funcionais híbridos.

Palavras-Chaves: Computacional; Funcionais híbridos; Diversifolina.

Categoria: Trabalho de aluno de pós-graduação PPGQ-UFJ.

COMPARATIVO ENTRE OS FUNCIONAIS HÍBRIDOS DA MOLÉCULA EQUINOPINA

Tauã Emanuel Silva (IC)^{1*}; Valdinei Bueno Lima Filho (PQ)²; Leandro Leal Rocha De Oliveira (PG)²; Thais F. Giacomello (PG)³; Fabio L. Paranhos Costa (PG)²; Breno Almeida Soares (PG)²
*tauaemanuel99@gmail.com

¹Universidade Federal de Jataí, UAE de Ciências Exatas/Química

²Universidade Federal de Jataí, Programa de Pós-Graduação em Química

³Universidade Federal de Jataí, Programa de Pós-Graduação em Ciências Aplicadas à Saúde

Não há muitos registros sobre os compostos de equinopina. Sabe-se que a equinopina é um alcaloide com similaridade à esticnina e pode se dizer que é menos tóxica, mas seu uso provoca convulsões, distúrbios e espasmos relacionados ao sistema respiratório¹. O composto vem de uma flor que produz mel a partir de suas sementes. Essa molécula é um terpeno da classe dos sesquiterpenos, que são compostos orgânicos encontrados em plantas como metabólitos secundários que são moléculas sobre a adaptação da planta ². Portanto, há uma grande precisa descobrir mais sobre esse composto. Esses compostos têm grande valor científico para a obtenção de novos fármacos que possam combater doenças infecciosas³. O objetivo deste trabalho é criar uma comparação entre 10 funcionais híbridos usando GEAO-HDFT no conjunto de bases 6 31g (base 1) para avaliar qual tem o resultado mais próximo do campo experimental e então analisar qual técnica é mais confiável usando métodos estatísticos como MAD e RMSD. De acordo com a pesquisa realizada, o BHANDLYP obteve MAD 5,8 E RMSD 7,75 mostrando os melhores resultados da análise realizada.

Palavras-Chaves: Computacional; Funcionais híbridos; Diversifolina.

Categoria: Trabalho de Pesquisa.

COMPOSIÇÃO DE METAIS LIXIVIADOS EM ARGILA BRANCA DE USO COSMÉTICO UTILIZANDO AS TÉCNICAS DE ICP-MS E ICP-OES

Nilson de Oliveira Brait Neto (IC)^{1*}; Ana Paula Zenobia(PG)² ; Mônica Ferreira Rodrigues Machado (PQ)³; Giovanni Cavichioli Petrucelli (PQ)¹

* nilsonbraitneto@gmail.com

¹Universidade Federal de Jataí, UAE de Ciências Exatas/Química

²Universidade Federal de Jataí, Programa de Pós-Graduação em Ciências Aplicadas à Saúde

³Universidade Federal de Jataí, UAE Ciências Biológicas/Biologia

As argilas possuem em sua composição metais que proporcionam algumas finalidades buscadas na estética, destacando-se na indústria cosmética. As argilas cosméticas usadas em máscaras faciais devem seguir alguns requisitos importantes como inocuidade química e microbiológica, controle granulométrico e controlado teor de metais pesados. Deve estar de acordo com Agência Nacional de Vigilância Sanitária (ANVISA) que é o órgão responsável pelo controle e fiscalização de produtos cosméticos, por isso estabelecem uma lista negativa de substâncias proibidas.¹ O objetivo do trabalho foi analisar quais elementos são liberados em uma amostra de argila branca cosmética de uso comercial adquirida a granel, caracterizada estruturalmente por difração de raio X, e avaliar sua composição química utilizando técnicas de ICP-MS e ICP-OES. Pesou-se 1,01 g de argila branca e deixou-se em 50 mL de solução de HCl 2M por três horas em agitação, centrifugou-se e separou-se o sobrenadante. Fez-se uma varredura semi quantitativa utilizando a técnica de ICP-MS, a partir dos dados obtidos observou-se a presença dos metais mais abundantes e fez-se uma curva analítica quantitativa para análise no ICP-OES. Comparou-se com valores obtidos previamente por espectroscopia de fluorescência. Encontrou-se: Al 564,3 ppm; Ba 152,8 ppm; Cu 1,98 ppm; Fe 240,92 ppm; e Pb 1,695 ppm. Destaca-se o Ba e o Pb por ser elementos com alta toxicidade. Conclui-se que é necessário um maior rigor na fiscalização destes cosméticos, alertando a população a respeito dos riscos que podem causar a saúde.

Palavras-Chaves: Análise; Metais; Argila.

Agradecimento: ao Laboratório Exata e Daniela de Assis Bócoli.

Categoria: Trabalho de Pesquisa.

CONTEXTUALIZANDO A PROBLEMÁTICA DA DOENÇA DE ALZHEIMER E O POTENCIAL DA MODELAGEM MOLECULAR COMO FERRAMENTA PARA NOVOS

Tauã Emanuel Silva (IC)^{1*}; Valdinei Bueno Lima Filho (PQ)²; Fabio Luiz Paranhos Costa(IC)²; Breno Almeida Soares(IC)²

*tauaemanuel99@gmail.com

¹Universidade Federal de Jataí, UAE de Ciências Exatas/Química

²Universidade Federal de Jataí, Programa de Pós-Graduação em Química

A Doença de Alzheimer (DA) é uma doença neurodegenerativa, que se caracteriza sintomaticamente pela diminuição progressiva da memória e déficit cognitivo, estando associada à degradação de neurônios colinérgicos no sistema nervoso central (SNC). Os sintomas da doença podem evoluir e levar a morte. Dados recentes da Organização Mundial da Saúde (OMS) apontam que há 47 milhões de pessoas com demência no mundo, sendo 70% dos casos associados a DA. No Brasil são mais de 1,2 milhões de pessoas acometidas. Histopatologicamente, a DA se caracteriza pelo depósito de placas senis (fragmentos insolúveis de peptídeos β -amilóide) no exterior das células nervosas e de emaranhados neurofibrilares intracelulares, causados pela hiperfosforilação da proteína TAU, acompanhadas pela perda massiva de neurônios. A maioria dos fármacos disponíveis atualmente no mercado para o tratamento da DA visam retardar ou amenizar o déficit colinérgico pela inibição parcial da atividade da acetilcolinesterase (AChE). Contudo, na última década, diversos estudos vêm evidenciando a DA como uma doença multifatorial, uma vez que suas causas histopatológicas trazem diversas consequências nocivas para as células nervosas como, por exemplo, inibição da atividade mitocondrial, formação de espécies reativas de oxigênio (EROs), alteração dos níveis de Ca^{+2} , estimulando dessa forma processos inflamatórios nos neurônios. Esse cenário alavancou a busca por fármacos que possam exibir uma ação multialvo. Nesse contexto, moléculas dímeras e híbridas contendo subunidades estruturais com histórico de atividades anticolinesterásica, neuroprotetora, antioxidante ou reguladora de íons Ca^{+2} vem sendo citadas como potenciais agentes anti-Alzheimer. Os agentes multifuncionais são capazes de agir em múltiplos alvos biológicos e exibem simultaneamente maior eficácia, melhor segurança e administração mais simples, pavimentando dessa forma uma próxima geração de agentes terapêuticos mais eficazes e menos tóxicos. A etapa preliminar no planejamento racional de um fármaco com ação multialvo consiste na utilização da ancoragem molecular ou docking molecular como ferramenta para auxiliar na compreensão das interações moleculares entre um determinado ligante (candidato a fármaco) e um alvo (receptor biológico). Simulações de docking são capazes de prever a afinidade e a natureza dessas interações bem como a energia livre mínima do complexo ligante-receptor formado. As análises de docking molecular são baseadas em softwares que permitem visualizar as interações, a afinidade e a atividade de ligação entre fragmentos moleculares de pequenas moléculas (ligantes) aos seus alvos (receptores biológicos), utilizando funções de pontuação. Dessa forma, esse trabalho tem como objetivo principal contextualizar a problemática da DA e evidenciar o potencial da modelagem molecular, em especial a metodologia de docking como uma ferramenta indispensável para novos avanços no desenvolvimento de agentes anti-Alzheimer com ação multialvo que possam alcançar uma eficácia terapêutica ainda não alcançada pelos fármacos disponíveis no mercado.

Palavras-Chaves: Doença de Alzheimer; Modelagem molecular; Estudos de *Docking*.

Categoria: Trabalho de Pesquisa.

DETERMINAÇÃO DE BISFENOL A (BPA) EM ÁGUA: UMA INVESTIGAÇÃO NA CIDADE DE JATAÍ-GOÍÁS

Jéssica Silva de Moraes (PG)1*; Karla da Silva Malaquias (PQ)1; Liliane Nebo (PQ)2

*jessica_morais@discente.ufg.br

1Universidade Federal de Jataí, UAE de Ciências Exatas/Química

2Universidade Federal de Jataí, Programa de Pós-Graduação em Química

Com a modernidade, o uso de materiais plásticos e produtos industrializados vêm sendo consumido em massa pela população mundial. O uso de plástico é notório e está presente em todos os âmbitos da vida, visto que é um material barato e acessível e que desempenha diversas funções na indústria alimentícia, dentre elas, conservar e proteger os produtos contra agentes físicos, químicos e microbiológicos. O uso exacerbado de embalagens industrializadas gera resíduos, que por sua vez, lançam no meio ambiente, compostos orgânicos. Diante disso, surgiu grande interesse em uma área do conhecimento denominada toxicologia endócrinológica. Área essa que está situada entre endocrinologia e a toxicologia, que visa o estudo de substâncias xenobióticas, como o xenoestrogênio. “Xeno” significa estranho e “estrogênio” é um hormônio feminino. O xenoestrogênio se comporta no organismo humano como um hormônio feminino “disfarçado”, burlando os receptores celulares, interferindo na bioquímica natural. Ainda em 1938, foi feita a primeira demonstração de que alguns produtos químicos poderiam ter ação estrogênica quando administrados em animais. Tais produtos são oriundos de pesticidas, plásticos, tintas, detergentes, resíduos de medicamentos e causam principalmente desequilíbrio das funções hormonais alterando características sexuais e comportamentais da espécie. Um dos compostos que têm chamado atenção especial, é o bisfenol A (BPA/BFA). Um monômero formado por dois anéis fenólicos e empregado na produção de plástico policarbonato e resinas epóxi. O sufixo 'A', no final do nome, advém da palavra 'acetona' já que, o BPS é preparado pela condensação da acetona com dois equivalentes de fenol. O bisfenol A é considerado um desregulador endócrino (DE), que é uma categoria de substâncias que interferem nas funções do sistema endócrino de animais, incluindo o ser humano. Um receptor hormonal possui elevada sensibilidade por um hormônio específico, produzido no organismo. Devido a isso, concentrações baixas de um determinado hormônio geram um grande efeito no organismo. Estes receptores hormonais também podem se ligar com outros compostos químicos. Isso explica o porquê de determinados DE presentes no organismo, mesmo em baixíssimas concentrações, serem capazes de gerar um grande efeito. Diante disso, esse projeto tem como objetivo avaliar a presença de BPA na água consumida pela população da cidade de Jataí - Goiás. Para isso, será utilizada a cromatografia líquida de alta eficiência (HPLC) e/ou cromatografia gasosa acoplada à espectrometria de massas (CG/MS), buscando validar um método de determinação de BPA em água e comparar os resultados obtidos com os limites máximos preconizados pela legislação vigente.

Palavras-Chaves: Bisfenol A ; Desregulares endócrinos; Água de abastecimento; HPLC/CG.

Agradecimentos: Coordenação de aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior (CAPES).

Categoria: Trabalho de aluno de pós-graduação PPGQ-UFJ.

DETERMINAÇÃO ESTRUTURAL DO ANTIVIRAL EFAVIRENZ POR CÁLCULOS TEÓRICOS DE RMN DE ^{13}C

Gustavo da S. do Prado (IC)^{1*}; Leandro Leal R. Oliveira (PG)²; Thais Forest Giacomello (PG)²; Gunar Vingre da Silva Mota (PG)³; Fabio Luiz Paranhos Costa (IC)¹

*gsprado98@gmail.com

¹Universidade Federal de Jataí, UAE de Ciências Exatas/Química

²Universidade Federal de Jataí, Programa de Pós-Graduação em Ciências Aplicadas à Saúde

³Universidade Federal do Pará, (UFPA) Belém, Pará, Brasil

A infecção pelo vírus da imunodeficiência humana (HIV), especialmente em países de baixa e média renda, ainda é considerada um problema de saúde pública muito importante. A diminuição na morbidade e mortalidade tem sido associada a uma combinação de antirretrovirais. Amplamente utilizado em combinação com outros anti-retrovirais para o tratamento do HIV, o efavirenz é um inibidor da transcriptase reversa não nucleosídeo. O polimorfismo, alvo de muitos estudos, amplamente observado em aplicações farmacêuticas, ocorre quando moléculas adotam um arranjo de empacotamento e ou conformação na rede cristalina. Uma das técnicas experimentais mais poderosas para obter estruturas tridimensionais de moléculas complexas é a espectroscopia de ressonância magnética nuclear (RMN). O sinergismo entre técnicas experimentais e modelos teóricos é uma ferramenta importante para a determinação estrutural. Neste trabalho, nosso objetivo é avaliar a capacidade de nosso protocolo para cálculos de mudanças químicas de RMN de ^{13}C (δ) para reproduzir os dados experimentais obtidos em RMN de estado sólido (SSNMR) para a forma I da molécula de efavirenz. Assim, o RMN de ^{13}C calculado do efavirenz foi obtido no nível de teoria GIAOmPW1PW91 / 6-31G (d) //mPW1PW91/6-31G (d). Posteriormente, para análise entre o deslocamento químico escalonado e experimental, foram realizadas análises estatísticas dos resultados. Os resultados obtidos possuem valores satisfatórios de MAD e RMSD para o antiviral estudado. Assim, para a molécula de efavirenz MAD e RMSD antes, em ppm, a aplicação do fator de escalonamento é: 6,00 (3,64) e 7,62 (4,82). Embora o método GIAO não enraíze no formalismo pseudopotencial de onda plana da teoria do funcional de densidade normalmente utilizado para cálculos de δ do SSNMR, foi possível observar que o nível de teoria aplicado neste trabalho levou a uma boa reprodução do deslocamento químico experimental do SSNMR.

Palavras-Chaves: GIAO-mPW1PW91 / 6-31G *; RMN; Polimorfismo; Efavirenz.

Categoria: Trabalho de Pesquisa.

DETERMINAÇÃO ESTRUTURAL DO OSELTAMIVIR POR CÁLCULOS DO DESLOCAMENTO QUÍMICO DE ^{13}C NMR

Ayrton Weiner Cabral de Oliveira(IC)1*; Leonardo Buss Wulff(IC)1; Gustavo da S. do Prado(IC)1; Thais Forest Giacomello (PG)2; Leandro Leal Rocha De Oliveira(PG)2; Antônio Maia de Jesus Chaves Neto(PQ)3; Gunar Vingre Da Silva Mota(PQ)3; Fabio Luiz Paranhos Costa(PQ)1

*ayrtonweiner98@gmail.com

1Universidade Federal de Jataí, UAE de Ciências Exatas/Química

2Universidade Federal de Jataí, Programa de Pós-Graduação em Ciências Aplicadas à Saúde

3Universidade Federal do Pará, (UFPA) Belém, Pará, Brasil

Uma das classes antivirais mais utilizadas para o tratamento da influenza são os inibidores da neuraminidase (NAIs), e isso inclui o oseltamivir, um dos mais importantes anti-influenza. A combinação de estudos experimentais e cálculos de deslocamento químico (δ) de RMN ajudam a confirmar a estrutura das moléculas. Neste trabalho pretendemos correlacionar o δ de RMN de ^{13}C com o δ experimental do oseltamivir baseado na aplicação do fator de escalonamento. A primeira etapa para a obtenção dos δ é a análise conformacional. Depois de selecionar estes conformadores, eles são submetidos, no programa Gaussian '09, a cálculos de otimização e de frequência vibracional para mostrar os pontos estacionários e também confirmar a natureza dos pontos estacionários, respectivamente. Por fim, é obtido o confômero de menor energia e o δ de ^{13}C é calculado. Todos os cálculos de δ foram calculados (δ_{calc}) no nível mPW1PW91/6-31G (d) usando o método GIAO. Os δ escalonados (δ_{scal}) são obtidos de acordo com a equação $\delta_{\text{scal}} = 1,05.\delta_{\text{calc}} - 1,22$. A fim de conseguir uma aplicação generalizada de um fator de escala para o deslocamento químico GIAO-HDFT ^{13}C , é desejável combinar excelente precisão de MAD (desvio médio absoluto) e RMSD (erro quadrático médio). A comparação mostrou uma forte concordância entre o deslocamento químico experimental e calculado de RMN. Para a molécula de oseltamivir MAD e RMSD antes (depois) em ppm, a aplicação do fator de escala é: 4,90 (3,82) e 6,77 (5,41), respectivamente. Em conclusão, o nível de teoria GIAO-mPW1PW91 / 6-31G (d) aplicado para calcular o deslocamento químico da fase gasosa juntamente com o uso de um fator de escala é uma ferramenta muito atraente como uma alternativa para as abordagens mais exigentes em termos que são geralmente aplicado para reproduzir o deslocamento químico de ^{13}C de SSRMN.

Palavras-Chaves: GIAO-mPW1PW91 / 6-31G *; RMN; *Oseltamivir*.

Categoria: Trabalho de Pesquisa.

EDUCAÇÃO AMBIENTAL ESCOLAR E OS PLÁSTICOS COMO TEMA GERADOR

Ellen Lima Freitas de Jesus (PG) 1*; Wesley Fernandes Vaz (PQ)1

*ellen.jesus@hotmail.com

1Universidade Federal de Jataí, Programa de Pós-Graduação em Química

A forma com a qual o ensino se moldou, através do método expositivo, ainda é o mais usado e o conhecimento é repassado de forma compartimentada sem sua devida aproximação com a realidade, onde o indivíduo não se reconhece como parte integrante do meio ambiente. Tendo assim a necessidade de práticas diversificadas que exemplifiquem essa aproximação do ser com o seu ambiente. Um dos assuntos que propõe essa mudança e aproximação do ser com o ambiente é a educação ambiental, que pode ser usada em diversas áreas do conhecimento, contemplando o ensino de química. A educação ambiental hoje nas escolas de ensino básico ainda é um tema restrito, apesar de ser obrigatório pela BNCC (Base Nacional Comum Curricular). A inserção da educação ambiental no ensino de ciências se faz necessária para uma melhor integração do indivíduo com o ambiente e para melhor compreensão de assuntos teóricos em geral. Um dos problemas ambientais vividos hoje é o excesso de plástico descartados no meio ambiente. Inicialmente nos anos 1900 o plástico foi tido como revolução e evolução, logo após sua criação foi tido como solução de inúmeros problemas, material “indestrutível” que mesmo com a ação da natureza é resistente e se cair é inquebrável, com durabilidade prevista em média de 450 anos, esse fantástico material marcou a sua chegada e hoje marca sua permanência, com data distante de partida, causando sérios danos ao meio ambiente. Nesse sentido, o objetivo geral da pesquisa é trabalhar com a Educação ambiental escolar (EA escolar) como tema gerador na concepção Freiriana e verificar o potencial crítico transformador da EA escolar em contextos formativos e curriculares com o uso do tema plástico e polímeros.

Palavras-Chaves: Educação ambiental escolar; Tema gerador; Ensino de química.

Categoria: Trabalho de aluno de pós-graduação PPGQ-UFJ.

EFEITO ANTIMICROBIANO DE EMULSÕES DE ÓLEO ESSENCIAL DE CANELA (*Cinnamomum verum*) NA GEMINAÇÃO DE SEMENTES DE BARU (*Dipteryx alata*)

Júlio César J. Barbosa (IC) 1*; Daniela Pereira Dias (PQ)2 ; Maria Helena Sousa Barroso (PQ)1; Karla da Silva Malaquias (PQ)1

*juliocesar_jeronimo@hotmail.com

1Universidade Federal de Jataí, UAE de Ciências Exatas/Química

2Universidade Federal de Jataí, UAE Ciências Agrárias/ Engenharia Florestal

Introdução: A produção de grãos e mudas de espécies do cerrado são constantemente ameaçadas por organismos patogênicos. Estes organismos afetam diretamente o processo de germinação, desencadeando assim a inviabilidade da germinação in natura. Os óleos essenciais são metabólitos secundários constituídos por uma mistura de terpenos e ésteres aromáticos obtidos a partir de matérias vegetais (flores, folhas, madeira e raízes) com propriedade antimicrobiana comprovada na literatura. Com isso, estes compostos podem ser utilizados no controle do crescimento micelial de fitopatógenos. **Objetivos:** O presente trabalho teve como objetivos: 1) a análise do potencial antimicrobiano do filme obtido pela emulsão de quitosana com óleos essenciais de canela na assepsia de sementes de Barú. 2) Análise periódica do crescimento destes organismos patógenos durante todo período de germinação. **Metodologia:** Para realização da assepsia, inicialmente preparou-se duas emulsões com proporções 1000 µL de óleo essencial de canela. Estas foram sintetizadas através de um sistema de adição controlada de uma fase aquosa contendo quitosana em solução de ácido acético 20 % e de 30 % e 500µL de Tween 80, em uma fase orgânica contendo o óleo essencial juntamente com Tripolifosfato de sódio (TPP) e 500µL de Span 80. O procedimento de preparação da emulsão foi estimado em 6 horas. Os ensaios com as sementes foram realizados em placas Petri de 9 cm. Todas as placas continham papel filtro para manter a umidade necessária para a germinação. As análises foram realizadas com 1200 sementes, divididas em 4 tratamentos (T) de 400 sementes. T1: controle negativo (sementes tratadas com água destilada); T2 controle positivo (sementes tratadas com hipoclorito de sódio 13%); T3: emulsão de ácido acético 20 %; T4 emulsão de ácido acético 30%. Todas as placas possuíam 5 sementes e foram incubadas em uma estufa incubadora com demanda bioquímica de oxigênio (DBO) com temperatura de 30 °C e foto período de 12 horas. Foram realizadas análises das placas durante todo processo de germinação em períodos de 24 horas. **Resultados E Discussão:** Durante a primeira semana de germinação, pode-se observar que não houve crescimento de microorganismos nas sementes dos tratamentos T3 e T4. A análise das sementes no estágio final de germinação mostrou os seguintes números de sementes não germinadas: T1 - 56; T2 - 23; T3 - 18; T4 - 19. No T4 foi possível observar desenvolvimento mais rápido do índice de crescimento radicular. Os resultados apontam que as emulsões contendo o óleo essencial de canela apresentam atividade antimicrobiana sem efeito fitotóxico para a germinação das sementes de Barú. A continuidade da pesquisa é relevante para avaliar outras concentrações e outros óleos essenciais, bem como a eficiência do tratamento durante o armazenamento das sementes. Desta forma, seria possível diminuir o impacto ambiental através de substituição do uso de fungicidas no tratamento sementes, por compostos naturais de plantas aromáticas.

Palavras-Chaves: Óleo essencial; Nanoemulsão; Quitosana; Assepsia; Barú, Análise periódica.

Categoria: Trabalho de Pesquisa.

EFEITO DA CONCENTRAÇÃO DE TiO_2 SUPORTADO EM LAPONITA RD NA DEGRADAÇÃO DO CORANTE AZUL DE METILENO

Andressa Cristina de Almeida Nascimento(IC)1*; Péricles Joaquim H. da Cunha Lemos (IC)1; Alexia da Costa Feliciano (IC)1; Tatiana Batista (PQ)2; Douglas Silva Machado (PQ)2

*andyacanto@gmail.com

1Universidade Federal de Jataí, UAB de Ciências Exatas/Química

2Universidade Federal de Jataí, Programa de Pós-Graduação em Química

Neste estudo foi realizada a fotodegradação em luz ultravioleta do corante azul de metileno na presença de TiO_2 suportado em argila laponita RD. O fotocatalisador foi sintetizado em duas proporções de TiO_2 / Argila para estudar a influência da quantidade de TiO_2 . A síntese foi realizada por impregnação seguida de calcinação de uma mistura de TiO_2 de grau comercial em pré-dispersão de laponita RD em água. O material foi caracterizado por FTIR, XRF e DRX. A fotodegradação foi avaliada por medidas do espectro de absorção na faixa de 400 a 800 nm das soluções irradiadas na presença do fotocatalisador sintetizado. A concentração inicial do corante foi de $2,0 \times 10^{-5}$ mol L⁻¹. Os resultados de XRF mostram a incorporação do TiO_2 no material. Nenhuma diferença na concentração de elementos foi observada antes e após o experimento de fotodegradação, indicando que o material é estável nas condições do experimento. Os resultados de FTIR e DRX não mostram informação do TiO_2 , provavelmente porque a quantidade incorporada está abaixo da concentração analítica das técnicas. Observamos uma pequena quantidade de adsorção do corante no fotocatalisador, como evidenciado pelos experimentos na ausência de luz. Na presença de luz, a cinética da fotodegradação do azul de metileno segue uma lei de taxa de pseudo-primeira ordem, em cerca de três horas a absorbância da solução foi reduzida em 85%. A taxa de reação é proporcional ao teor de TiO_2 incorporado na argila. De acordo com os experimentos, o catalisador Laponita / TiO_2 é um material promissor para uso em fotodegradação de poluentes orgânicos.

Palavras-Chaves: Fotocatálise, Fotodegradação, Argilas, TiO_2 .

Categoria: Trabalho de Pesquisa.

EFEITO DO TIPO DE AGLUTINANTE EM ELETRODO DE PASTA DE CARBONO

Victor Hugo Augusto Pereira (IC)^{1*}; Gildiberto Mendonça de Oliveira (PQ)²

*victorhugoap98@hotmail.com

¹Universidade Federal de Jataí, UAE de Ciências Exatas/Química

²Universidade Federal de Jataí, Programa de Pós-Graduação em Química

O intuito do projeto de pesquisa é otimizar e melhorar o perfil voltamétrico do eletrodo de pasta de carbono (EPC) para uma maior sensibilização do equipamento, assim permitindo melhores perfis do material analítico. Para isso, foram testadas algumas variáveis como tipo de aglutinante, óleo mineral, Araldite®, acetato de polivinila (PVA), espessura de material do eletrodo e pressão exercida sobre a pasta. Para a obtenção de medidas, foi utilizado um potenciostato modelo Ivium. Os métodos de voltametria cíclica e voltametria de onda quadrada e os testes foram realizados em solução do par redox Ferri/ferro, juntamente com um eletrodo de referência (AgCl) e um contra eletrodo (fio de platina) e o eletrodo de trabalho (EPC). Foi observado nos resultados que a pressão influencia diretamente a corrente de pico anódica, já que ocorre a diminuição da resistência elétrica (principalmente aplicado ao PVA). Ocorreu uma melhora significativa no perfil voltamétrico, assim concluindo que a mudança do perfil voltamétrico tem relação direta com a resistência e ao tipo de aglutinante. Já com a Araldite® não ocorreu diferença significativa entre eletrodo com e sem pressão. Com relação a espessura foi observado que não houve relação entre espessura e perfil, já no PVA verificou-se uma diminuição na corrente a medida que aumenta a espessura. Evá Araldite® manteve perfis bem próximos, mostrando uma não relação entre espessura e perfil voltamétrico. Quanto a montagem, o eletrodo de PVA são mais quebradiços, e impossibilitam alteração após feitos, porém são mais fáceis de polir, melhorando a superfície de contato da amostra.

Palavras-Chaves: Araldite®, PVA, Óleo mineral, eletrodo pasta carbono.

Categoria: Trabalho de Pesquisa.

ESTEQUIOSOCIEDADE

Carlos Alberto Freitas Fidelis (PQ)1*; Douglas Silva Machado (PQ)2

*fideliskamila.fa@gmail.com

1Professor de ensino médio, CEPI - João Roberto Moreira-Jataí-GO

2Universidade Federal de Jataí, Programa de Pós-Graduação em Química

A dificuldade pedagógica do ensino de química e a sua relação com a matemática no estudo de estequiometria no ensino médio foi o ponto de partida para o desenvolvimento desta proposta de jogo. Desta forma, a inserção do jogo no contexto ensino-aprendizagem se apresenta como uma metodologia poderosa para as gerações de jovens atuais. Este trabalho tem como objetivo descrever o jogo “Estequiosociedade”, que visa trabalhar o tema relações estequiométricas com a abordagem de jogo em um tabuleiro. Foi utilizado um tabuleiro de cartolina, onde através de respostas os alunos disporiam suas peças de forma estratégica, assim adquirindo novas peças mediante acerto. O jogo consiste em um sistema de turnos, onde cada adversário manipula suas peças de acordo com um sistema de respostas. O jogador tira de forma aleatória um cartão onde está descrita uma pergunta sobre o tema estequiometria, inserido dentro do jogo. Cada pergunta certa gera um sistema de pontos que podem ser trocados por itens dentro do jogo com um limite de itens por jogador, sendo a correção feita pela equipe adversária e assim, ao final, são checadadas as respostas finais pelas equipes, onde a resposta incorreta gera pontuação à equipe adversária. O erro de correção gera um bônus por equipe: quando as duas equipes erram ninguém pontua. As peças possuem movimento individual dentro do jogo como as peças de xadrez. O jogo pode ser disputado em sistemas de turnos jogando de forma de 1 por 1, ou ainda com a disputa de 2 por 2. A dificuldade esperada inicialmente foi reduzida através de um sistema de explicação passo a passo com exemplos. Os alunos jogaram através das regras de forma satisfatória e dentro da projeção da aula de 1 hora e 20 minutos aproximadamente. Assim a execução do jogo permitiu abordar nas aulas posteriores ao tema estudado uma abordagem mais generalista do tema, logo ao final de um ciclo de 8 aulas foi aplicado novamente o jogo.

Palavras-Chaves: Estequiometria-jogos-sociedade.

Agradecimentos: Agradecimento em especial para o prof. Dr. Douglas Silva Machado, por sempre inspirar o melhor dos seus alunos e sempre acreditar em seu potencial.

Categoria: Trabalho de Pesquisa.

ESTUDO DA INFLUENCIA DAS DIFERENTES CONDIÇÕES EXPERIMENTAIS NO PREPARO DE MANTAS ELETROFIADAS DE PNVCL

Jordanna F. Assis (IC)1*; Fernando H. Cristovan (PQ)1; Tatiane M. Arantes (PQ)1; Emerson R. Camargo(PQ)2

***fernandes.jordanna9@gmail.com**

1Universidade Federal de Jataí, Programa de Pós-Graduação em Química

2Universidade Federal de São Carlos, Programa de Pós-Graduação em Química

O surgimento da engenharia tecidual resultou na elaboração de estratégias de criação de novos biomateriais com diferentes propriedades funcionais, apresentando soluções para diversos desafios nos avanços tecnológicos, especialmente da medicina. Dentre os biomateriais, os materiais poliméricos destacam-se devido à sua versatilidade de processamento e moldagem, podendo ser sintetizados com propriedades específicas. Existem estudos recentes da utilização de polímeros na recuperação da pele após alguma queimadura ou alguma doença que a exponha de alguma forma. Uma solução promissora que tem sido estudada na engenharia tecidual, é a utilização de nanofibras como substrato ou revestimento para facilitar a cura destas lesões. Um bom candidato para ser usado como biomaterial é a poli(N-vinilcaprolactama) (PNVCL), que é biocompatível e sensível à temperatura. Desta forma, neste trabalho foram preparadas nanofibras de PNVCL usando a técnica de eletrofição, buscando a obtenção de materiais biocompatíveis para a utilização como curativos para afecções cutâneas. A PNVCL foi polimerizada com sucesso por meio da polimerização radicalar com AIBN como iniciador e a obtenção do polímero foi comprovada por espectroscopia de infravermelho. Foram obtidas mantas eletrofiadas da PNVCL, mostrando a formação de fibras bem definidas e com a presença de algumas contas nas fibras distribuída ao longo das mantas. Estas mantas apresentaram baixa resistência, surgindo assim uma pergunta (problema) na pesquisa “Quais métodos podem ser utilizados para melhorar as propriedades mecânicas das fibras de Poli(N-vinilcaprolactama) (PNVCL)?”. Dando início ao novo projeto que tem como objetivo o preparo e otimização das propriedades mecânicas de nanofibras de PNVCL, através da utilização de métodos alternativos como a radiação ionizante e/ou a adição de nanopartículas.

Palavras-Chaves: Eletrofição; PNVCL; Biomateriais; Scaffold; Nanofibras.

Agradecimentos: PPGQ-UFJ, Liec-UFSCar e Laboratório de Síntese de Polímeros-UNIFESP.

Categoria: Trabalho de aluno de pós-graduação PPGQ-UFJ.

ESTUDO DO EFEITO DE NANOPARTÍCULA DE SILÍCA (SiO₂) MODIFICADAS COM DOMPERIDONA EM EMBRIÕES DE ZEBRAFISH (*Danio rerio*)

Daniela Cardoso Honorio (IC)^{1*}; Samuel Valentin Domingos (IC)¹; Douglas Silva Machado (PQ)²; Tatiana Batista (PQ)²

*danielac.honorio@outlook.com

¹Universidade Federal de Jataí, UAE de Ciências Exatas/Química

²Universidade Federal de Jataí, Programa de Pós-Graduação em Química

Diversas linhas de pesquisa podem ser beneficiadas com o uso da nanotecnologia em aplicações voltadas para a biotecnologia. No caso da aplicação terapêutica, as nanopartículas constituem um promissor sistema carreador de drogas, pois propiciam estabilidade, absorção e transferência tissulares com excelente capacidade farmacodinâmica. Na medicina reprodutiva, desenhos experimentais com diferentes aplicações de nanopartículas têm demonstrado resultados promissores na criopreservação de sêmen, marcação espermática e cultivo in vitro de folículos pré-antrais. A utilização de nanopartículas de sílica tem se mostrado interessante devido a propriedade de confinamento quântico e a presença de poros que possibilitam o acoramento de fármacos na sua superfície. As nanopartículas esféricas monodispersas de sílica podem ser produzidas por hidrólise de tetraetilortossilicato (TEOS) em meio alcoólico na presença de amônia (ARANTES et al., 2012). A domperidona é um fármaco antagonista dos receptores de dopamina que age nos receptores D2, utilizada como antiemético, sendo eficaz também no aumento da motilidade gastrointestinal. Este trabalho, teve como objetivo o preparo de nanopartículas de sílica com domperidona encapsulada, buscando a obtenção de materiais biocompatíveis para a utilização em aplicações biológicas. Para tanto foram sintetizadas nanopartículas esféricas de sílica pelo método de Stober com tamanho médio de 20 nm, caracterizados por meio da microscopia de transmissão. Posteriormente estas nanopartículas foram modificadas com domperidona caracterizadas por espectroscopia de absorção na região do infravermelho e por espectroscopia absorção de UV-Vis. Os estudos confirmaram o encapsulamento da domperidona na sílica. Por fim, foram realizados os estudos da toxicidade in vivo utilizando o Zebrafish como animal modelo. Estes ensaios mostraram que nem as nanopartículas de sílica puras e nem as nanopartículas de sílica encapsuladas com domperidona mostram efeito embriotóxico, e não mostram nenhuma alteração teratogênica. No entanto, a domperidona pura mostrou uma elevação na frequência cardíaca dos embriões e a presença das nanopartículas de sílica provocou uma diminuição, já nos embriões testados com as nanopartículas modificadas com domperidona apresentaram frequência cardíaca normal. Mostrando um efeito sinérgico de interação da domperidona com a sílica. Os resultados, demonstram um efeito promissor da utilização da nanopartículas de sílica no encapsulamento de fármacos.

Palavras-Chaves: Nanopartículas de Sílica; encapsulamento de fármacos; Zebrafish.

Categoria: Trabalho de Pesquisa.

ESTUDO DO ÓLEO ESSENCIAL DAS FOLHAS, CASCAS E RAÍZES DE MAMA-CADELA (*Brosimum gaudichaudii* Trécul - Moraceae)

Maria Eduarda R. dos Santos (IC)1*; Daniela Pereira Dias (PQ)2; Liliane Nebo (PQ)3 ; Karla da Silva Malaquias (PQ)1

*maria.eduarda.duda1212@gmail.com

1Universidade Federal de Jataí, UAE de Ciências Exatas/Química

2Universidade Federal de Jataí, UAE de Ciências Exatas/Engenharia Florestal

3Universidade Federal de Jataí, Programa de Pós-Graduação em Química

Plantas medicinais são vegetais que apresentam substâncias com propriedades terapêuticas, ou ainda que podem ser utilizados como matéria-prima e/ou precursores de fármacos, alimentos ou cosméticos. No Brasil há grande variabilidade de espécies vegetais que são encontradas em extensas áreas ricas em plantas nativas nos seis biomas. Dentre estes, o Cerrado é detentor de uma repleta diversidade biológica pouco explorada. Uma espécie que tem se destacado como potencial fármaco é a *Brosimum gaudichaudii* (Moraceae), popularmente conhecida como mama-cadela. Por ser rica em furanocumarinas vem sendo utilizada como fitoterápico denominado de Viticromin, fabricado a partir da extração de bergaptenos, presentes em sua casca e na raiz. O medicamento é usado na forma de pomadas ou soluções a 20%, e ainda na forma de comprimidos, no tratamento do vitiligo e discromias. O uso popular é feito por meio do chá das raízes e cascas. Desta forma, outros metabólitos podem estar presentes e não há estudo da interferência destes sobre vitiligo. Assim, o objetivo do trabalho proposto foi realizar o estudo quali e quantitativo do óleo essencial das folhas, cascas e raízes de *Brosimum gaudichaudii*. As plantas foram cedidas pelo Curso de Engenharia Florestal – Laboratório de Sementes UFG-Jataí campus Cidade Universitária. O material vegetal foi separado nas três partes de estudo e levadas à estufa por 48h. A extração dos voláteis foi feita por arraste a vapor usando o aparato de Clevenger, por 12h. O óleo obtido foi extraído por extração líquido-líquido com o uso de hexano. As análises quali e quantitativas foram realizadas por cromatografia gasosa aliada a espectrometria de massas (CG-EM) com aparelho Perkin Elmer® SQ8, nas seguintes condições: Injeção = 250°C; Inicial = 60°C; Tfinal = 260°C com taxa de 5°C/min, totalizando 40 min. Além da comparação com os espectros de massa da biblioteca NIST®, os compostos terão o índice de Kovats calculado. Os cromatogramas mostram a presença de mono e diterpenos, assim como compostos oxigenados. As análises estão em fase final de tratamento dos dados e apresentam complexidade e variedade de metabólitos presentes no óleo essencial de todas as amostras.

Palavras-Chaves: Mama-cadela; *Brosimum gaudichaudii*; Hidrodestilação; CG-EM

Categoria: Trabalho de Pesquisa.

ESTUDO DO POTENCIAL CATALÍTICO DE NANOPATES DE CeO_2

Arthur Martins Gabriel (IC)1*; Karla da Silva Malaquias (PQ)1; Tatiane Moraes Arantes (PQ)2

*arthurgabriel98@gmail.com

1Universidade Federal de Jataí, UAE de Ciências Exatas/Química

2Universidade Federal de Jataí, Programa de Pós-Graduação em Química

Nos últimos anos, as nanoestruturas de óxido de cério têm atraído bastante atenção da comunidade científica graças às suas propriedades de alta estabilidade térmica, condutividade elétrica, alta mobilidade de oxigênio e capacidade de armazenamento, assim como seu amplo uso como catalisador heterogêneo/suporte catalítico, sensores e células solares. Além disso, evidencia-se que a obtenção de nanoestruturas de CeO_2 com diferentes morfologias e tamanhos é um processo relativamente fácil, agregando diferentes propriedades ao Cério. Este metal é classificado como uma terra rara com boa natureza condutiva, o que amplia ainda mais o leque de possibilidades de utilização. Neste trabalho, sintetizou-se nanoestruturas de CeO_2 no formato de nanoplates por meio do método hidrotérmico pela redução do nitrato de cério e estudou-se sua atividade catalítica. As nanopartículas de CeO_2 foram caracterizadas por difração de raios X (DRX), espectroscopia RAMAN e microscopia eletrônica de transmissão (MET). A atividade catalítica dos nanoplates foi investigada na reação de oxidação do álcool benzílico e seguida por cromatografia gasosa ligada ao espectrômetro de massas (CG-MS), espectroscopia de UV-Vis e espectroscopia de infravermelho. Neste teste, oxidou-se o álcool com carbonato de potássio, na presença das nanopartículas de cério, em um reator de metal à temperatura e pressão constante por 24 horas. Para fins de comparação, o mesmo teste foi realizado sem a presença do catalisador. Os resultados da DRX indicaram que as nanoestruturas possuíam estrutura cúbica (JCPDS # 34-0394), com cristais medindo cerca de 22nm. As imagens de microscopia MET evidenciaram o tamanho e o formato das nanoestruturas. A performance catalítica dos nanoplates na oxidação do álcool benzílico em seus derivados foi quantificada por meio de comparação com curva de calibração por espectroscopia de UV-Vis e análise do cromatograma de íons totais da cromatografia gasosa com espectrometria de massas. Os resultados indicaram valores satisfatórios de taxa de conversão do substrato. Esse trabalho demonstra que os nanoplates de CeO_2 são eficazes na catálise da oxidação do álcool benzílico e apresentaram atividade nesse substrato.

Palavras-Chaves: Nanopartículas; Catálise; Óxido de cério.

Agradecimentos: CNPq, LIEC-DQ-UFSscar.

Categoria: Trabalho de Pesquisa.

ESTUDO ELETROQUÍMICO DE ELETRODOS DE PASTA DE CARBONO MODIFICADOS COM NANOPARTÍCULAS DE OURO FUNCIONALIZADAS PARA A DETECÇÃO DE HANTAVÍRUS

Maria Luiza L. L. Sierra (PG)1*; Marielena V. Saivish (PG)1; Marcos L. Moreli (PQ)1; Gildiberto (PQ) M. Oliveira2; Tatiane M. Arantes (PQ)1,2

*mluizasierra@gmail.com

1Pós-Graduação em Ciências Aplicadas à Saúde. Universidade Federal de Jataí.

2Universidade Federal de Jataí, Programa de Pós-Graduação em Química

A infecção por hantavírus é uma zoonose grave, de alta letalidade, que produz distúrbios hemorrágicos causada por um arbovírus da família Bunyaviridae. O diagnóstico laboratorial atualmente é realizado a partir da análise dos soros por ensaio imunoenzimático (ELISA) para detecção de anticorpos da classe IgG usando a N-proteína recombinante do hantavírus Araraquara. Uma metodologia de diagnóstico promissora que também pode ser utilizada é a de biossensores amperométricos, devido à sua simplicidade, baixos custos de instrumentação, possibilidade de realização em tempo real e geralmente alta sensibilidade. Desta forma, neste trabalho o objetivo foi o de avaliar eletroquimicamente o uso da N-proteína recombinante como bioreceptor para a elaboração de um biossensor eletroquímico, tendo como modificadores em pasta de carbono: nanopartículas de ouro (NpAu) e pó de grafite recoberto com ouro eletrodepositado (PM) funcionalizados com a N-proteína. Investigou-se também as diferentes condições de secagem da pasta de carbono, utilizando solvente orgânico volátil ou a incidência da radiação UV. Este estudo foi realizado utilizando a medida do potencial de circuito aberto (Eca), sendo empregado o planejamento fatorial completo (24 e 25) para avaliar o efeito das diferentes variáveis na elaboração dos eletrodos. Foi possível identificar que para o sistema do par redox ferro/ferricianeto, as variáveis NpAu e a funcionalização com a N-proteína, foram as que mais afetaram o perfil do Eca do sistema. Nestas condições verificou-se que a presença da N-proteína promove uma diminuição no potencial de circuito aberto dos eletrodos. Para os ensaios obtidos no fatorial 25 referente aos testes com amostras sorológicas para o IgG de caráter negativo ou positivo (IgG- ou IgG+) para o Hantavírus, não foi possível observar uma diferenciação entre os potenciais de circuito aberto apresentados para estes eletrodos em relação ao fatorial 24. Foi possível observar que em todas as variações dos ensaios realizados ocorreram variações sobre potencial dos eletrodos. Todavia, esperava-se que o IgG negativo não apresentasse nenhuma alteração no potencial, sendo este igualável ao comportamento do branco. Uma possibilidade para a melhora deste resultado é o da diminuição do tempo de contato entre o eletrodo e as amostras sorológicas, evitando o bioacúmulo de substâncias na superfície ativa do eletrodo, o que pode gerar erros na leitura do potencial. De modo geral, é possível afirmar que a utilização da N-proteína recombinante do nucleocapsídeo do Hantavírus Araraquara para a construção dos biossensores é muito viável, sendo esta de extrema importância para o estudo de técnicas de diagnóstico muito mais efetivas e rápidas.

Palavras-Chaves: Biossensores; Nanopartículas de ouro; Hantavirus, planejamento fatorial.

Categoria: Trabalho de aluno de pós-graduação PPGQ-UFJ.

ESTUDO PRELIMINAR: LEVANTAMENTO DOS PRINCÍPIOS ATIVOS DOS PESTICIDAS MAIS UTILIZADOS NO MUNICÍPIO DE JATAÍ-GO

João Victor Borges Assis (IC)^{1*}; Francismário Ferreira dos Santos (PQ)¹
***assisemail39@gmail.com**

¹Universidade Federal de Jataí, UAE de Ciências Exatas/Química

O município de Jataí-GO, 13º Microrregião Geográfica do Sudoeste Goiano na Macrorregião Centro Oeste do Brasil, latitudes 17° 53' S e 51° 42' O de Greenwich, têm, de acordo com dados do IBGE em 2018, uma população de 99.674 habitantes, em uma área de unidade territorial de 7.174 Km². A atividade agropecuária no município de Jataí é compreendida como resultado de dois momentos econômicos distintos, a saber: 1º momento tem como marca o final da década de 1960, mais precisamente até 1969, pela pecuária; 2º momento inicia-se na década de 1970, com a formação de grandes lavouras de grãos. Isso demonstra um uso já antigo de insumos agrícolas na região, o que leva a necessidade de análises químicas qualitativas e quantitativas dessas espécies no ambiente. Devido ao uso de insumos agrícolas, o presente trabalho realizou um estudo preliminar pesquisando os principais princípios ativos dos pesticidas aplicados nas culturas do município. As informações sobre os principais pesticidas aplicados no município foram obtidas por meio de entrevistas em estabelecimentos comerciais e produtores regionais. Além disso, levou-se como base também o levantamento realizado, em 2016, dos pesticidas usados ao redor da cidade, feito por Miranda¹. A partir dos dados coletados, identificou-se 35 princípios ativos e, com isso, foi possível classificá-los em termos da sua fórmula molecular, classe, toxicidade e grupo químico. Assim, conclui-se que entre os compostos mais usados, além de possuírem grupos químicos bastante diversos, apresentam nível de toxicidade entre III e IV (65,7%). Ademais, é importante enfatizar que a maior parte deles é classificada como inseticidas ou herbicidas (65,7%). Em função da possibilidade da poluição das águas superficiais e subterrâneas do município de Jataí e da contaminação da biota e seres humanos, faz-se necessário avaliar a dinâmica dos pesticidas no ambiente como um todo.

Palavras-Chaves: Levantamento; Pesticidas; Princípios ativos; Jataí.

Categoria: Trabalho de Pesquisa.

ESTUDO VOLTAMÉTRICO DA ELETRODEPOSIÇÃO DE BISMUTO EM PASTA DE CARBONO

Vinicius Araujo Soares(IC)1*; Priscila Pereira de Souza(IC)1; Gildiberto M. de Oliveira (PG)2
*viniciusarausoares_14@hotmail.com

1Universidade Federal de Jataí, UAE de Ciências Exatas/Química

2Universidade Federal de Jataí, Programa de Pós-Graduação em Química

Neste trabalho, investigou-se por voltametria cíclica a eletrodeposição de bismuto sobre uma superfície de pasta de carbono (pó de grafite + óleo mineral) e dentro de uma pasta de carbono aquosa. O objetivo deste trabalho foi investigar as condições experimentais para obtenção de pó de grafite recoberto por bismuto eletrodepositado, possibilitando seu emprego posterior como modificador em eletrodo de pasta de carbono. A solução aquosa de bismuto (III) foi preparada com 0,010 mol L⁻¹ de oxocarbamato de bismuto (Bi₂O₂CO₃) e 4 mL de ácido clorídrico 0,50 mol L⁻¹, seguida por aquecimento para eliminar o CO₂, assim obtendo uma solução ácida de cloreto de bismuto. A pasta aquosa utilizada foi composta por pó de grafite e solução aquosa em diferentes proporções (60%/40% e 70 %/30%). A pasta aquosa foi inserida dentro de um eletrodo de trabalho feito em seringa de 1 mL, colocando 0,20 g da pasta aquosa, com contato elétrico feito por fio de cobre. O estudo com eletrodo de pasta de carbono em solução ácida de Bi³⁺ mostrou que as curvas voltamétricas exibem duas regiões catódicas (c1 e c2) e uma região anódica (a1). A corrente catódica se eleva a partir de potenciais mais negativos que 0,000 V (c1). A região c1 está relacionada a redução de Bi³⁺ a bismuto metálico e c2 à reação de desprendimento de gás hidrogênio. Na região a1 ocorre a oxidação do bismuto metálico. No processo de eletrodeposição dentro da pasta investigou-se o efeito das variáveis: adição de glicerol e razão em massa de pó de grafite/solução aquosa. De maneira similar, verificou-se um perfil voltamétrico com duas regiões catódicas (c1 e c2) e uma região anódica (a1), correspondendo aos mesmos processos citados anteriormente. Ademais, observou-se que com glicerol as correntes catódicas e anódicas são maiores, indicativo de que este tem influência sobre a cinética de eletrodeposição do bismuto. Verificou-se também que o aumento na proporção de solução aquosa sem glicerol na pasta afeta a corrente de redução/oxidação, mas não de forma linearmente dependente. Já em solução com glicerol, a variação em correntes catódicas e anódicas é menor, à medida que altera a relação em massa de pó de grafite e solução aquosa. Estes resultados indicam a possibilidade de produzir pó de grafite recoberto por bismuto eletrodepositado e que as variáveis, presença/ausência de glicerol e proporção de pó de grafite/solução, serão fatores importantes para serem estudados na avaliação do emprego do eletrodo de pasta de carbono modificado com bismuto eletrodepositado em eletroanálise.

Palavras-Chaves: Pasta de Carbono; Dopamina; Voltametria de Onda Quadrada-Bismuto.

Categoria: Trabalho de Pesquisa.

FORMAÇÃO CONTINUADA DE PROFESSORES PARA EDUCAÇÃO INCLUSIVA: OS DESAFIOS E COMPROMISSOS DOCENTES

Josimar Juvenal (IC)1*; Fabiana Darc Miranda (PG)2; Eveline Borges Vilela Ribeiro (PQ)2
*josimar_juvenal@yahoo.com

1 Universidade Federal de Jataí, UAE de Ciências Exatas/Química

2Universidade Federal de Jataí, Programa de Pós-Graduação em Química

Os cursos de formação continuada visam atender as demandas para o aperfeiçoamento dos docentes na desenvoltura didática e pedagógica nos mais diversos meios de ensino-aprendizagem. Além disso, visam suprir também, os desafios e dificuldades enfrentados no dia a dia das instituições de ensino, uma vez que há constantes mudanças e transformações na sociedade (JUVENAL; MIRANDA; VILELA-RIBEIRO, 2019). Esta é uma etapa inicial de um projeto em desenvolvimento e busca avaliar quais são os compromissos e desafios que professores e profissionais de apoio estão dispostos a assumir para que haja uma melhor inclusão de alunos, seja com deficiência ou não, em salas de aula regulares. Para tanto, foi aplicado um questionário com questões discursivas aos docentes sobre quais compromissos estariam dispostos a assumir. A avaliação dos questionários se deu através da metodologia de Análise de Conteúdo (BARDIN, 2016). Aplicou-se o questionário a 30 professores. A participação na pesquisa foi volitiva, isto é, somente aqueles que se interessassem participariam. Assim, dos 30 questionários entregues, apenas 21 foram devolvidos. Os mesmos foram nomeados de P 1 a P 21 para garantir o anonimato dos participantes. Desta forma, foram criadas as seguintes categorias: 1) situação marcante e problemas em sala de aula; 2) expectativas de formação continuada; 3) desafios e compromissos. Neste trabalho, iremos abordar a categoria 3. Através do discurso escrito dos participantes, podemos perceber que os professores e profissionais de apoio se preocupam com o fato de uma melhor inclusão e na elaboração de materiais que venham a contribuir para o ensino aprendizagem, observamos isso pelas falas dos professores, P1: "me dedicar a especialização na educação inclusiva" e P7: "elaboração de materiais pedagógicos para auxiliar no desenvolvimento". Assim, a fim de atender as demandas desses profissionais de educação foram apresentados materiais do Ministério da Educação da série "Saberes e Práticas de Inclusão" (BRASIL, 2015), o qual contém orientações, instruções, mecanismos para a educação e avaliação dos mais variados tipos de deficiência, entre outras diversas informações. Portanto, após o término dos encontros e com as discussões promovidas pelo curso de formação continuada, os professores e profissionais de apoio se mostraram surpresos com as mais diversas ferramentas que são fornecidas para a implementação da inclusão de alunos com deficiência e/ou transtornos globais em salas de aula normais.

Palavras-Chaves: Formação continuada; Ensino-aprendizagem; Compromissos/desafios.

Categoria: Trabalho de Pesquisa.

INFLUÊNCIA DA FASE MÓVEL NA SELETIVIDADE E SIMETRIA DOS PICOS DE 3,4-MDA E 3,4-MDMA POR RP-UHPLC/DAD

Leandro Oka Duarte (PG)1*; Bruno Ferreira (PG)1; Ícaro Salgado Perovani (PG)2; Marcelo Firmino de Oliveira (PQ)1

*leandro.oka@usp.br

1 Grupo de Eletroquímica, Eletroanalítica e Química Forense – Departamento de Química – FFCLRP – USP

2 Laboratório de Metabolismo in vitro e Técnicas de separação – Departamento de Química – FFCLRP – USP

Para se obter uma separação eficiente por cromatografia líquida, uma série de fatores pode ser estudada. Parâmetros como a natureza da fase estacionária, composição da fase móvel e seu pH, estrutura molecular e propriedades dos analitos e até mesmo a temperatura são essenciais para alterar a seletividade e, consequentemente, a resolução (R_s) das análises. Portanto, o escopo principal deste trabalho foi avaliar a influência do tipo de fase móvel por cromatografia em fase reversa (RP) à fim de propiciar seletividade suficiente entre 3,4-MDA ($pK_a = 10,0$) e 3,4-MDMA ($pK_a = 10,4$), dois derivados fenetilamínicos de interesse forense, conhecidos por seus efeitos estimulantes e psicodélicos, cuja estruturas químicas se diferem por uma metila. O procedimento experimental envolveu a injeção de 20,0 μL (10,0 $\text{ng}/\mu\text{L}$) do pool de ambos padrões em sistema UHPLC-DAD (Cromatógrafo Líquido de Ultra Eficiência acoplado ao Detector por Arranjo de Diodos) equipado com coluna NST C18 (25 cm x 4,6 mm d.i., 5 μm), à temperatura de 25 °C, modo isocrático a um fluxo de 1,2 mL/min e detecção em 195 nm. Para desenvolvimento da fase móvel, empregaram-se dois modificadores orgânicos (metanol e acetonitrila), um aditivo (ácido acético) e um tampão (fosfato 25 mmol.L-1, pH = 2,5). Combinações binárias com ou sem aditivos foram analisadas, baseando-se no caráter ácido, básico e/ou dipolar dos mesmos. Os resultados mostraram que as misturas binárias, sem aditivos, não propiciaram nenhuma seletividade ($R_s = 0$) para o 3,4-MDA e 3,4-MDMA nas condições de baixa ou alta força eluotrópica, cuja coeluição se deveu à interação de hidrogênio significativa entre ambos os derivados. Em contrapartida, a presença de ácido acético na fase móvel revelou o efeito positivo da acidez na resolução ($R_s = 1,4$), apesar de originar picos com alongamento caudal ($A_{ac} = 2,5$). A diminuição do pH (4 ~ 5) afetou o grau de ionização dos silanóis residuais da fase estacionária, provocando interações secundárias com analitos ionizados. Por fim, para tentar minimizar as interações do analito com os silanóis, substituiu-se a água pelo tampão fosfato. A alteração da fase móvel diminuiu a assimetria ($A_{ac} = 1,2$), mantendo-se a seletividade e aumentando a resolução ($R_s = 2,0$), indicando a tendência para qual a melhor condição é obtida. Deste modo, outros aditivos (ácido fórmico, trietilamina e etc.) serão testados para se alcançar melhores respostas de seletividade e simetria do pico, uma vez que foi possível observar a mudança de seletividade dos analitos através da ionização promovida pela mudança de pH da fase móvel para níveis mais ácidos.

Palavras-Chaves: Química Forense; Cromatografia em fase reversa; Fenetilaminas.

Agradecimentos: À Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior (CAPES).

Categoria: Trabalho de Pesquisa.

INFLUÊNCIA DA VARIAÇÃO DA TEMPERATURA NA ADSORÇÃO DO CORANTE AZUL DE METILENO EM ARGILAS DO SUDOESTE GOIANO

Samuel Valentim Domingos (IC)^{1*}; Tatiana Batista (PQ)²; Douglas Silva Machado (PQ)²
*samuelvalentimdomingos@gmail.com

¹Universidade Federal de Jataí, UAE de Ciências Exatas/Química

²Universidade Federal de Jataí, Programa de Pós-Graduação em Química

As argilas são minerais formados por alumino-silicatos, podendo conter também ferro e magnésio entre outros. Suas partículas possuem tamanhos menores ou iguais a 2µm, o que lhes confere uma grande área superficial proporcionando uma boa aplicação como adsorvente. O corante azul de metileno é usado como sonda em estudos de sistemas micro heterogêneos, pois suas características espectrofotométricas são bem conhecidas, possibilitando obter informações sobre a superfície a capacidade de adsorção das argilas em estudo. Objetivo do presente trabalho foi a avaliação do efeito da temperatura na adsorção do corante azul de metileno em uma argila natural extraída da região sudoeste do estado de Goiás. A argila do tipo montmorilonita foi extraída da região da cidade de Montividiu-Go e purificada. Foram preparadas suspensões de diferentes concentrações de argila de 0,5g L⁻¹, 1,0g L⁻¹, 2,5g L⁻¹, 3,5g L⁻¹, 5,0g L⁻¹, 7,5g L⁻¹ e 10,0 g L⁻¹. As suspensões permaneceram sob agitação magnética por 24h. A suspensão foi aquecida até a temperatura de 45°C e acondicionada em um calorímetro de caixa de madeira com isolamento de isopor, permitindo assim realizar o experimento sob temperatura constante. Após estabilizada a temperatura adicionou-se uma alíquota do corante azul de metileno(5x10⁻⁴mol L⁻¹), obtendo-se a concentração final de corante de 4x10⁻⁵mol L⁻¹ nas suspensões de argila. O mesmo procedimento foi realizado na temperatura de 10°C. Alíquotas foram retiradas das suspensões em diferentes intervalos de tempo , centrifugadas a 4000rpm por 15min e os sobrenadantes analisados em UV-vis. Os resultados obtidos indicam que em temperaturas altas (45°C) o processo de adsorção ocorre instantaneamente,ou seja, na medida de tempos 0 minutos praticamente todo o corante já havia sido adsorvido. Na temperatura de 10°C o processo de adsorção foi significativamente mais lento, principalmente nas concentrações mais baixas de argila (0,5 e 2,5 g L⁻¹), porém nas concentrações de 5 g L⁻¹ e 10 g L⁻¹ a adsorção foi instantânea. Na concentração 0,5 g L⁻¹ praticamente não ocorreu adsorção durante o período analisado de 1 hora. Na concentração de 2,5 g L⁻¹ atingiu-se o equilíbrio de adsorção em 30 minutos. O estudo do efeito da temperatura na adsorção do corante em argila indicou que em altas temperaturas a adsorção é instantânea enquanto que em baixas temperaturas a adsorção ocorre mais lentamente, porém o corante é completamente removido da solução após o período de 1 hora, exceto para a concentração de argila 0,5g L⁻¹.

Palavras-Chaves: Argila; Adsorção; Temperatura; Azul de metileno.

Categoria: Trabalho de Pesquisa.

INSTRUÇÃO PELOS COLEGAS NO ENSINO DE QUÍMICA

Franciele O. Caetano(IC)^{1*}; Esdras L. Bispo Jr. (PQ)²; Fábio L. Paranhos (PQ)³
*ofranciele535@gmail.com

¹Universidade Federal de Jataí, UAE de Ciências Exatas/Química

²Universidade Federal de Jataí, UAE de Ciências Exatas/Ciência da Computação

³Universidade Federal de Jataí, Programa de Pós-Graduação em Química

O projeto tem como função usar a Instrução pelos Colegas (Peer Instruction) no ensino de Química. Ela é uma metodologia de ensino ativa implementada com o propósito de atrair a atenção dos alunos e aumentar a produtividade na sala de aula, com discussões dos conteúdos, resultando assim em uma metodologia de aprendizagem por pares. A proposta é que esta metodologia seja testada de várias formas com nossos alunos da Universidade Federal de Jataí no curso de Química, para avaliar a interação e a recepção dos alunos com este método. A Instrução pelos colegas foi criada pelo professor de Física da Universidade Federal de Harvard, Eric Mazur. Sua ideia sempre foi atrair a atenção dos seus alunos, por mais que ele se esforçasse em passar o conteúdo da maneira clara, eles não estavam compreendendo tão bem quanto ele julgava que deveria. Certa vez, percebeu um interesse maior dos alunos quando era realizada a discussão do conteúdo entre eles. Essa metodologia tem melhores resultados quando o professor consegue que os alunos estudem o assunto a ser abordado antes de estar em sala de aula. Durante a aula, o professor revisa o determinado, em no máximo 15 minutos e, em seguida, aplica aos alunos questões para ser respondidas através de plaquinhas ou com o auxílio de computadores ou smartphones. Se a média de acertos da turma estiver entre 35% e 70% os grupos vão discutir a questão aplicada. Assim, o professor analisa os resultados com os alunos e propõe novas questões ou retorna a discussão do conceito novamente. Pode se usar também Tecnologias Digitais da Informação e Comunicação (TDICs) que tornam-se um instrumento facilitador desta metodologia. A Instrução pelos Colegas apresenta resultados muito positivos em diversos contextos e é uma metodologia que vem sendo adotada em várias instituições de ensino e em diversos países no mundo. A implementação desta metodologia permite ser usada em conjunto com muitos outros métodos, podendo ser uma opção promissora e promotora da aprendizagem do aluno, contribuindo no entendimento dos conceitos e desenvolvendo habilidades de comunicação.

Palavras-Chaves: Aprendizagem; Produtividade; Método.

Categoria: Trabalho de Pesquisa.

INVESTIGAÇÃO SOBRE O CONTEÚDO INICIAL DE QUÍMICA ORGÂNICA

Wellington Gabriel Clarks da Silva (IC)^{1*}; Giovanni Cavichioli Petrucelli (PQ)²

*wellingtongabriel5@yahoo.com.br

¹Universidade Federal de Jataí, UAE de Ciências Exatas/Química

²Universidade Federal de Jataí, Programa de Pós-Graduação em Química

A Química Orgânica estuda os compostos que possuem carbono. Atualmente aproximadamente dez milhões são os compostos existentes, mas cerca de nove milhões são de compostos orgânicos. A Química Orgânica é um estudo fundamental para a Biologia e para a Medicina. Dessa forma, é imprescindível que o aluno do ensino médio compreenda os conteúdos iniciais para entender assuntos mais complexos posteriormente. O objetivo desse trabalho foi identificar as dificuldades dos alunos do 3º ano do ensino médio e assim traçar estratégias de ensino para melhorar a situação. A metodologia utilizada foi um questionário aplicado com 3 questões sobre tipos de cadeia carbônica, classificação de carbonos na cadeia e nomenclatura, 40 alunos do 3º ano A do Colégio Estadual São João de Aparecida do Rio Doce-GO responderam ao questionário. Após a correção dos questionários observou-se que a maioria dos alunos tem dificuldade em dar nome as moléculas orgânicas.

Palavras-Chaves: Química orgânica; Conteúdo; Ensino médio.

Categoria: Trabalho de Prática como Componente Curricular.

MONTAGEM DE UM POLARÍMETRO COM MATERIAL DE BAIXO CUSTO

Carine Olivia Bertuol (IC)^{1*}; Matheus Henrique Araújo Silva (IC)¹; Ricardo Alexandre Figueiredo de Matos (PQ)¹

*carine.oliviabertuol@gmail.com

¹Universidade Federal de Jataí, UAE de Ciências Exatas/Química

O polarímetro é um equipamento responsável pela determinação da pureza e concentração de amostras através da rotação luz polarizada de substâncias opticamente ativas, sendo sua aplicação conhecida por conta da grande precisão nos resultados. O polarímetro é utilizado em diversas áreas, como por exemplo: indústria farmacêutica, para medir a rotação óptica do princípio ativo de medicamentos; indústria de alimentos, na determinação do teor de açúcar em alimentos; na área de Pesquisa, no desenvolvimento de novos produtos; e no Ensino, sendo utilizado como ferramenta de ensino para os conteúdos relacionados a estereoquímica (O ramo da química que estuda aspectos tridimensionais das moléculas). O objetivo do trabalho é construir um polarímetro com materiais de baixo custo para as aulas experimentais de polarimetria. Materiais e métodos: Caixa de MDF, LED, filtros polarizadores, mini CD, luvas de PVC de 3/4, e encaixes para caixa de força. O Polarímetro foi montado e está sendo testado, Figura 1.



Figura 1. Polarímetro montado com material de baixo custo

Palavras-Chaves: Polarímetro; Ensino de química; Rotação óptica.

Categoria: Trabalho de Prática como Componente Curricular.

OBTENÇÃO E CARACTERIZAÇÃO DE BIXINA A PARTIR DE EXTRATO DE URUCUM (*Bixa orellana* L.)

Géssica C. S. Costa (PG)^{1*}; Thaís M. Arantes (PQ)²; Tatiane M. Arantes (PQ)³

*gcgessicacosta@gmail.com

¹Universidade Federal de Jataí, UAE de Ciências Exatas/Química ²Instituto Federal Goiano – *Campus* Iporá

³Universidade Federal de Jataí, Programa de Pós-Graduação em Química

A bixina é um carotenoide extraído das sementes do urucum (*Bixa orellana* L.), um arbusto originário do Brasil e de regiões tropicais, pertencente à família Bixaceae. A Bixina é o carotenoide mais utilizado pela indústria alimentícia. Os principais constituintes do extrato são: bixina que é lipossolúvel, compondo cerca de 80% dos carotenoides existentes; e a norbixina que é hidrossolúvel. Tendo como principal propriedade a atividade antioxidante, sendo empregada na prevenção da oxidação celular, inibindo assim o desenvolvimento de células cancerígenas, complicações cardiovasculares e o envelhecimento, pois a atividade antioxidante destes compostos diminui os radicais livres existentes no organismo humano (CHISTÉ et al., 2011). Neste contexto o presente trabalho teve por objetivo a extração da bixina em meio básico. Após a maceração das sementes do urucum foi adicionado a solução de NaOH a 5%, após o extrato foi filtrado e posteriormente foi realizada uma extração líquido-líquido para remoção das substâncias oleosas com Éter Etílico. As substâncias oleosas foram secas e analisadas no espectrômetro de absorção na região do infravermelho com transformada de Fourier (FT-IR) da marca Shimadzu modelo IRAffinity-1. A fase oleosa apresentou cor avermelhada, com gotículas do óleo, o que indica a presença da bixina dissolvida, isso ocorre devido à polaridade do solvente utilizado, pois além de extrair o óleo extraiu também a bixina que é lipossolúvel. O espectro apresentou absorbância na região de 1745 cm⁻¹ com estiramento C=O dos ácidos carboxílicos e 995,28 cm⁻¹ com estiramento C-O dos ésteres, confirmando a presença de bixina. O um resultado semelhante foi observado por Husa e colaboradores (2018), utilizando o padrão bixina, segundo eles as bandas na região de 1704 cm⁻¹ e 970 cm⁻¹ são características dos carotenoides, principalmente a bixina. O mesmo resultado foi obtido por Yusa-Marco e outros (2008), afirmando que as bandas 1721, 1603, 1149 e 962 cm⁻¹ faz parte do estiramento do esqueleto de hidrocarbonetos existentes na bixina. Outra absorção na região de 3348 cm⁻¹ de OH o que indica a presença de álcool, sugerindo assim a existência do geranilgeraniol presente nas sementes do urucum. Sendo assim o método de extração mostrou eficiente para extração dos compostos da semente do urucum.

Palavras-Chaves: Bixina; Extração; Análise.

Categoria: Trabalho de aluno de pós-graduação PPGQ-UFJ.

OS PRINCIPAIS PROBLEMAS EM FÍSICO-QUÍMICA

Lana Sousa Silva^{1*}; Eveline Borges Vilela Ribeiro(PQ)²

***Lana.sousa0207@gmail.com**

¹Universidade Federal de Jataí, UAE de Ciências Exatas/Química

²Universidade Federal de Jataí, Programa de Pós-Graduação em Química

As disciplinas de físico-química são disciplinas que compõem a grade curricular de um curso superior de química. Essas disciplinas têm um alto índice de reprovação e são encaradas pelos alunos com um certo receio, devido ao seu elevado nível de abstração, das quais os conceitos e definições tal como, limites, continuidade, derivada, e integral constantemente utilizados integrados à química. A partir dessas observações, o presente trabalho tem como objetivo identificar as principais dificuldades encontradas na disciplina de físico-química por alunos em um curso superior de química. Para a identificação dessas dificuldades realizaremos uma pesquisa qualitativa com o auxílio de um questionário aplicado em alunos no curso superior de química na Universidade Federal de Goiás-Regional Jataí. A análise do questionário será feita a partir da Análise de Conteúdo.

Palavras-Chaves: Alunos; Físico-química; Dificuldades.

Categoria: Trabalho de Prática como Componente Curricular.

POSSIBILIDADES DE ESTUDO PARA O ENSINO DA QUÍMICA DO ELEMENTO FLÚOR

Alessandro Eusebio de Souza (IC)1*; Wesley Fernandes Vaz (PG)2

*alessandroeusebio3@gmail.com

1Universidade Federal de Jataí, UAE de Ciências Exatas/Química

2Universidade Federal de Jataí, Programa de Pós-Graduação em Química

Os elementos químicos possuem uma grande importância no nosso dia a dia, cujo os reflexos das reações químicas envolvendo esses elementos químicos são determinantes para a nossa vida. Nesse sentido, este resumo discute a história do elemento químico flúor e sua importância para o ensino de Química. O flúor é um elemento químico pertencente à família 7A da tabela periódica, sendo definido pelo símbolo F, tendo um número atômico 9 (contendo 9 prótons e também 9 elétrons). De massa atômica 19u, esse elemento se encontra alojado no grupo dos halogênios. O Flúor é um gás de cor amarelo pálido, e também o elemento mais eletronegativo e reativo de todos os elementos da tabela periódica, em sua forma ionizada (F-) pode ser perigoso podendo ocasionar várias queimaduras em tecidos vivos. Este elemento foi descrito pela primeira em 1529 por Georgius Agrícola por seu uso como fundente, sendo usado para reduzir os pontos de fusão de metais e minerais. Posteriormente, Carl Wilhelm Scheele, Humphry Davy, Gay Lussac, Antoine Lavoisier e Louis Thenard realizaram experimentos com ácido derivado do flúor conhecido como ácido fluorídrico, alguns desses experimentos acabaram em tragédia. O elemento flúor foi descoberto em 1771 por Carl Wilhelm Scheele, entretanto, devido a sua elevada reatividade não conseguiram isolar esse composto. Porque quando isolado ele acabava reagindo com outras substâncias ao seu entorno. Só em 1886, que o elemento flúor foi isolado pelo francês Henri Moissan, com o interesse de uso em tecnologia nuclear. A primeira produção comercial do flúor foi para a construção da bomba atômica conhecida como projeto Manhattan, para ser obter o hexafluoreto de urânio, (UF₆), usado para a obtenção de isótopos de urânio. O flúor também já foi usado como raticida. Atualmente o flúor é utilizado para funções como o enriquecimento do urânio. E também para a produção de uma grande quantidade de medicamentos que utilizam átomos de flúor nas moléculas dos princípios ativos. O flúor também é utilizado para purificar água potável e em cremes dentais para diminuir a incidência de cáries; e ressaltando que não é o gás flúor que é adicionado na água ou em cremes dentais. Gases fluorados são utilizados em refrigeradores e ar condicionados; com o problema destes compostos terem uma grande participação como gás de efeito estufa, e na forma clorada abrindo buracos na camada de ozônio assim afetando a camada de ozônio. O ácido fluorídrico também pode ser utilizado na marcação e na aplicação na marcação de vidros e na indústria química na fabricação de polímeros como o famoso Teflon (politetrafluoretileno), polímero que contém flúor na produção de fungicidas e herbicidas e na produção de hexafluoreto de enxofre (SF₆), gás utilizado como meio isolante. Assim, essas informações podem ser utilizadas para a relação entre os conceitos de Química e o cotidiano do aluno, facilitando o aprendizado.

Palavras-Chaves: Ensino de Química; Elemento Químico; Flúor.

Categoria: Trabalho de Prática como Componente Curricular.

POTENCIAL ANTIOXIDANTE DA ESPÉCIE *Caryocar brasiliense*

Rafael Severino da Sila (IC)1*; Hellen Bertoletti Barbieri (IC)1; Hevelyn Savio Ferreira (PG)2; Karla da Silva Malaquias (PQ)3; Claudinei Alves da Silva (PQ)3; Liliane Nebo (PQ)3.

*rafaelseverinodasilva@outlook.com

1Universidade Federal de Jataí, UAE de Ciências Exatas/Química

2Universidade Federal de Jataí, Programa de Pós-Graduação em Ciências Aplicadas à Saúde

3Universidade Federal de Jataí, Programa de Pós-Graduação em Química

Desde os tempos primordiais, as plantas têm sido utilizadas com diversas finalidades. Atualmente, ainda é observado o uso de plantas, principalmente no ramo da medicina popular. O Brasil apresenta uma vasta diversidade de espécies botânicas vinda de seus biomas. O cerrado brasileiro por exemplo, apresenta uma grande variedade de espécies botânicas, devido aos seus fatores ambientais no qual fazem que esse bioma seja exclusivo do território brasileiro. Dentre as espécies botânicas do cerrado, encontra-se estudos relacionado ao pequi (*Caryocar brasiliense*) destacando-se as diversas atividades biológicas, como por exemplo antimicrobiana, anti-inflamatória, antiviral, dentre outras. Essas atividades ocorrem devido aos seus metabólitos secundários que podem ser observados em seus frutos, folhas, caule e casca. Contudo, às várias propriedades medicinais atribuídas a espécie *C. brasiliense* e a ampla utilização desta espécie na medicina popular, poucos trabalhos sobre suas composições químicas e princípios ativos são encontrados na literatura, mostrando assim, a importância do estudo fitoquímico desta espécie aliada às suas atividades biológicas. Desse modo, esse trabalho teve-se como enfoque a obtenção dos extratos e frações das folhas da *C. brasiliense*, quantificação de compostos fenólicos e flavonoides totais e avaliação do seu potencial antioxidante. Foram realizadas as coletas das folhas no campus da Universidade Federal de Jataí e utilizadas para o preparo do extrato etanólico que posteriormente foi fracionado através da extração líquido-líquido no qual foram obtidas as frações: hexânicas, acetato de etila e aquosa. Realizou-se a triagem fitoquímica que consistiu na análise cromatográfica via CCD e a identificação de classes de metabólitos secundários através de testes qualitativos. Para a determinação de flavonoides foram realizadas soluções com pH variando de 3-11, comparando a coloração das soluções, a fim de verificar a presença de diferentes classes de flavonoides. Através dos resultados foram observados a presença de Flavonas, Flavononois, Flavonois e Xantonas. Para a identificação de taninos e compostos fenólicos, utilizou-se solução de cloreto férrico (1%). A alteração na coloração para verde escuro indicou a presença de taninos e compostos fenólicos. Os testes qualitativos não indicaram a presença de saponinas. A partir da triagem fitoquímica, ampliou-se o estudo realizando testes de quantificação de fenóis e flavonoides totais. Foram observados que o extrato etanólico apresentou maior teor em fenólicos totais (132mg.g⁻¹ do extrato), enquanto para flavonoides foi observado a fração acetato (3,09mg.g⁻¹ do extrato). Os testes antioxidantes foram realizados pelo método DPPH. Os extratos exibiram um nível intermediário de atividade antioxidante quando correlacionado ao Ácido Ascórbico, no qual apresentou maior índices a concentração de 400µg.mL⁻¹.

Palavras-Chaves: Antioxidante; Atividade biológica; *Caryocar brasiliense*.

Categoria: Trabalho de Pesquisa.

POTENCIAL ANTIOXIDANTE DO EXTRATO HIDROALCÓLICO DE FOLHAS (FRESCAS E EM CÁPSULAS) E RAIZ DA *Moringa oleifera*

Natália Figueiredo Vieira (IC)^{1*}; Liliane Nebo (PQ)²; Claudinei Alves da Silva (PQ)²; Karla da Silva Malaquias(PQ)¹

*natalia.fvieira@hotmail.com

¹Universidade Federal de Jataí, UAE de Ciências Exatas/Química

²Universidade Federal de Jataí, Programa de Pós-Graduação em Química

A moringa (*Moringa oleifera*) é uma planta nativa da Índia que cresce nas regiões tropicais e subtropicais do mundo. Por conter alto valor nutricional devido à presença de vitaminas, minerais, aminoácidos e fitoterápicos essenciais nas folhas, é considerada a “árvore do milagre”. Cada parte da moringa: folhas, flores, seiva, casca, raízes, vagens e sementes, têm aplicação para uso industrial, comercial, nutricional e/ou medicinal. Este trabalho tem como objetivo apresentar o potencial antioxidante das folhas e raiz da espécie *Moringa oleifera*. O efeito foi comparado às folhas vendidas comercialmente na forma de cápsulas e ao composto majoritário isolado das raízes, a quercetina. As folhas da plantas foram coletadas, no campus Cidade Universitária da Regional Jataí/Universidade Federal de Goiás, na cidade de Jataí/Goiás. As raízes, de mudas doadas pela Secretaria Municipal do Meio Ambiente da cidade de Jataí-GO. Foram realizados 4 tratamentos, os três primeiros obtidos por extração hidroalcólica: T1 - folhas em cápsulas; T2 - folhas frescas; T3 –raízes; T4 –quercetina (Padrão Sigma Aldrich®). Estes foram submetidos ao ensaio antioxidante pelo método de captura de radical livre DPPH (2,2- difenil-1-picril-hidrazil). A avaliação da atividade antioxidante foi realizada em comparação com a molécula de referência BHT (hidroxitolueno de butila) e o AA (ácido ascórbico), Figura 1.

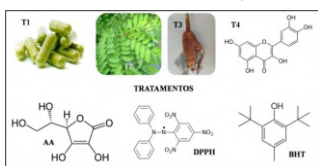


Figura 1. Tratamentos no ensaio antioxidante com DPPH. T1 - folhas em cápsulas; T2 - folhas frescas; T3 –raízes; T4 –quercetina. Moléculas de referência BHT (hidroxitolueno de butila)

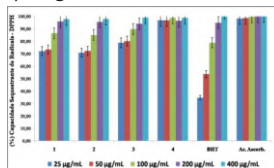


Figura 2. Atividade antioxidante para T1: cápsulas de folhas; T2: folhas; T3: raiz; T4: quercetina; BHT e AA.

As concentrações estudadas foram: 25, 50, 100, 200 e 400 µg/mL para todos os tratamentos, em triplicatas. Após 30 min de reação, no escuro, procedeu-se a leitura no UV-Vis em $\lambda = 517$ nm. Os resultados são apresentados na Figura 2. Não houve diferença estatística entre os extratos de folhas frescas e de folhas em cápsulas. Mostrando que a atividade antioxidante não é reduzida no processo industrial. As raízes mostraram maior efeito antioxidante, se comparado com as folhas, o que pode estar relacionado à alta concentração de quercetina presente nestas. Os extratos das folhas e raízes de *Moringa oleifera* são ricos em flavonóides e compostos fenólicos. Em comparação às moléculas de referências, estes apresentaram atividade antioxidante significativa, comprovando o uso terapêutico da moringa, e evidenciam o potencial desta planta em aplicações na indústria de alimentos e farmacêutica.

Palavras-Chaves: *Moringa oleifera* ; Atividade antioxidante; DPPH.

Categoria: Trabalho de Pesquisa.

PREPARO DE BLENDA DE POLIESTIRENO/POLI(3-METILTIOFENO) DOPADOS COM GRAFENO PARA APLICAÇÕES NA ENGENHARIA TECIDUAL

Rayssa de Souza Lopes(PQ)^{1*}; Tatiane Moraes Arantes(PQ)²; Fernando Henrique Cristovan(PQ)²
*rayssasouza.net@gmail.com

¹Universidade Federal de Jataí, UAE de Ciências Exatas/Química
²Universidade Federal de Jataí, Programa de Pós-Graduação em Química

Os polímeros intrinsecamente condutores (PIC) vêm sendo estudados tanto pela sua importância científica como pelo seu potencial em diferentes aplicações tecnológicas. Dentre os polímeros condutores uma classe que se destaca é a dos politiofenos que apresentam alta absorção de luz na região do ultravioleta-visível, alta cristalinidade e estabilidade. Apresentando aplicações tecnológicas como para a construção de dispositivos optoeletrônicos como diodos emissores de luz, capacitores, baterias recarregáveis, sensores e também para aplicações biológicas como biossensores e scaffolds para engenharia tecidual. No entanto, o politiofeno apresenta baixa processabilidade e insolubilidade em solventes orgânicos. Uma alternativa para solucionar este problema é a síntese de derivados de tiofenos como a inserção do grupo metila, produzindo-se assim o poli(3-metiltiofeno). Para melhorar as propriedades mecânicas uma alternativa é a produção de uma blenda do polímero condutor com um polímero termoplástico, como por exemplo, o poliestireno (PS). Possibilitando combinar as propriedades mecânicas dos polímeros isolantes com as propriedades elétricas dos polímeros condutores. Outro material inovador que vem sendo utilizado para este fim é o grafeno, que além de promover melhorias mecânica também é condutor. O grafeno é constituído por um arranjo bidimensional de uma única camada de átomos de carbono com hibridização sp², devido a ligação deslocalizada o grafeno apresenta alta condutividade elétrica. Desta forma, neste trabalho pretende-se realizar estudos da síntese de poli(3-metiltiofeno) in situ na presença de PS e grafeno e obter scaffolds para a aplicação na engenharia tecidual. Com isso espera-se que o material obtido apresente biocompatibilidade, biodegradabilidade e boas propriedades mecânicas, mantendo as propriedades óticas e de condutividade do polímero condutor.

Palavras-Chaves: Polímeros condutores; Politiofenos; Grafeno; Blendas; Engenharia tecidual.

Agradecimentos: CAPES.

Categoria: Trabalho de aluno de pós-graduação PPGQ-UFJ.

PREPARO DE HIDROGEIS NANOCOMPÓSITOS DE POLI(2 - HIDRÓXIETIL METACRILATO) COM NANOCELULOSE E BIXINA PARA SEREM UTILIZADOS COMO BIOMATERIAIS

Géssica C. S. Costa (PG)1*; Thaís M. Arantes (PQ)2; Tatiane M. Arantes (PQ)3

*gcgessicacosta@gmail.com

1Universidade Federal de Jataí, UAE de Ciências Exatas/Química

2Instituto Federal Goiano – *Campus* Iporá

3Universidade Federal de Jataí, Programa de Pós-Graduação em Química

Os hidrogéis são formados por estruturas poliméricas tridimensionais, constituídas por macromoléculas, interligadas pela interação física e por meio de ligação covalente, possuindo assim capacidade hidrofílica. Os hidrogéis são porosos, permeáveis e maleáveis, o que viabiliza o fluxo de fluidos dentro da estrutura, podendo ser moldadas em vários formatos diferentes, permitindo assim a incorporação e liberação de medicamentos de diferentes polaridades, em diversos tipos de tecidos humano. Sendo assim, os hidrogéis podem ser utilizados em diversos setores da biomedicina, bem como na produção de diversos materiais, devido ao baixo custo e sua versatilidade. Além disso, pode-se adicionar nas estruturas dos hidrogéis, substâncias que apresentam propriedades terapêuticas como a bixina. A bixina é um carotenoide extraído das sementes de *Bixina orellana* L. popularmente conhecida com urucum. A bixina possui propriedades antioxidantes, anti-hemorrágicas, cicatrizantes, antitérmicas, anti-inflamatórias, afrodisíacas e ação reguladora nos metabolismos da glicose e dos lipídeos, entre outras. Por outro lado, os hidrogéis possuem baixa resistência mecânica e com a inserção de nanopartículas no formato de fibras como as nanoceluloses, pode-se melhorar tanto a resistência mecânica quanto a biocompatibilidade destes hidrogéis. Neste contexto o presente trabalho tem como objetivo preparar um nanocompósito de PHEMA/nanocelulose/ bixina para a formação de hidrógeis do tipo rede polimérica interpenetrante, que possa ser utilizado como biomateriais. O objetivo do trabalho é o desenvolvimento de um hidrogel partindo do poli(2-hidróxietyl metacrilato) - PHEMA incorporado de nanocelulose e bixina para produzir um nanocompósito com maior estabilidade, baixa toxicidade e biocompatibilidade na regeneração tecidual. Além dos vários benefícios dos hidrogéis na regeneração celular a bixina também possui várias propriedades terapêuticas. A associação do hidrogel e da bixina pode resultar em um medicamento de baixo custo e com potencial de regeneração tecidual, com grande potencial curativo. Os nanocompósitos são utilizados pela biomedicina para produção de materiais e na fabricação de fármacos com liberação controlada, minimizando assim o uso de altas dosagens de medicamento, pois atuam com especificidades.

Palavras-Chaves: Hidrogéis; Nanoceluloses; Bixina; Nanocompósitos; Biomateriais.

Agradecimentos: Ao PPGQ – UFJ e ao IF GOIANO-*Campus* Iporá.

Categoria: Trabalho de aluno de pós-graduação PPGQ-UFJ.

SINTESE DE COMPLEXOS DE CURCUMINA COM ZINCO E MANGANÊS

Maria Antônia Rodrigues (IC)^{1*}; Tatiane M. Arantes (PQ)²; Fernando H. Cristovan (PQ)²

*mari-antonia@outlook.com

¹Universidade Federal de Jataí, UAE de Ciências Exatas/Química

²Universidade Federal de Jataí, Programa de Pós-Graduação em Química

Além de ser biologicamente ativa, a curcumina é uma molécula fluorescente que emite na região do visível do espectro. Devido ao bom rendimento quântico de fluorescência a curcumina pode ser utilizada como marcador fluorescente, além de ser uma droga em potencial para vários tipos de enfermidades, tais como: mal de Alzheimer, feridas, diabetes, artrite, reumatismo, psoríase, alguns cânceres. As propriedades fluorescentes da curcumina permitem estudar sua distribuição em células e tecidos. Além disso, o uso de corantes fluorescentes como quantum dots para o bioimageamento são limitados, devido a sua toxicidade. Portanto, estudos das propriedades ópticas da curcumina e seus complexos são de grande utilidade para as suas aplicações como um marcador fluorescente biocompatível. Desta forma, neste estudo é apresentado a síntese e a caracterização de um derivado de curcumina, a diacetilcurcumina, e quatro complexos de curcumina com Zn e Mn e de diacetilcurcumina com Zn e Mn. A diacetilcurcumina foi sintetizada através de uma reação de condensação da curcumina com anidrido acético utilizando a piridina como catalisador e solvente, a reação foi feita em 25 °C e em atmosfera de N₂. O complexo de curcumina e zinco (Zn(Cur)) foi sintetizado em um balão de fundo redondo de duas vias. A curcumina e o etanol foram adicionados ao balão. Após a completa solubilização da curcumina foi adicionado ao sistema o acetato de zinco previamente dissolvido em etanol. Então, o sistema foi refluxado por 3 horas. Após este período, o sólido formado foi filtrado e lavado com etanol e água. Os demais complexos foram sintetizados de maneira similar. Os materiais foram caracterizados por espectroscopia de infravermelho com transformada de Fourier (FTIR) e UV-Vis. O complexo Zn(Cur) apresentou coloração vermelha, o Zn(DiaCur) coloração amarela, já os complexos preparados com Mn apresentaram coloração amarela para o complexo Mn(Cur) e marrom avermelhado para o Mn(DiaCur). O complexo Zn(Cur) apresentou a banda característica de -CH₂CH₃ proveniente do grupo acetato, esta mesma banda não é observada com tanta intensidade no espectro de FTIR do complexo de Zn(DiaCur), sendo que neste complexo duas moléculas de diacetilcurcumina se ligam diretamente ao metal. Os materiais foram solúveis em vários tipos de solventes orgânicos com diferentes polaridades. O espectro de UV-Vis do Zn(Cur) apresentou o máximo de absorção em ~419 nm, valor semelhante ao da curcumina livre. O Zn(DiaCur) apresentou deslocamento para hipocrômico de 10 nm (409 nm). Os complexos preparados com Mn apresentam comportamentos semelhantes. Por fim, os complexos metálicos de curcumina foram sintetizados com sucesso, apresentando alto rendimento de síntese em 80 % e estabilidade ao ambiente.

Palavras-Chaves: Polarímetro; Ensino de química; Rotação óptica.

Categoria: Trabalho de Pesquisa .

SÍNTESE E CARACTERIZAÇÃO DE FOTOCATALISADORES DE TIO₂ SUPTADO EM ARGILA PARA FOTODEGRADAÇÃO DO CORANTE AZUL DE METILENO

Pérides J. H. da C. Lemos(IC)^{1*}; Alexia C. Feliciano(IC)¹; Andressa C. de A. Nascimento(IC)¹; Tatiana Batista(PQ)²; Douglas S. Machado(PQ)²

*periclesjk@gmail.com

¹Universidade Federal de Jataí, UAE de Ciências Exatas/Química

²Universidade Federal de Jataí, Programa de Pós-Graduação em Química

Com o desenvolvimento de novas técnicas, a preocupação com o descarte de rejeitos industriais e agrícolas tem aumentado, levando pesquisadores buscarem métodos eficazes de solucionar problemas causados pelos mesmos¹. Técnicas como a fotocatalise heterogênea, onde um catalizador gera um radical para mineralizar contaminantes, tem sido amplamente estudada, devido sua eficácia e baixo custo. Uma maneira de melhorar o desempenho, é o uso de argilominerais como suporte óxidos semicondutores, visto que argilas tem a propriedades adsorptivas e podem elevar as propriedades físico-químicas dos catalisadores utilizados². O objetivo deste trabalho foi sintetizar um novo catalizador com melhor desempenho que o óxido puro. A síntese com base em Cervantes (Cervantes et.al. 2009) modificada, na qual procurou-se incorporar na estrutura lamelar da argila, um óxido semicondutor por meio de mistura em suspensão do óxido em proporção 1:20 em massa em relação a argila e calcinação a 600°C. O material foi caracterizado por fluorescência de Raio X e espectrometria de infravermelho. O material foi testado para degradação via luz solar de um corante orgânico (azul de metileno), submetendo-se em uma mistura de corante na concentração 3,0x10⁻⁵ mol.L⁻¹ com 0,1g de fotocatalisador a luz ambiente (solar). Foi comparada a velocidade entre o material preparado e o óxido metálico puro, acompanhando a degradação através da espectroscopia de UV-Visível. O material mostrou-se promissor diante da fotocatalise, com resultados melhores que o óxido puro, observando uma considerável diminuição da concentração de corante na solução.

Palavras-Chaves: Fotocatalisador; Argila; Óxidos; semicondutores; Fotodegradação

Categoria: Trabalho de Pesquisa.

SÍNTESE E CARACTERIZAÇÃO DE POLIANILINA EM MEIO DE NANOPARTÍCULAS

Júlio Goulart dos Santos (PG)1*; Douglas Silva Machado (PQ)2

*machadodouglas@yahoo.com.br

1Universidade Federal do Mato Grosso/PPG em Física da Matéria Condensada

2Universidade Federal de Jataí, Programa de Pós-Graduação em Química

Polímeros são macromoléculas compostas por um segmento de monômeros, que são estruturas que se repetem na cadeia. Dentre os polímeros existe um grupo em especial que é denominado polímeros condutores, que possuem propriedades elétricas que permitem o transporte de elétrons através de cargas adicionadas ou através de sua cadeia, os polímeros condutores intrínsecos. Dentre os polímeros com essa característica a polianilina se destaca nesse grupo. Polianilina (PAni) é um polímero condutor com síntese relativamente simples, podendo ser tanto química (obtendo o material em forma de pó) quanto eletroquímica (filmes finos). Ferritas são materiais nanoestruturados que possuem propriedades magnéticas, sendo materiais cerâmicos obtidos a partir da mistura de óxido de ferro com outros óxidos ou carbonatos na forma de pó. Compósitos são materiais multifásicos composto por uma fase matriz e uma fase dispersa, esses materiais são encontrados na natureza e obtidos sinteticamente. Nesse trabalho foram sintetizados via química in situ e caracterizados o compósitos de PAni (fase matriz) e ferrita (fase dispersa). A síntese foi realizada sob forte agitação na presença de anilina, ferrita e HCl, utilizando-se persulfato de amônio como iniciador na razão molar de monômero:ácido:iniciador de 1:10:1. Após 1:30 h obteve-se o precipitado usual de polianilina. A caracterização do material foi executada por Fluorescência de Raios – X, Difração de Raios – X e Espectroscopia de Infravermelho. As análises de fluorescência de Raios – X mostraram que as ferritas foram incorporadas no polímero e não sofreram degradação. A difração de Raios – X apresentou difratogramas típicos de PAni, evidenciando o aspecto amorfo do polímero. As análises de infravermelho são características de PAni no estado sal esmeraldina, com dopagem por cloreto. Não foi observada influência das nanopartículas nos espectros de infravermelho, evidenciando que a presença destas não degrada o polímero. O compósito PAni/Ferritas mostra uma promissora proposta de aplicação como sensores e em fotocatalise.

Palavras-Chaves: Polianilina; Ferrita; Nanopartícula; Compósito.

Agradecimentos: Central Analítica - UFJ e Instituto de Física - UFMT.

Categoria: Trabalho de Pesquisa.

SÍNTESE E CARACTERIZAÇÃO DO POLI(9,9-DIHEXILFLUORENO-CO-TIOFENO)

Arthur Santos Espíndola (IC)1*; Fernando Henrique Cristovan (PQ)2
*arthurasantos1580@gmail.com

1Universidade Federal de Jataí, UAE de Ciências Exatas/Química

2Universidade Federal de Jataí, Programa de Pós-Graduação em Química

Com o intuito de diminuir o band gap de materiais que são utilizados na construção de dispositivos optoeletrônicos, novos copolímeros têm sido sintetizados, sendo a família dos polifluorenos uma alternativa viável [1]. A rota sintética mais utilizada na produção de polifluoreno é a de Suzuki-Miyaura, na qual ocorre a reação entre o ácido fenilborônico e um haleto de arila na presença de catalisador de paládio ($\text{Pd}(\text{PPh}_3)_4$) e uma base fraca (K_2CO_3) [2]. Entretanto, a otimização das propriedades optoeletrônicas dos polifluorenos é possível através da adição de outro monômero na cadeia principal, por exemplo o tiofeno. O tiofeno é um monômero aromático composto por um anel de cinco átomos, sendo quatro de carbono e um de enxofre. O átomo de enxofre induz uma maior planaridade da cadeia polimérica devido ao acúmulo de carga sobre este átomo. A planaridade da cadeia favorece o aumento da cristalinidade dos filmes formados com estes e consequentemente uma maior eficiência do transporte elétrico. Desta forma o objetivo deste estudo foi a síntese do poli(9,9-dihexilfluoreno-co-tiofeno) pela rota de Suzuki e sua caracterização estrutural e ótica antes e depois da sua dopagem com o 7,7,8,8-Tetracianoquinodimetano (TCNQ). O poli(9,9-dihexilfluoreno-co-tiofeno) foi sintetizado a partir da mistura de 0,58 g do ácido 2,7-diborônico-9,9-dihexilfluoreno com 0,15 mL do 2,4-dibromotiofeno. Estes monômeros foram colocados em um balão de fundo redondo de duas vias, em seguida foi adicionado 2,1 g de K_2CO_3 e 10 mL de H_2O e 50 mL de tolueno. Esta solução foi desaerada por 30 min com N_2 . Em seguida foi adicionado o catalizador tetrakis(trifenilfosfina)paládio (0) e 3 gotas de Aliquat. A mistura reacional foi mantida em refluxo por 72 h em atmosfera de N_2 . O polímero formado foi purificado por Soxhlet. O polímero foi caracterizado por espectroscopia de FT-IR e UV-Vis. O rendimento da síntese do poli(9,9-dihexilfluoreno-co-tiofeno) foi de aproximadamente 70%. O espectro de FT-IR apresentou as bandas características dos monômero dihexilfluoreno, como a banda em aproximadamente 2900 cm^{-1} proveniente de carbonos alifáticos sp^3 , também foi observado uma banda em torno de 650 cm^{-1} proveniente do enxofre do monômero tiofeno. Foi realizado o teste de solubilidade do polímero, este apresentou alta solubilidade em solventes de baixa polaridade como os organoclorados (clorofórmio e diclorometano). Os espectros de UV-Vis em solução de clorofórmio mostraram uma banda de absorção em aproximadamente em 430 nm proveniente da transição p-p^* do anel do fluoreno. No entanto, quando o polímero foi dopado com 1% (m/m) de TCNQ houve um deslocamento hipsocrômico para 405 nm, devido possivelmente a formação de um complexo de transferência de energia. Finalmente, estão sendo feitos os estudos óticos em estado sólido para se observar o comportamento do sistema polímero/dopante.

Palavras-Chaves: Polímeros condutores; Polifluorenos; Caracterização ótica.

Categoria: Trabalho de Pesquisa.

UMA PROPOSTA PARA O ENSINO DE QUÍMICA EM UMA PERSPECTIVA EM CIÊNCIAS, TECNOLOGIA, SOCIEDADE E AMBIENTE TENDO COMO TEMA GERADOR UMA USINA DE PRODUÇÃO DE ETANOL

Anderson Rosendo Santos (IC)^{1*}; Gildberto Mendonça de Oliveira (PQ)²

***anderson_rosendo@hotmail.com**

¹Universidade Federal de Jataí, UAE de Ciências Exatas/Química

²Universidade Federal de Jataí, Programa de Pós-Graduação em Química

O baixo interesse dos alunos e também falta de metodologias pedagógicas aplicadas ao ensino de química tem levado a resultados insatisfatórios e precisam melhorar. Este trabalho tem por objetivo utilizar uma metodologia de ensino de química com abordagem CTSA com o tema gerador uma indústria sucroalcooleira. Este projeto será aplicado em aulas no ensino médio para turmas no EJA noturno. É importante que os alunos tenham uma alfabetização científica suficiente para entender as questões mais atuais e importantes em sua sociedade e na tomada de decisões. Será desenvolvida uma sequência didática onde será relacionada todas as etapas de produção da indústria sucroalcooleira com processos físicos e químicos para serem abordados em sala de aula. Espera-se que essa abordagem ajude aos estudantes assimilarem os conceitos de química discutidos em sala de aula. Serão discutidos a temática indústria de produção de etanol, sua representatividade no município e importância ambiental. Sabendo que a cultura da cana de açúcar já faz parte do cotidiano da cidade e possui muita representatividade econômica na região sudoeste goiano faz desse tema interessante para os alunos. É esperado para esta proposta deixe os alunos mais receptivos ao aprendizado e que ele assimilem os conceitos de química discutidos em sala de aula. Bem como se espera que estes alunos passem a entender o quanto a química está presente na vida cotidiana de sua sociedade como neste caso num processo de produção de etanol.

Palavras-Chaves: CTSA; Tema gerador; indústria; Sucroalcooleira.

Agradecimentos: Quero agradecer o meu professor orientador Gildberto Mendonça de Oliveira, pelo empenho dedicado em me ajudar em meu projeto de trabalho de conclusão do curso.

Categoria: Trabalho de Prática como Componente Curricular.

USO DA ESPECTROMETRIA DE MASSAS PARA ESTUDO DO EFEITO DIRIGENTE DO SUBSTITUINTE NA NITRAÇÃO DO TOLUENO, UMA PROPOSTA DE ROTEIRO EXPERIMENTAL

Júlio César J. Barbosa (IC)^{1*}; Karla da Silva Malaquias (PQ)¹
*juliocesar_jeronimo@hotmail.com

¹Universidade Federal de Jataí, UAE de Ciências Exatas/Química

As reações de substituição eletrofílica aromática (SEAr) são aplicadas para obtenção de uma classe de grande estudo dentro da química. A nitração aromática é uma das reações mais comuns nos cursos de graduação em química e de áreas afins. A nitração, que consiste na adição de um eletrófilo ao anel aromático, retira densidade eletrônica do sistema p conjugado, dificultando novas nitrações. A reação é irreversível e seus produtos são facilmente separados e, como não há isomerização, é possível identificar as proporções entre os isômeros orto, meta e para formados, pela técnica da cromatografia gasosa aliada espectrometria de massas (CG-EM). Objetivos: O presente trabalho visou a aplicação da CG-EM para estudo experimental do efeito dirigente da reação de nitração do tolueno, propondo um roteiro experimental que pode ser usado nas aulas de orgânica experimental de cursos de graduação em Química. Procedimento Experimental: A reação eletrofílica de nitração do tolueno foi realizada em um sistema de refluxo durante 60 minutos em banho de óleo à 60 °C, contendo: 0,188 mol de tolueno; 0,469 mol de ácido sulfúrico e 0,527 mol de ácido nítrico. Em seguida, neutralizou-se o produto com água destilada e realizou a extração líquido-líquido do mesmo com solução 10% NaOH. Ao fim da separação, realizou-se a separação e caracterização dos produtos isoméricos via (CG-EM). As condições cromatográficas foram: Injeção = 250°C; Tinicial = 100°C; Tfinal = 250°C com taxa de 15°C/min. Resultados e Discussão: Através das áreas dos sinais analíticos presentes no cromatograma de íons totais (TIC), foi possível observar a influência do grupo metila na nitração, Fig 1A. Os resultados experimentais, evidenciam a menor energia no estado de transição para a substituição na posição meta Fig 1B. Como a nitração destaca-se entre as reações SEAr, o experimento proposto poderá ser utilizado como modelo para as demais reações deste grupo, onde poderá ser abordado: 1) Cinética; 2) Termodinâmica; 3) Regioseletividade; 4) Interações químicas; 5) Método de separação de isômeros e 4) Identificação de isômeros por meio da interpretação dos espectros de massas.

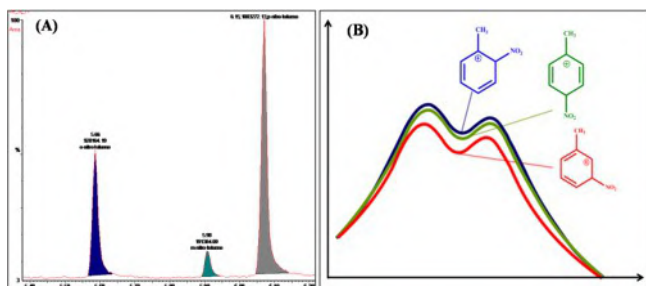


Figura 1. (A) TIC do meio reacional da nitração do tolueno, indicando os três isômeros formados. (B) Diagrama de energia livre para os isômeros o, m e p-nitrotolueno.

Palavras-Chaves:
reações de substituição eletrofílica aromática; Efeito dirigente; CG-EM.

Categoria: Trabalho de Pesquisa.

USO DO SPME/GC-MSPARA A CARACTERIZAÇÃO DOS VOLÁTEIS FLORAIS DE GABIROBA (*Campomanesia pubescens*)

Maria Cecília Lopes Sierra e Silva(IC)1*; Edésio Fialho dos Reis(PQ)1; Liliane Nebo (PQ)2;Karla S. Malaquias (PQ)3

*maricecilopes@hotmail.com

1Universidade Federal de Jataí, UAE Ciências Biológicas/Biologia

2Universidade Federal de Jataí, Programa de Pós-Graduação em Química

3Universidade Federal de Jataí, UAE de Ciências Exatas/Química

O gênero *Campomanesia* (*Myrtaceae*), compreende 24 espécies que ocorrem em regiões do Cerrado brasileiro. *Campomanesia pubescens* também conhecida como guavirova ou gabiroba é considerada uma planta medicinal por possuir propriedades farmacológicas e nutricionais relacionadas. Os frutos são ricos em vitamina C e fundamentais para o funcionamento do ecossistema onde estão inseridos, pois fornecem alimento e outros recursos essenciais para uma gama de espécies. O gênero *Campomanesia* é um representante da flora do Cerrado que está sofrendo impacto ambiental causado por mudança no uso da terra, uso indiscriminado de defensivos fitossanitários e alterações climáticas, correndo risco de extinção. Desta forma, o estudo dos voláteis envolvidos na polinização é de grande importância. A análise química de matrizes na forma bruta é um fator limitante em decorrência de interferências que podem ser incompatíveis com os equipamentos analíticos. Uma alternativa viável para contornar tal problema é o emprego de procedimentos de preparo da amostra, com os quais procura-se isolar e concentrar os analitos de interesse. Uma alternativa para metodologias de preparo de amostras é a microextração em fase sólida (SPME do inglês, Solid Phase Microextraction), que acoplada à cromatografia gasosa com espectrometria de massas (CG-MS) permite a separação e caracterização dos analitos voláteis. Este trabalho visou avaliar o perfil químicos dos voláteis florais de *Campomanesia pubescens*. A extração foi realizada por meio da exposição das flores, por 30 min em vial fechado, à fibras com diferentes fases estacionárias: polydimethylsiloxane layer (PDMS, 100 mm); divinylbenzene-carboxen-polydimethylsiloxane (DVB/CAR/PDMS, 50/30mm); carboxen-polydimethylsiloxane (CAR/PDMS, 75 mm); carbowax-divinylbenzene (CW/DVB, 65mm). As análises quali e quantitativas foram realizadas por cromatografia gasosa aliada a espectrometria de massas com aparelho Perkin Elmer® SQ8, nas seguintes condições: Injeção = 250°C; Tinicial = 60°C; Tfinal = 260°C com taxa de 5°C/min, totalizando 40 min. Além da comparação com os espectros de massa da biblioteca NIST®, para todos compostos foi calculado o índice de Kovats. Os resultados indicam a presença de α-terpineno, α-pineno, limoneno, pinocarveol e mirtenol. Estes últimos, segundo a literatura, apresentam a capacidade de agir em receptores do neurotransmissor GABA de forma similar a anestésicos. As análises dos compostos minoritários estão em fase final de tratamento dos dados.

Palavras-Chaves: Fotocatalisador; Argila; Óxidos semicondutores; Fotodegradação.

Categoria: Trabalho de Pesquisa.

UTILIZAÇÃO DE TICs COMO UMA FERRAMENTA DE ENSINO E APRENDIZAGEM DO CONTEÚDO DE GEOMETRIA MOLECULAR

Aline Borges de Andrade (IC)^{1*}; Tatiane Moraes Arantes (PQ)²

*alineborges41@hotmail.com.br

¹Universidade Federal de Jataí, UAE de Ciências Exatas/Química

²Universidade Federal de Jataí, Programa de Pós-Graduação em Química

O assunto de ligações químicas é de fundamental importância no ensino de química, pois esse conteúdo é a base de todos os outros conteúdos na química, tais como estrutura de Lewis, geometria molecular, moléculas, reações químicas, entre outros. Esse Projeto de pesquisa tem por objetivo principal verificar se o software Geometria Molecular e GIFs (Graphics Interchange Format) podem auxiliar na aprendizagem do conteúdo Ligações Químicas e Geometria Molecular de estudantes dos cursos de graduação em química, da Regional Jataí da Universidade Federal de Goiás. Com a utilização do software Geometria Molecular de ligação covalente em Química – Desenvolvido por Élisson M.F.M. Araújo (UENF/CAPES), o aluno consegue observar alguns parâmetros, que são: a hibridização do átomo central, a regra do octeto e sua estabilidade, a ligações formadas entre átomos, as nuvens eletrônicas presentes no átomo central, além do próprio nome da geometria representada, e os GIFs foram criados utilizando imagens localizadas na internet de acordo com cada geometria molecular. A estratégia didática foi pensada da seguinte forma: apresentação do conteúdo de ligações químicas para os estudantes, mostrando todas as regras presentes e seus conceitos mais importantes para se fazer a ligação. Após, foram mostrados alguns conceitos que ajudam no entendimento do conteúdo de estrutura de Lewis e geometria molecular e apresentado o Geometria Molecular aos estudantes para que esses pudessem visualizar, durante o processo de explicação do conteúdo, o que estava transposto no livro. A estratégia didática foi aplicada a estudantes do primeiro e terceiro período dos cursos de Química da Universidade Federal de Goiás – Regional Jataí. Um questionário contendo questões discursivas a respeito do conteúdo proposto foi respondido pelos estudantes ao final das aulas para que se fizesse a análise da aprendizagem do conteúdo. O questionário foi analisado qualitativamente e os resultados apresentados posteriormente.

Palavras-Chaves: TICs; Geometria Molecular; Software; Gifts.

Categoria: Trabalho de Prática como Componente Curricular.

REALIZAÇÃO



APOIO





UNIVERSIDADE FEDERAL DE JATAÍ
Tutora UNIVERSIDADE FEDERAL DE GOIÁS
Cursos de Bacharelado e Licenciatura em Química
Câmpus Cidade Universitária
BR 364, km 195, nº 3800
CEP 75801-615