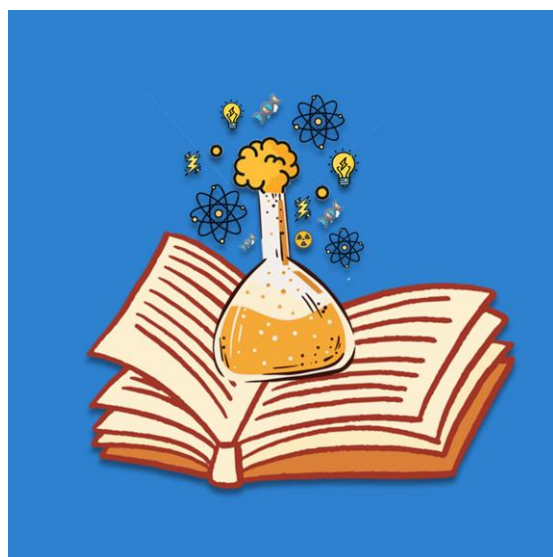


Universidade Federal de Goiás

XVII SEMANA DA QUÍMICA IV WORKSHOP DA PÓS GRADUAÇÃO



Livro de resumos

2023

PPGQ
PROGRAMA DE
PÓS-GRADUAÇÃO EM
QUÍMICA

IQ
INSTITUTO DE
QUÍMICA



[CA]
Qui



SEMANA DA QUÍMICA 2023

19 A 22 DE JUNHO

IQ
INSTITUTO DE QUÍMICA



UFG
UNIVERSIDADE FEDERAL DE GOIÁS



**XVII SEMANA DA QUÍMICA
IV WORKSHOP DA PÓS GRADUAÇÃO**

Organização:

Universidade Federal de Goiás

Instituto de Química

19 a 22 de junho de 2023

Membros da comissão:

Prof. Dr. Heibbe Cristhian Benedito De Oliveira, Prof. Dr. Freddy Fernandes Guimaraes, Profa. Dra. Sumbal Saba, Prof. Dr. Martin Schwellberger Barbosa

Discentes:

Almir Custodio Batista Junior, Bárbara Júlia Gonçalves Dutra, Juliane Arantes Granja, Lurian Caetano David, Jamile Caroline Belo Da Silva, Allyster Rodrigues Silva, Yuri Arrates Rocha, Mauricio Matheus Lucio Pereira, Lauanne Rocha Silva, Pedro Paulo Evangelista De Campos.

Realizadores:

Programa de Pós-Graduação em Química (PPGQ-UFG)

Centro acadêmico da Química (Caqui)

Conselho Regional de Química 12ª região (CRQ-12)



SEMANA DA QUÍMICA 2023

19 A 22 DE JUNHO

IQ
INSTITUTO DE QUÍMICA

UFG
UNIVERSIDADE FEDERAL DE GOIÁS



XVII SEMANA DA QUÍMICA
IV WORKSHOP DA PÓS GRADUAÇÃO

Apresentações em formato de pôster (21/06/2023 das 16h às 18h):

POSIÇÃO DO POSTÊR	CÓDIGO DO TRABALHO	AUTOR	TÍTULO DO TRABALHO
1	6769831	Aline Moreira Aguiar	Prospecção De Compostos Aromáticos Em Couroupita Guianensis Por Hs-Gc/Ms Para Aplicação Na Indústria De Cosméticos
2	1976861	Ana Carolina Felisberto Araujo	Desenvolvimento De Uma Metodologia De Otimização De Funcionais Rsh Fisicamente Inspirada No Princípio Da Mínima Polarizabilidade Em Polímeros Orgânicos
3	8747101	Ana Luíza Do Prado Lima	O Impacto Da Violência Simbólica De Gênero Na Carreira De Professoras De Química Em Uma Instituição Pública Federal De Nível Superior Brasileira
4	3218603	Ana Luiza Reis Rodrigues Da Cunha	Cerúmen Em Estudos Volatolômicos: Potenciais E Limitações
5	8586297	Barbara Julia Goncalves Dutra	Automatizando Cálculos De Estrutura: Desenvolvimento De Um Software Robótico
6	7376559	Blendo Almeida Da Silva	Co ₂ : Capture And Fixation To Epoxides By Supported Ionic Liquids
7	2285014	Carlos Daniel Pereira Freitas	Caracterização Funcional E Estrutural Do Peptídeo Mastoparano-R1
8	9837979	Christian Dias Gomides	Determinação Metabólica Do Gérmen De Milho Cru E Fermentado, Por Rmn Quantitativa
9	7508149	Danielly S. Rocha	Digital Microfluidics As Lab-On-A-Chip: From Sample Preparation To Colorimetric Sensing Of S-Nitrosocysteine
10	7280252	Emily Teles Silva	Complexos RuCl ₂ (P-Cimeno)-Aminas Como Catalisadores Bifuncionais Para A Fixação Química De Co ₂ Com Epóxidos
11	1434878	Hellen Inácia Dos Santos	Análise De "Boa Noite Cinderela" Usando Microsistemas Eletroforéticos
12	7886450	Ícaro Do Nascimento Camelo	Aplicação Do Modelo Classificatório De Linear Discriminant Analysis Na Investigação De Similaridades E Dissimilaridades Do Perfil Químico Do Cerúmen Entre Animais Domésticos E Selvagens.



SEMANA DA QUÍMICA 2023

19 A 22 DE JUNHO

IQ
INSTITUTO DE QUÍMICA

UFG
UNIVERSIDADE FEDERAL DE GOIÁS



XVII SEMANA DA QUÍMICA
IV WORKSHOP DA PÓS GRADUAÇÃO

13	1870099	Isabela Burzetto Borghi	Estrutura Tridimensional Do Peptídeo Antimicrobiano Hp-Map3 Derivado Da Temporina-Pta
14	1609402	Isis Juliane Arantes Granja	Selenilação De Cromonas Através De Ácido Tricloroisocianúrico (Tcca) Sob Condições Verde
15	9110390	Jackeline De Alcântara Moreira Da Mota	Produção De Lubrificantes A Partir Do Craqueamento Termocatalítico De Sacolas Plásticas
16	5778435	Jackson Junior Santos De Souza	Oxidação Catalítica Da Hidroquinona Por Um Complexo Metalaciclofano De Cobre(Ii) Irradiado
17	9212468	Jhefferson Dos Santos Guilhermi	Selenilação Direta Da Ligação C(Sp ²)-H De Imidazo[2,1-B]Tiazol Na Presença De Peróxido De Hidrogênio De Uréia (Uhp) E Lactato De Etila
18	9369837	Jhonny Willians De Oliveiramaciél	Polímero De Coordenação De Érbio (Iii) Baseado Em Um Ligante Oxamato: Propriedades Magnéticas
19	8834415	João Paulo Miranda Nascimento	Inserção De Dióxido De Carbono Em Epiclorigrina
20	2010989	João Vitor Fernandes Paiva	Disposable Gold-Modified Electrochemical Sensors For Quantification Of Nitrite And Nitrate In Drinking Water
21	6104506	João Vitor Souza De Oliveira	Peróxido De Hidrogênio De Uréia (Uhp) E Lactato De Etila Como Sistema Mais Verde Na Selenilação De Imidazo-Heteroarenos
22	3199093	Jonas Xavier Torres	Fixação De Co ₂ Em Epiclorigrina Para Produção De Carbonatos Cíclicos
23	6951160	José Sebastião Dos Santos Neto	Estudos Reacionais Para A Síntese Branda De Cetoimidazóis
24	4687142	Juliana Bueno Barra	Estruturas De Cramps E Peptídeos Derivados Determinadas Por Rmn De Solução Em Meio Mimético De Membranas
25	3296955	Karina Eliane Quege	Produção E Aplicação De Extratos De Flores E Frutos Como Indicadores Ácido-Base Em Aulas De Química Analítica Quantitativa Experimental



SEMANA DA QUÍMICA 2023

19 A 22 DE JUNHO

IQ
INSTITUTO DE QUÍMICA

UFG
UNIVERSIDADE FEDERAL DE GOIÁS



XVII SEMANA DA QUÍMICA
IV WORKSHOP DA PÓS GRADUAÇÃO

26	8973119	Leonardo Matos Ferreira	Detecção Molecular Do Vírus Sars-Cov-2 Por Rt-Lamp-Lfa
27	2324678	Leonardo Silva Gonçalves	Uma Nova Abordagem Para Discriminação Entre Etanol Combustível Aditivado E Comum Utilizando Gc-Ms E Análise Multivariada
28	2765958	Leyllanne Katharinne Araujo De Souza	Uso De Eletrodos Portáteis E Nanocristais De Tio ₂ -Co Para Detecção Seletiva De Amx
29	2343172	Lilian Fernandes De Oliveira	Caracterização Do Perfil De Fame Para Produção De Biodiesel A Partir Do Óleo De Sementes De Carthamus Tinctorius L.
30	1250853	Lucas De Sousa Silva	Análise Da Geração De Emaranhamento Em Sistemas Carbonicos Bidimensionais
31	1911328	Lucas Ferrão Marinho	Craqueamento Catalítico De Polietileno, Polipropileno E Poliestireno Utilizando Rejeito De Barragem Como Catalisador
32	5518942	Lucas Yugo Sato	Estudo De Interações Fármaco-Excipiente Entre Tartarato De Brimonidina E Maleato De Timolol Na Presença De Alguns Excipientes Por Análise Térmica
33	9063217	Marcos Filipe Ramos E Silva	Análise Por Ftir E De Componentes Principais Visando A Distinção De Aditivação E Do Teor De Enxofre Em Óleo Diesel B S10 E S500
34	8337991	Nikaele Sousa Moreira	Detecção Colorimétrica Da Proteína S Em Placa De Micropoços De Poliéster Para Diagnóstico De Covid-19 Em Amostras De Swab E Saliva
35	2480101	Paulo Felipe Neves Estrela	Detecção Colorimétrica De Variantes Do Sars-Cov-2 Por Rt-Lamp
36	7912769	Pedro Henrique Ferreira Matias	Desenvolvimento De Uma Nova Metodologia Para Otimização De Funcionais Rsh Pelo Esquema J-Gap Em Sistemas Solvatados Orgânicos
37	2117589	Renato Santana De Oliveira	Dados Oficiais Da Fiscalização Do Abastecimento Pela Anp: Uma Análise Abrangente
38	8396959	Rhuan Emmanuel Silva Mendes	Extração Do Óleo Essencial De Capim Limão (Cymbopogon Citratus)



SEMANA DA QUÍMICA 2023

19 A 22 DE JUNHO

IQ
INSTITUTO DE QUÍMICA



UFG
UNIVERSIDADE FEDERAL DE GOIÁS



XVII SEMANA DA QUÍMICA
IV WORKSHOP DA PÓS GRADUAÇÃO

39	8126867	Yuri Arrates Rocha	N-Nitrosaminas Em Essência De Cigarros Eletrônicos: Avaliação Da 4-Metilnitrosamino-1-3-Piridil-1-Butanol Por Espectrometria De Massas
----	---------	--------------------	--



ANÁLISE DA GERAÇÃO DE EMARANHAMENTO EM SISTEMAS CARBÔNICOS BIDIMENSIONAIS

Lucas de Sousa Silva^{a,*}, Wesley Bueno Cardoso^a, Guilherme Colherinhas^a

^a Instituto de Física, Universidade Federal de Goiás.

*Email: lucas_sousa@discente.ufg.br

HIGHLIGHTS: Estudo da geração de emaranhamento quântico em sistemas carbônicos bidimensionais. Utilizando a Teoria Funcional da Densidade e softwares avançados, descobrimos que o emaranhamento pode ser gerado e manipulado em sistemas com íons de lítio e placas de GQD e grafino. Resultados promissores com fidelidades altas entre os estados emaranhados. Avanços significativos para a computação quântica e informação quântica.

Palavras Chave: emaranhamento quântico, Teoria Funcional da Densidade, GQD, grafino.

RESUMO: É de conhecimento geral que sistemas nanoestruturados são comumente utilizados em várias áreas da ciência, como por exemplo, medicina personalizada [1], projetos de novos catalizadores [2] e energias renováveis [3]. Além desses cenários, destaca-se o âmbito da mecânica quântica. Neste último, por sua vez, existe um conceito de suma importância no uso da computação quântica e informação quântica, o chamado emaranhamento quântico [4]. Neste trabalho, buscamos estudar a possibilidade de geração de emaranhamento em sistemas carbônicos bidimensionais utilizando conceitos da Teoria Funcional da Densidade. Para isso, foram analisadas possíveis transições eletrônicas em dois sistemas específicos, o primeiro composto por um íon de lítio armadilhado em duas placas de GQD (do inglês, *Graphene Quantum Dot*) e o segundo formado por dois íons de lítio separados simetricamente a uma placa de grafino. No que diz respeito aos cálculos foram utilizados os softwares Avogrado [5] para a modelagem dos sistemas e Gaussian 16 [6] para a realização dos cálculos computacionais. Os resultados mostraram que em ambos os sistemas é possível a geração e manipulação de emaranhamento, sendo que a fidelidade entre o estado gerado e o estado maximamente emaranhado em ambos os casos foram altas.

Referências:

1. VIVO, M. D. et al. Role of molecular dynamics and related methods in drug discovery. *Journal of medicinal chemistry*, ACS Publications, v. 59, n. 9, p. 4035–4061, 2016.
2. GREELEY, J.; MAVRIKAKIS, M. Electronic structure and catalysis on metal surfaces. *Annual Review of Physical Chemistry*, Annual Reviews, v. 59, p. 471–498, 2008.
3. ALMEIDA, J. S. et al. Electronic structure calculations of materials for energy applications: a review. *Journal of Materials Science*, Springer, v. 52, n. 2, p. 666–685, 2017.
4. GRIFFITHS, D. J. *Introduction to Quantum Mechanics*. [S.l.]: Pearson Prentice Hall, 2005.
5. HANWELL, M. D. et al. Avogadro: an advanced semantic chemical editor, visualization, and analysis platform. *Journal of cheminformatics*, Springer, v. 4, n. 1, p. 17, 2012.
6. FRISCH, M. J. et al. *Gaussian 16*. Gaussian, Inc., Wallingford CT, 2016.



Análise de “boa noite cinderela” usando microssistemas eletroforéticos

Hellen I. Santos,^{a,*} Kemilly M. P. Pinheiro,^a Eduardo M. Richter,^{b,c} Wendell K. T. Coltro^{a,c}

^a Institute of Chemistry, Federal University of Goiás, Goiânia, Brazil. ^b Institute of Chemistry, Federal University of Uberlândia, Uberlândia, Brazil. ^c National Institute of Bioanalytical Science and Technology, Campinas, Brazil.

* Corresponding Email: hellendossantos16@gmail.com

HIGHLIGHTS: Escopolamina (SCO) e butilescopolamina (BSCO) foram analisadas usando microchip de eletroforese (MSE) acoplado com detecção condutométrica sem contato (C⁴D). O método proposto foi aplicado em amostras de bebidas e urina, demonstrando ser uma ferramenta promissora em investigações criminais.

Palavras Chave: drogas facilitadoras de crime e/ou abuso, química forense, microchip de eletroforese, microfluídica

RESUMO/ABSTRACT: Nos últimos anos, houve um aumento significativo nos casos de agressões sexuais e crimes facilitados pelo uso de drogas, conhecidas pelo termo inglês "drug-facilitated sexual assault" (DFSA) ou como "boa noite cinderela", no Brasil¹. A SCO é uma das substâncias comumente utilizadas para esses fins. Embora a SCO seja adquirida apenas por prescrição médica, relatos na literatura indicam que ela pode ser produzida a partir da degradação térmica da BSCO – princípio ativo do Buscopan[®] –, um medicamento de venda livre, aumentando o risco de obtenção à SCO¹. Este trabalho demonstra pela primeira vez o uso de MSE-C⁴D para identificação e separação da SCO e BSCO em amostras de bebidas (cachaça, vodca, uísque, cerveja, Coca-cola e suco de uva) e urina. O método proposto permitiu a separação da SCO e BSCO em cerca de 115 segundos, com resolução de 1,3 e valores de eficiência de separação variando de $1,4 \times 10^5$ a $1,5 \times 10^5$ placas m^{-1} . A melhor performance analítica obtida foi utilizando um tampão composto por 40 mmol L^{-1} de ácido butírico e 25 mmol L^{-1} de NaOH (pH = 5,0). O método proposto alcançou limites de detecção de 1,1 $\mu mol L^{-1}$ para ambas as substâncias. Além disso, apresentou satisfatória linearidade com coeficientes de correlação linear acima de 0,99 para concentrações entre 25 e 200 $\mu mol L^{-1}$. A repetibilidade foi aceitável (quarenta e oito injeções), com desvio padrão (DPR) abaixo de 3,3% para o tempo de migração e entre 4,8% e 9,4% para as áreas dos picos. A precisão interdiária foi avaliada para dezesseis injeções (uma sequência de quatro injeções realizadas em quatro dias) e os valores de RSD foram inferiores a 6,6% para áreas de pico e 2,2% para tempo de migração. Por fim, os valores de recuperação da SCO e BSCO nas amostras de bebidas e urina variaram entre 95% e 114%. Com o uso de MSE-C⁴D foi alcançado resultados satisfatórios, demonstrando ser uma ferramenta simples, rápida e promissora na análise de drogas com fins criminosos, contribuindo em investigações forenses.

Acknowledgments: We thank CAPES, UFG and INCTBio (grant 465389/2014-7) for the financial support and grants awarded.

References:

Ribeiro, M. M. A. C.; Barreto, D. N.; Petrucci, J. F. S.; Richter, E. M. *Microchemical Journal*. **2022**, *172*, 106985.



Selenilação de cromonas através de ácido tricloroisocianúrico (TCCA) sob condições verde

Isis J. A. Granja,^{a,*} José Sebastião S. Neto ^a, Jamal Rafique ^{a,b}, Sumbal Saba ^a

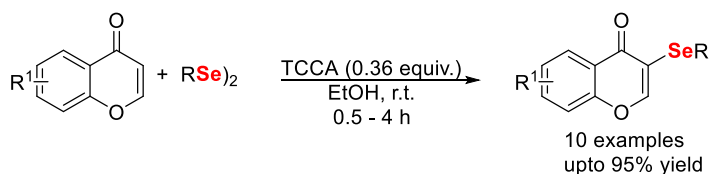
^a Instituto de Química, Universidade Federal de Goiás, Goiânia, Brasil. ^b Instituto de Química, Universidade Federal do Mato Grosso do Sul - UFMS, Campo Grande, MS-Brasil

* Corresponding Email: isisgranja@discente.ufg.br

HIGHLIGHTS: Metodologia ambientalmente adequada através de ácido tricloroisocianúrico (TCCA) para a síntese de selenilação de cromonas, com formação oxidativa de C-Se por meio da funcionalização direta de C(sp²)-H de cromonas.

Palavras Chave: Selenilação, cromona, ácido tricloroisocianúrico, condições verde.

A cromona possui núcleo heterocíclico encontrado em diversos produtos naturais bioativos e representa um privilegiado grupo. Diversos tipos de atividade biológica estão associados com cromonas e similares, incluindo anti-inflamatório, antiplaquetário, anticancerígeno, anti-HIV, imunoestimulante, anti-Alzheimer e antimicrobianos.^{1,2} Vários medicamentos comercialmente disponíveis possuem uma parte de cromonas em sua estrutura principal. Ultimamente pesquisas sobre compostos de organoselênio vem crescendo,⁴ pois possuem vasta aplicações em ciências materiais, em catálise e bioquímica.⁴ Funcionalização do selênio em heteroarenos resulta estruturas biologicamente importantes. Nosso grupo de pesquisa atua na funcionalização direta de organocalcogenos e o desenvolvimento de processos ecologicamente corretos.⁴ Relatamos, a selenilação de cromonas através do ácido tricloroisocianúrico (TCCA) à temperatura ambiente. Sob condições de reação otimizadas, as cromonas reagiram com, 0,51 equiv molar. de vários disselenetos de diorganil, 0,36 equiv molar. de TCCA em EtOH à temperatura ambiente para resultar nos produtos desejados com rendimentos bons a excelentes (Esquema 1).



Esquema 1: Selenilação de cromonas através TCCA

References:

1. Gaspar, A.; Matos, M. J.; Garrido, J.; Uriate, E.; Borges, F. *Chem. Rev.* **2014**, *114*, 4960.
2. Emami, S.; Ghanbarimasir, Z. *Eur. J. Med. Chem.* **2015**, *93*, 539; (b) Fletcher, A. C.; Porter, L. J.; Haslam, E.; Gupta, R. K. *J. Chem. Soc. Perkin Trans.* **1977**, *1*, 1628.
3. Lenardao, E.J.; Santi, C.; Perin, G.; Alves D. (Editors). *Organochalcogen Compounds: Synthesis, Catalysis and New Protocols with Greener Perspectives*. Elsevier, **2022**. b) Rafique, J.; Rampon, D.S.; Azeredo, J.B.; Coelho, F.L.; Scheneider, P.H.; Braga, A.L. *Chem. Rec.* **2021**, *21*, 2739.
4. Franco, M.S.; Saba, S.; Rafique, J.; Braga, A.L. *Angew. Chem. Int. Ed. Engl.* **2021**, *60*, 18454; b) Neto, J.S.S.; Balaguez, R.A.; Franco, M.S.; Machado, V.C.S.; Saba, S.; Rafique, J.; Galetto, F.Z.; Braga, A.L. *Green Chem.* **2020**, *22*, 3410; c) Rafique, J., Saba, S.; Franco, M.S.; Bettanin, L.; Schneider, A.R.; Silva, L.T.; Braga, A.L. *Chem. Eur. J.* **2018**, *24*, 4173.



Estrutura tridimensional do peptídeo Hp-MAP3 derivado da Temporina-PTa

Isabela B. Borghi¹*, Carlos Daniel P. Freitas¹, Patrícia Souza e Silva², Ludovico Migliolo², L.M.Liãõ¹

¹Instituto de Química, Universidade Federal de Goiás, CEP 74690-900, Goiânia, GO; ²S-Inova Biotech, Programa de Pós-Graduação em Biotecnologia, Universidade Católica Dom Bosco, Campo Grande 79117-900, Mato Grosso do Sul, Brasil

* Corresponding Email:

HIGHLIGHTS

Na busca por novos agentes na ação contra patógenos multirresistentes, o peptídeo Hp-MAP3 foi estudado a partir da RMN 2D a fim de obter sua estrutura 3D e analisar sua interação com meios biomiméticos.

Palavras Chave: Hp-MAP3, peptídeo, PAMs, RMN

ABSTRACT

O aumento dos casos de resistência a antibióticos ocasionados por microrganismos super-resistentes tem gerado uma grande preocupação na comunidade científica, inspirando a procura e o desenvolvimento de drogas alternativas para combater tal ameaça [1]. Tendo isso em vista, os peptídeos antimicrobianos (PAMs) são biomoléculas que têm atraído atenção devido a sua ação contra microrganismos multirresistentes, contra bactérias, vírus, fungos e protozoários [2]. Destaca-se entre eles o Hp-MAP3, um peptídeo catiônico constituído por 13 resíduos de aminoácidos e derivado da família da temporina, extraído da secreção da pele de anuros da espécie *Hylarana picturata*. O peptídeo Hp-MAP3 é ativo contra bactérias Gram-positivas e Gram-negativas. Por esse motivo, torna-se necessária a determinação e análise de sua estrutura 3D, a fim de obter informações estruturais que possam ser associadas à sua ação antimicrobiana frente a membranas. As análises de RMN foram realizadas com a utilização de um espectrômetro BRUKER AVII 500 (11,75T), a partir de uma amostra preparada com 1,5 mM do peptídeo e 75 mM de SDS-*d*₂₅ em 500 µL de H₂O/D₂O (9:1, v/v). Foram obtidos experimentos 2D de TOCSY, NOESY e HSQC ¹H-¹³C. As 10 estruturas de menor energia obtidas apresentaram-se bem definidas como evidenciado pelos dados de RMSD (1.00 ± 0.30 Å) e a qualidade das estruturas foram confirmadas pelos ângulos φ e ψ, no gráfico Ramachandran, localizados em regiões mais favorecidas características de α-hélice. O cálculo estrutural mostrou que o peptídeo Hp-MAP3 adota uma estrutura α-helicoidal entre os resíduos Lys3-Lys11, em 75 mM micelas de SDS-*d*₂₅. As análises estruturais do peptídeo são necessárias para o melhor entendimento do comportamento da molécula em contato com membranas de microrganismos patogênicos. Dito isto, os resultados estruturais obtidos, permitiu compreender melhor seu mecanismo de ação na perturbação/permeabilização de membranas de patógenos, mediado por atrações eletrostáticas e interações hidrofóbicas sobre a superfície de membranas, conduzindo aos resultados de eficácia apresentados pelo peptídeo considerado promissor candidato a antimicrobiano. Agradeço ao CNPq pelo suporte financeiro, ao LabRMN, IQ e UFG pelo espaço e apoio.

[1]. PRATES, Maura Vianna; BLOCH JR, C. Peptídeos antimicrobianos. *Revista Biotecnologia, Ciência & Desenvolvimento*, v. 3, n. 17, p. 30-36, 2000.

[2]. GUINDO, Alexya Sandim et al. Evaluation of the Synthetic Multifunctional Peptide Hp-MAP3 Derivative of Temporin-PTa. *Toxins*, v. 15, n. 1, p. 42, 2023.



Craqueamento catalítico de polietileno, polipropileno e poliestireno utilizando rejeito de barragem como catalisador

Lucas F. Marinho,^{a,*} Maríthiza G. Vieira,^b Nelson R. Antoniosi Filho^b

^a Instituto de Química, Universidade de Goiás, Goiânia, Brasil

* E-mail correspondente: lucasferrao@discente.ufg.br

HIGHLIGHTS: Objetiva-se analisar os compostos formados a partir do craqueamento catalítico de polietileno, polipropileno e poliestireno, utilizando rejeito de barragem como catalisador, por GC/MS, como alternativa para derivados de petróleo.

Palavras Chave: *craqueamento, plásticos, cromatografia*

RESUMO/ABSTRACT: A poluição plástica tem aumentado na última década, a presença desses materiais no meio ambiente, causa uma serie de malefícios tais como, contaminação da água e do solo, degradação do habitat, morte dos animais, entre outras. Uma das formas de remediação da poluição plástica é o craqueamento, chamado também de pirólise, que consiste na quebra de cadeias carbônicas maiores para formar cadeias carbônicas menores, podendo variar entre craqueamento térmico que utiliza apenas o calor ou craqueamento catalítico, quando se utiliza um catalisador juntamente com a temperatura, o que consiste em um processo bastante utilizado na indústria petrolífera. Com o propósito de encontrar formas alternativas para produção de derivados de petróleo, o presente trabalho emprega a técnica de craqueamento, para a conversão de resíduos plásticos de polietileno (PE), polipropileno (PP) e poliestireno (PS), utilizando rejeito de barragem como catalisador. Para isso, foi utilizado uma temperatura de 300 °C, 20% de catalisador e tempo de 90 min. Para a análise dos óleos obtidos foi utilizado a técnica de cromatografia gasosa acoplada a espectrometria de massas, de forma a caracterizar o produto líquido (óleo). O rendimento de óleo obtido para o PE foi de 63,9 % e o produto consistia em hidrocarbonetos alifáticos entre C8-C27, dos quais 43,8% de Alcanos e 41,6% de alcenos. Já o rendimento de óleo obtido para PP foi de 84,4 %, com a faixa de hidrocarbonetos entre C8-C24 átomos de carbono, 41,6% de alcenos ramificados e 8,8% de cicloalcanos. Por fim, o rendimento em óleo obtido para o PS foi de 87,7 %, o produto apresentou hidrocarbonetos aromáticos entre 6 e 24 átomos de carbono, composto majoritariamente por estireno (56,8%), seguido de 10,2 % de α -metilestireno. Embora, sejam necessárias etapas de melhoramento (destilação e hidrogenação) para o uso desses produtos como substituintes aos derivados do petróleo, os produtos mostram grande potencial para produção de formas alternativas de combustíveis e outros produtos de valor agregado, tendo em vista a grande variedade no número de hidrocarbonetos.

Referências Bibliográficas:

KARTIK, S. et al. Valorization of plastic wastes for production of fuels and value-added chemicals through pyrolysis – A review. Thermal science and engineering progress, v. 32, n. 101316, p. 101316, 2022.



Desenvolvimento de uma metodologia de otimização de funcionais RSH fisicamente inspirada no princípio da mínima polarizabilidade em polímeros orgânicos

Ana Carolina Felisberto Araujo*^a, Pedro Henrique Ferreira Matias (PG)^a, Mateus Rodrigues Barbosa (PG)^a, Heibbe Cristian Benedito de Oliveira (PQ)^a

^a Laboratório de Estrutura Eletrônica e Dinâmica Molecular, Instituto de Química, Universidade Federal de Goiás, Goiânia, Brasil
* Corresponding Email: carol.felisberto@discente.ufg.br

HIGHLIGHTS: Uma proposta de otimização do parâmetro ω de funcionais RSH baseada no princípio da mínima polarizabilidade, visando minimizar os custos computacionais. A sugestão metodológica evidenciou resultados positivos para o esquema de otimização.

Palavras Chave: RSH, Polarizabilidade, Polímeros Orgânicos.

A Teoria do Funcional de Densidade (DFT) é capaz prever propriedades optoeletrônicas de polímeros orgânicos com elevada precisão e baixo custo computacional.¹ Entretanto, existe uma grande demanda em protocolos para correção de descrições de propriedades de caráter local obtidas pela DFT, por isso, utilizamos a otimização do parâmetro ω .²

Os protocolos convencionais como por exemplo a varredura do parâmetro ω dentro do esquema JGAP^{2,3}, requer dados a respeito da estrutura eletrônica dos sistemas neutros, catiônicos e aniônicos, totalizando um número grande de cálculos. Em contrapartida, a varredura utilizando o esquema da mínima polarizabilidade, aqui proposta, requer apenas informações sobre a resposta óptica de primeira ordem dos sistemas no estado fundamental, por conseguinte, reduzindo o número de cálculos necessários em três vezes.

A escolha de polímeros orgânicos para validação da metodologia proposta ocorreu devido a seu papel essencial na ciência de materiais, tendo potencial para compor dispositivos ópticos como sensores e fotocatalisadores.^{1,4,5,6} Os polímeros ópticos podem ter suas propriedades optoeletrônicas aprimoradas seguindo o princípio da mínima polarizabilidade, logo, espera-se que a otimização do parâmetro ω visando a minimização da polarizabilidade linear acarrete em uma melhora sensível de suas propriedades.^{1,7,8}

A implementação do algoritmo de busca para otimização do funcional LC-BLYP⁹ baseando-se na mínima polarizabilidade forneceu resultados satisfatórios de ω /polarizabilidade (ESU) conforme: 0,67/677,625 (Politiofeno); 0,96/617,441 (poli(1,4-fenileno)); 0,54/447,225 (cis-poliacetileno); 0,59/519,984 (trans-poliacetileno). A metodologia alternativa proposta por este trabalho indica polarizabilidades menores, enquanto que a varredura do parâmetro ω via JGAP resulta em valores maiores até mesmo em relação à polarizabilidade indicada pelo funcional puro, isto é, sem otimização. À medida que os valores de polarizabilidade linear obtidos pelo esquema JGAP foram: 859,081 (Politiofeno); 636,965 (poli(1,4-fenileno)); 529,151 (cis-poliacetileno); 678,635 (trans-poliacetileno).

Agradecimentos: CNPQ, LAMCAD, UFG, IQ-UFG, LEEDMOL



SEMANA DA QUÍMICA 2023

19 A 22 DE JUNHO

IQ
INSTITUTO DE QUÍMICA

UFG
UNIVERSIDADE FEDERAL DE GOIÁS



XVII SEMANA DA QUÍMICA
IV WORKSHOP DA PÓS GRADUAÇÃO

References:

1. Maekawa, S.; Moorthi, K. Polymer Optical Constants from Long-Range Corrected DFT Calculations. *The Journal of Physical Chemistry B* 2016, 120, 2507–2516, PMID: 26918918.
2. Neto, A. P.; Machado, D. F. S.; Lopes, T. O.; Camargo, A. J.; de Oliveira, H. C. Explicit Aqueous Solvation Treatment of Epinephrine from Car–Parrinello Molecular Dynamics: Effect of Hydrogen Bonding on the Electronic Absorption Spectrum. *The Journal of Physical Chemistry B* 2018, 122, 8439–8450.
3. Bredas, J. L., Adant, C., Tackx, P., Persoons, A., & Pierce, B. M. (1994). Third-Order Nonlinear Optical Response in Organic Materials: Theoretical and Experimental Aspects. *Chemical Reviews*, 94(1), 243–278.
4. Badi N., Lutz J., Sequence control in polymer synthesis. *Chemical Society Reviews*, (2009), 3383-3390, 38 (12)
5. Brédas J., Beljonne D., Coropceanu V., et al. Charge-Transfer and Energy-Transfer Processes in π -Conjugated Oligomers and Polymers: A Molecular Picture. *Chemical Reviews*, (2004), 4971-5003, 104(11).
6. Wang, T.-X., Liang, H.-P., Anito, D. A., Ding, X., & Han, B.-H. (2020). Emerging applications of porous organic polymers in visible-Light photocatalysis. *Journal of Materials Chemistry A*.
7. Chattaraj, P. K., and S. Sengupta. "Popular electronic structure principles in a dynamical context." *The Journal of Physical Chemistry* 100.40 (1996): 16126-16130.
8. Machado, D.F.S. Desenvolvimento de Métodos Fisicamente Inspirados Para Cálculos de Ótica Não-Linear e Efeitos de Solventes nas Propriedades ópticas Não-Lineares em Derivados de Azo-Enaminonas. 2017. Tese (Doutorado) - Universidade de Brasília, Brasília, 2017.
9. Chai, J.-D., & Head-Gordon, M. (2008). Systematic optimization of long-range corrected hybrid density functionals. *The Journal of Chemical Physics*, 128(8), 084106.



Disposable Gold-modified Electrochemical Sensors for Quantification of Nitrite and Nitrate in Drinking Water

João Vitor Fernandes Paiva (PG)^{1*}, Daniel A. de Azevedo (PG)², Pedro V. V. Romanholo (PG)¹, Sergio A. S. Machado (PQ)³, Lívia Florio Sgobbi (PQ)¹.

¹ Instituto de Química, Universidade Federal de Goiás, Goiânia, Brasil. ² Instituto de Física, Universidade Federal de Goiás, Goiânia, Brasil. ³ Instituto de Química de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, Brasil.

* Corresponding Email: joaovittor97@discente.ufg.br

HIGHLIGHTS: Disposable electrochemical sensors made of conductive carbon ink and modified with gold and cadmium nanoparticles to detect nitrite and nitrate, sequentially. Fast analysis, cost-effective and low volume sampling technology.

Palavras Chave: *Electrochemical sensors, screen-printed electrodes, modified electrodes, nitrite, nitrate.*

RESUMO/ABSTRACT: Nitrite and nitrate ions are inorganic compounds available in nature from the nitrogen cycle and are also part of metabolic processes in various organisms. However, at high concentrations, these ions causing eutrophication of rivers and lakes, as well as endocrine changes in living aquatic organisms. In humans, nitrate reduces to nitrite forms nitrosamines that are carcinogenic, causing esophageal and gastric cancer. The conversion of hemoglobin to methemoglobin also occurs, which can lead to death from respiratory failure due to low oxygen transport. Due to their toxicities, the Ministry of Health and the National Council for the Environment (CONAMA) defined that the maximum limit of nitrite and nitrate in drinking water should be 1.0 mgL⁻¹ and 10.0 mgL⁻¹, respectively. The conventional analytical techniques, such as chromatography, spectrophotometry and chemiluminescence present precise results and high selectivity. However, they are expensive, time-consuming and require highly qualified professionals. Based on this, electrochemical sensors have emerged as a viable alternative, since they are easy-to-construct, portable, low cost and they are highly sensitive and enable on-site fast analyses. This work presents the sensor modification based on the electrodeposition of gold and cadmium nanoparticles on the surface of a conductive carbon ink electrode fabricated by screen printing on polyethylene terephthalate (PET) substrate for detection and quantification of nitrite and nitrate in drinking water. Gold electrodeposition was performed by chronoamperometry, applying -0.3 V for 600 s in a 1.5 mmolL⁻¹ tetrachloroauric acid solution. The characterization of the modified electrodes was performed by Cyclic Voltammetry, Scanning Electron Microscopy and Energy Dispersive Spectroscopy. The detection was performed by cyclic voltammetry, monitoring the oxidation of nitrite in NaClO₄ (0.1 molL⁻¹) + H₂SO₄ (pH 3) and the reduction of nitrate catalyzed by the electrodeposition of cadmium (1.0 mmolL⁻¹) in NaClO₄ (0.1 molL⁻¹) + H₂SO₄ (pH 3). The analytical curve of NO₃⁻ obtained a linear range from 0.30 to 0.80 mmol L⁻¹ (R² = 0,980) and the NO₂⁻ curve had a linear range from 2.0 μmolL⁻¹ to 70.0 μmolL⁻¹ (R² = 0,987). The next steps will be recovery tests, analysis of interferents and application in real samples, initially, drinking water.

Acknowledgements: We thank Universidade Federal de Goiás, Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico and the Laboratório de Espectroanalítica Eletroanalítica e Sensores.



SEMANA DA QUÍMICA 2023

19 A 22 DE JUNHO

IQ
INSTITUTO DE QUÍMICA

UFG
UNIVERSIDADE FEDERAL DE GOIÁS



XVII SEMANA DA QUÍMICA
IV WORKSHOP DA PÓS GRADUAÇÃO

References:

1. POULSEN, R. et al. Nitrate: An Environmental Endocrine Disruptor? A Review of Evidence and Research Needs. *Environmental Science and Technology*, v. 52, n. 7, p. 3869–3887, 3 abr. 2018.
2. RAO, H. et al. Gold Nanoparticle/Chitosan@N,S Co-doped Multiwalled Carbon Nanotubes Sensor: Fabrication, Characterization, and Electrochemical Detection of Catechol and Nitrite. *ACS Sustainable Chemistry and Engineering*, v. 5, n. 11, p. 10926–10939, 6 nov. 2017.
3. WANG, Y. C. et al. Pore-Confined Silver Nanoparticles in a Porphyrinic Metal-Organic Framework for Electrochemical Nitrite Detection. *ACS Applied Nano Materials*, v. 3, n. 9, p. 9440–9448, 25 set. 2020.
4. MACHADO, G. C., MACHADO, S. A. S. Determinação sequencial de nitrato e nitrito por voltametria de pulso diferencial empregando um ultramicroeletrodo de ouro. Dissertação mestrado. Instituto de Química. Universidade de São Paulo. São Carlos. p. 1-88. 2020.



Dados Oficiais da Fiscalização do Abastecimento pela ANP: Uma Análise Abrangente

Renato S. Oliveira,^{a,*} Kairo M. P. Morais^a

^a Instituto de Química, Universidade Federal de Goiás.

* Email: renatosantana@discente.ufg.br

HIGHLIGHTS: A fiscalização do abastecimento pela Agência Nacional de Petróleo, Gás Natural e Biocombustíveis (ANP) revela importantes não conformidades no etanol, gasolina e diesel. São mostrados dados sobre as não conformidades, afirmando a necessidade de fiscalização contínua na garantia da qualidade dos combustíveis nacionais.

Palavras Chave *Qualidade, Fiscalização, Combustíveis, ANP.*

RESUMO/ABSTRACT: A fiscalização do abastecimento pela Agência Nacional de Petróleo, Gás Natural e Biocombustíveis (ANP) revela importantes não conformidades nos combustíveis, como etanol, gasolina e diesel. No caso da gasolina, a principal infração encontrada está relacionada à porcentagem de etanol. Para o etanol hidratado combustível, as principais infrações envolvem a massa específica, o teor de metanol, a condutividade, o teor de etanol e o pH. Quanto ao diesel, a principal infração diz respeito ao não cumprimento da mistura com biodiesel, que deve ser de 12% (podendo chegar a 15% até 2026). A fiscalização contínua dessas não conformidades é fundamental para garantir a qualidade dos combustíveis e proteger os consumidores. Devido à toxicidade do metanol e seu potencial como adulterante do etanol combustível e da gasolina, existem riscos à saúde humana e à segurança pública e privada quando ele é armazenado e manipulado sem as devidas precauções. Para lidar com essas questões, a Agência Nacional do Petróleo, Gás Natural e Biocombustíveis (ANP) regulamentou o metanol por meio das Resoluções ANP nº 696/2017 e nº 697/2017, que incluem o metanol na definição de solvente e ajustam os regulamentos existentes para garantir um controle mais efetivo do metanol no mercado nacional. Mesmo assim, observa-se um aumento desta fraude nos últimos 3 anos, tanto no etanol quanto na gasolina, representando, em 2022 por exemplo, 17,4% das não conformidades registradas na gasolina e 30,9% no etanol. Como esta adulteração ocorre tanto no etanol quanto na gasolina, somando as duas, no recorte do ano passado, tem-se incríveis 48,3%, ou quase metade de todas as não conformidades nestes combustíveis, o que mostra a gravidade, a intensidade e uma verdadeira 'epidemia' deste tipo de fraude no país. A fiscalização contínua dessas não conformidades é crucial para garantir a qualidade dos combustíveis e proteger os consumidores, evitando danos aos veículos e impactos negativos no meio ambiente. A ANP desempenha um papel fundamental na aplicação das regulamentações e na promoção de um abastecimento seguro e confiável para o mercado nacional.

Referências Bibliográficas: 1. Agência Nacional do Petróleo, Gás Natural e Biocombustíveis (ANP). (2022). Painel Dinâmico da Fiscalização do Abastecimento. 2. Brasil. Lei nº 9.478, de 6 de agosto de 1997.



CARACTERIZAÇÃO FUNCIONAL E ESTRUTURAL DO PEPTÍDEO MASTOPARANO-R1

Carlos Daniel P. Freitas^{a,*}, Karen G. N. Oshiro^{b,c}, Maria Ligia Rodrigues Macedo^d, Marlon H. Cardoso^{b,c,d}, Octávio L. Franco^{b,c,d} e Luciano Morais Lião^a.

^a Laboratório de RMN, Instituto de Química, Universidade Federal de Goiás, Brasil; ^b S-Inova Biotech, Programa de Pós-Graduação em Biotecnologia, Universidade Católica Dom Bosco, Brasil; ^c Centro de Análises Proteômicas e Bioquímicas, Pós-Graduação em Ciências Genômicas e Biotecnologia, Universidade Católica de Brasília, Brasil; ^d Laboratório de Purificação de Proteínas e suas Funções Biológicas, Universidade Federal de Mato Grosso do Sul, Brasil.

* Corresponding Email: carlosdaniel@discente.ufg.br

Peptídeos antimicrobianos, como o mastoparano-R1, mostra-se promissor substituto aos medicamentos convencionais ineficientes no tratamento de doença causada por microrganismo multirresistente. Sua caracterização revelou atividade contra bactérias gram-positivas/negativas e uma estrutura em α -hélice.

Palavras Chave: Peptídeos antimicrobianos (PAMs), Estrutura tridimensional, Mastoparano.

De acordo com a OMS, doenças resultantes da Resistência Antimicrobiana (RAM) já causam pelo menos 700 mil mortes por ano em todo o mundo [1]. Nessa perspectiva, os peptídeos antimicrobianos (PAMs) têm se mostrado fortes candidatos para substituir os medicamentos convencionais, que não são mais suficientemente eficazes. Entre os PAMs, destaca-se a classe dos peptídeos mastoparanos, que são em sua maioria peptídeos catiônicos anfipáticos e tendem a se organizar em uma estrutura em α -hélice.

O peptídeo mastoparano-R1 se destacou nos ensaios biológicos e mostrou-se promissor fármaco contra bactérias gram-negativas e gram-positivas. O mastoparano-R1 (INLKALAALAKKIL -NH₂) é um peptídeo sintético composto por 14 resíduos de aminoácidos, projetado computacionalmente usando o algoritmo Joker. Os dados de atividade biológica para o R1, mostraram uma redução na citotoxicidade e atividade hemolítica em comparação com o peptídeo parental, mastoparano-L. Além disso, R1 demonstrou atividade *in vitro* e *in vivo* contra bactérias suscetíveis e resistentes, bem como ação contra biofilmes bacterianos [2].

Nesse contexto, a estrutura tridimensional do peptídeo mastoparano-R1 foi determinada por Ressonância Magnética Nuclear (RMN), devido seu reconhecimento como um fármaco antimicrobiano. O R1 revelou uma estrutura em α -hélice entre os resíduos Leu3-Ile3. Os resultados estruturais mostram uma boa convergência das estruturas de menor energia obtidas, evidenciado pelo baixo valor de RMSD 0.0987 ± 0.0406 . Por fim, a determinação da estrutura tridimensional do peptídeo R1 por meio da RMN proporcionou uma melhor compreensão do seu mecanismo de ação, permitindo associar características estruturais e dinâmicas da molécula com sua função biológica.

Agradecimentos: Ao LabRMN, IQ, UFG, PPGQ e CAPES.

References:

[1]. World Health Organization. Global Priority List of Antibiotic- Resistant Bacteria to Guide Research, Discovery, and Development of New Antibiotics, 2017.

[2]. Oshiro, K. G., Candido, E. S., Chan, L. Y., Torres, M. D., Monges, B. E., Rodrigues, S. G., & Cardoso, M. H. (2019).

Computer-aided design of mastoparan-like peptides enables the generation of nontoxic variants with extended antibacterial properties. *Journal of Medicinal Chemistry*, 62(17), 8140-8151.



Uma nova abordagem para discriminação entre etanol combustível aditivado e comum utilizando GC-MS e análise multivariada

Leonardo Silva Gonçalves*, Dyovanna de Sousa Costa, Rhyan César Santos Dias, João Marcos Gonçalves Barbosa, Nelson Roberto Antoniosi Filho

Laboratório de Métodos de Extração e Separação, Instituto de Química, Universidade Federal de Goiás, Goiânia, Brasil

* Corresponding Email: gonc.leonardo@gmail.com

HIGHLIGHTS: Essa é a primeira metodologia desenvolvida para identificação da presença de aditivos em etanol hidratado utilizado como combustível. Para isso empregou-se a análise desse biocombustível por GC-MS seguida da utilização de PLS-DA para montagem de um modelo classificatório.

Palavras Chave: *biocombustível, cromatografia gasosa, espectrometria de massas, quimiometria.*

RESUMO: O Etanol é utilizado em larga escala como um biocombustível em muitos países. No Brasil, esse biocombustível é amplamente comercializado, sendo encontrado em duas versões: comum e uma versão chamada de 'aditivado' em que são adicionados pacotes de compostos químicos multifuncionais, o que geralmente faz elevar seu preço de venda. Os pacotes de aditivos são adicionados em combustíveis e biocombustíveis em baixas concentrações e tem como objetivo melhorar as características de combustão, armazenamento e transporte. No entanto, não há metodologias para discriminação entre etanol aditivado e comum. Sendo assim, este estudo visa o desenvolvimento de uma metodologia para discriminação entre etanol combustível aditivado (EHA) e comum (EHC) e determinar quais compostos são os principais marcadores responsáveis por essa discriminação. Para realização do estudo, utilizou-se a cromatografia gasosa acoplada a espectrometria de massas (GC-MS) seguida de análise multivariada. Foram analisadas 80 amostras comerciais de etanol combustível, sendo elas 41 amostras comuns e 39 aditivadas. Para análise exploratória dos dados foi utilizada a técnica de redução de dimensionalidade não supervisionada *Principal Component Analysis* (PCA) e para o modelo classificatório foi utilizado a *Partial Least Square Discriminant Analysis* (PLS-DA). A análise cromatográfica das amostras de etanol combustível apresentou um perfil químico diverso para ambos os grupos, porém as amostras do grupo EHA apontam para uma possível região característica, que pode ser de difícil detecção visual a depender da variabilidade química presente na amostra. Dessa forma, o modelo supervisionado proposto apontou para 8 compostos como marcadores discriminantes, com uma acurácia nas matrizes de treino, teste e validação de 98%, 95,2% e 92,3%, respectivamente. Assim, desenvolveu-se um método analítico rápido, robusto, e com alta acurácia dos modelos estatísticos para certificação de pacotes de aditivos em etanol, sendo uma nova ferramenta tecnológica no controle de qualidade desse biocombustível.

Agradecimentos: LAMES, IQ, UFG, Fundação RTVE, ANP, FUNAPE.



Caracterização do perfil de FAME para produção de biodiesel a partir do óleo de sementes de *Carthamus tinctorius L.*

Lilian F. de Oliveira,^{a*} Aline M. Aguiar,^a Dayane C. da Costa,^a Juliana E. Lichston,^b Nelson R. Antoniosi Filho^a

^aLaboratório de Métodos de Extração e Separação (LAMES), Instituto de Química, Universidade Federal de Goiás, Goiânia, Brasil

^bDepartamento de Botânica, Ecologia e Zoologia, Centro de Biociências, Universidade Federal do Rio Grande do Norte, Natal, Brasil

* E-mail correspondente: lilianfernandes@discente.ufg.br

HIGHLIGHTS: Este trabalho apresenta uma análise sobre o óleo da semente de cártamo (*Carthamus tinctorius L.*) como matéria-prima para a produção de biodiesel. O perfil de ésteres metílicos de ácidos graxos do óleo, caracterizado via GC-MS foi utilizado para avaliação da qualidade do biocombustível.

Palavras Chave: óleo de cártamo; ésteres metílicos de ácidos graxos; transesterificação; biodiesel.

RESUMO/ABSTRACT: O consumo global de energia tem crescido significativamente devido ao constante aumento da população mundial e expansão nos setores de transportes e comércio em função dos avanços tecnológicos e da industrialização. Diante das implicações do uso contínuo das reservas de petróleo, fonte de energia não renovável, associada a diminuição desse recurso e a elevação dos custos para a produção de energia, a necessidade de diversificação da matriz energética tem direcionado pesquisas na busca por fontes alternativas que sejam sustentáveis, economicamente viáveis e renováveis para a substituição dos combustíveis fósseis. Nesse contexto, os combustíveis provenientes de biomassa como o biodiesel e o etanol se tornaram parte da política energética de vários países ao redor do mundo em ordem de solucionar ou amenizar os problemas relacionados à produção de energia. Para a análise da aplicabilidade da matriz oleaginosa como fonte de biodiesel, o presente trabalho emprega a caracterização do óleo extraído via sistema Soxhlet da espécie *Carthamus tinctorius L.*, a partir da identificação dos ésteres metílicos de ácidos graxos (FAMES) obtidos por processo de transesterificação direta (DT) pelo método de Hartman e Lago adaptado para microescala, com o uso da técnica de cromatografia gasosa (GC) e espectrometria de massas (MS). A composição de FAMES obtida do óleo de cártamo apresentou uma predominância de ácidos graxos insaturados, correspondente a 80,92% dos ácidos graxos totais. O alto teor de insaturação proporciona baixa estabilidade oxidativa e a alteração nas propriedades de combustão que comprometem a qualidade do biocombustível. Apesar das limitações do óleo de cártamo para a produção de biodiesel, o refinamento dessa matéria-prima graxa que se adapta bem ao clima semiárido com um curto ciclo de cultivo (110 a 160 dias) e alto teor lipídico apresentado nesse estudo, a literatura propõe o uso de aditivos antioxidantes que viabilizariam o uso como matriz energética alternativa.

References:

Vieira, M. G., Batista, L. R., Muniz, A. S., Lichston, J. E., Oliveira, A. R. S., César-Oliveira, M. A. F., & Filho, N. R. A. (2021). Synthesis of antioxidant additive from safflower seed oil. *Journal of the Brazilian Chemical Society*, 32(1), 40–46. <https://doi.org/10.21577/0103-5053.20200151>



Detecção colorimétrica de variantes do SARS-CoV-2 por RT-LAMP

Paulo F. N. Estrela,^{a,*} Carlos A. dos Santos,^b Elisângela de P. Silveira-Lacerda,^b Gabriela R. M. Duarte^a

^a Instituto de Química- UFG, Goiânia, Brasil. ^b Instituto de Ciências Biológicas- UFG, Goiânia, Brasil.

* Corresponding Email: paulofne@hotmail.com

HIGHLIGHTS:

Desenvolvemos, pela primeira vez, testes RT-LAMP para inferência específica de sublinhagens ômicron.

Os testes, em 267 amostras, obtiveram acurácia de 98% comparado ao sequenciamento genético.

Os ensaios apresentam custo 60 vezes inferior ao método padrão e com resultados em até 1 hora.

Palavras Chave: COVID-19, Ômicron, sublinhagens, POCT.

RESUMO: O vírus SARS-CoV-2, agente etiológico da COVID-19, atualmente representa o maior risco à saúde pública mundial. Embora a imunização ativa tenha corroborado para minimização dos casos graves da doença, a adaptação do vírus através de mutações genômicas tem sido motivo de recente preocupação em relação ao curso da pandemia, uma vez que o surgimento de novas variantes resistentes aos agentes imunizantes disponíveis pode retornar-nos ao cenário inicial de alta taxa de mortalidade. Desta forma, o monitoramento de variantes do SARS-CoV-2 é essencial à segurança em saúde pública mundial. Apesar da atual disponibilidade de diversificados testes para COVID-19, a possibilidade de inferência de variantes ainda se restringe aos métodos moleculares convencionais, que em geral apresentam elevado custo, tempo e laboriosidade.¹ Em consequência, o monitoramento de variantes permanece irrisório, sobretudo em países em desenvolvimento.² Visando contornar essa vulnerabilidade, desenvolvemos como prova de conceito testes point-of-care baseados na técnica Loop Mediated Isothermal Amplification (LAMP) para inferência de variantes Ômicron (sublinhagens BA.1 e BA.2) do SARS-CoV-2. Os ensaios consistem na adição de 1,5 µL de amostra de RNA à mistura reacional RT-LAMP, seguida por aquecimento em banho à seco por até 40 minutos e, por fim, detecção visual utilizando indicador de pH, que muda a coloração da solução de rosa para amarelo na presença do alvo. Com as condições reacionais otimizadas, confirmamos a alta especificidade dos testes em reações com diferentes variantes do SARS-CoV-2. Em seguida, os testes foram avaliados em um painel de 267 amostras clínicas e obteve-se acurácia de 98% em comparação ao sequenciamento genético. A elevada exatidão, aliada a simplicidade de todo o processo, demonstra o grande potencial para ensaios colorimétricos RT-LAMP serem usados como testes de inferência para vigilância genômica, principalmente na racionalização do sequenciamento genético em locais com recursos escassos, possibilitando a antecipação na identificação de novas variantes.

Referências

¹DOS SANTOS, C. A. et al. *Scientific Reports* 12.1 (2022): 11500.

⁴ESTRELA, P. F. N. et al. *Analyst* 147.24 (2022): 5613-5622.

³KALIA, K.; SABERWAL, G.; SHARMA, G. *Nature Biotechnology*, 39.9 (2021), 1058–1060.



Síntese Verde de Selanil-Imidazopiridinas Mediada Por Ácido Tricloroisocianúrico (TCCA)

José S. S. Neto,^{a,*} Isis J. A. Granja^a, Jamal Rafique^{a,b}, Sumbal Saba^a, Felipe Lange Coelho^a, Luciano Morais Lião^a

^a Instituto de Química, Universidade Federal de Goiás, Goiânia, Brasil. ^b Instituto de Química, Universidade Federal do Mato Grosso do Sul - UFMS, Campo Grande, MS-Brasil

* **Corresponding Email:** joseneto.qmc@gmail.com

HIGHLIGHTS: Metodologia para a síntese de selanil-imidazopiridinas mediada por tricloroisocianúrico por meio da funcionalização direta de C(sp²)-H de imidazopiridinas.

Palavras Chave: Selenilação, imidazopiridinas, ácido tricloroisocianúrico, condições verde.

Os selanil imidazopiridinas constituem uma classe de compostos de grande interesse tanto do ponto de vista sintético como farmacológico, pois pode reunir as atividades biológicas descritas para o andaime imidazopiridina regular com o potencial poder farmacológico de compostos organoselênio.¹ Algumas metodologias para a síntese dessa classe de compostos foi relatada mas fazem uso de altas temperaturas, ou solventes de fontes não renováveis ou caras, ou ainda, utilizando sistemas oxidantes fortes.² Aqui relatamos o desenvolvimento de um novo método sintético para a síntese de 3-selanil-imidazopiridinas a partir imidazopiridinas, empregando disselenetos como fonte de selênio e ácido tricloroisocianúrico (TCCA) como mediador ambientalmente amigável. Primeiramente, um processo de otimização foi realizado para avaliar as melhores condições de reação. Um total de dezessete conjuntos de condições foram testados, variando parâmetros como solvente, tempo, temperatura e quantidades estequiométricas de reagentes. O conjunto ideal de condições consistiu em usar 0,55 eq. de disseleneto de difenila, 0,33 eq. de TCCA, etanol seco como solvente, a temperatura e atmosfera ambientes por 10 minutos, obtendo-se o produto desejado com 96% de rendimento. Em seguida, procedemos à expansão da reação escopo usando o método otimizado. Até agora, trinta exemplos de 3-selanil-imidazopiridinas foram obtidos, com rendimentos de 38% até 97%.



compostos heterocíclicos = Imidazopiridinas

R = alquila, arila, heteroarila; Y = Se

Esquema 1: Síntese Verde de Selanil-Imidazopiridinas

References:

1. a) Franco, M. S.; Saba, S.; Rafique, J.; Braga, A. L. *Angew. Chem. Int. Ed. Engl.* **2021**, *60*, 18454-18560. b) Neto, J. S. S., Balaguez, R. A., Franco, M. S., Machado, V. C. S., Saba, S., Rafique, J., Galetto, F. Z., Braga, A. L. *Green Chem.* **2020**, *22*, 3410-3415. (c) Nogueira, C. W.; Rocha, J. B. T. *Organoselenium and Organotellurium Compounds: Toxicology and pharmacology*, In Patai's Chemistry of Functional Groups, Wiley, Chichester 2011.
2. Gensch, T.; Hopkinson, M. N.; F. Glorius, F.; Wencel-Delord, J. *Chem. Soc. Rev.*, **2016**, *45*, 2900-2936



Fixação de CO₂ em Epicloridrina Para Produção de Carbonatos Cíclicos

Jonas X. Torres,^{a,*} Vinicius K. Tomazett^b Muhammad I. Qadiri^b

^a Department of Chemistry, University of UFG, Goiania, GO.

* Corresponding Email: jonas_torres@discente.ufg.br

HIGHLIGHTS: A captura do CO₂ é importante para enfrentar o desequilíbrio climático. A fixação de CO₂ em epóxidos se destaca como uma abordagem propícia. A reação foi testada em diferentes condições, resultando na produção de carbonatos cíclicos, tendo um potencial na síntese de materiais químicos sustentáveis.

Palavras Chave: CO₂, Epóxido, Epicloridrina

RESUMO/ABSTRACT: O CO₂ em excesso, um dos principais fatores responsáveis pelo desequilíbrio climático do planeta, tem sido uma questão amplamente discutida. Para lidar com esse desafio, várias abordagens têm sido investigadas visando a retenção e conversão do CO₂ em matérias-primas químicas, como metanol, monóxido de carbono, combustíveis e carbonatos cíclicos.

Dentre as diferentes técnicas analisadas, a fixação de CO₂ em epóxidos tem se destacado como uma abordagem promissora devido à sua sustentabilidade e potencial para processos econômicos benéficos ao meio ambiente. Esse método despertou um interesse considerável devido à utilização de carbonatos cíclicos como intermediários na síntese de policarbonatos.

A técnica consiste da adição de um epóxido a epicloridrina (ECH) em uma atmosfera de dióxido de carbono (CO₂) a 1 bar de pressão, foi utilizado um líquido iônico suportado em óxido de alumínio como catalisador, a reação foi testada em diferentes condições, temperatura indo dos 25 até os 70°C e tempo indo de 2 até 24 horas, enquanto se mantinham parâmetros constantes como pressão, quantidade de epóxido e quantidade de catalisador, esse sistema resulta na produção dos carbonatos cíclicos mencionados anteriormente, um esquema da reação pode ser visto na imagem 1.

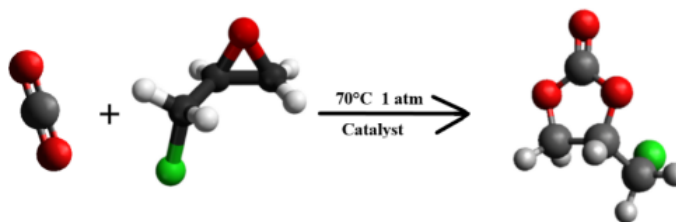


Figura 1: esquema da reação de cicloadição



Através dos experimentos realizados e por meio de análises de RMN de H, foi possível compilar e dimensionar os rendimentos e seletividade na obtenção do carbonato cíclico, o experimento foi feito com base em dois parâmetros, variação de tempo e variação de temperatura, esses dados resultaram em dois gráficos que expressam quantitativamente o que foi descrito.

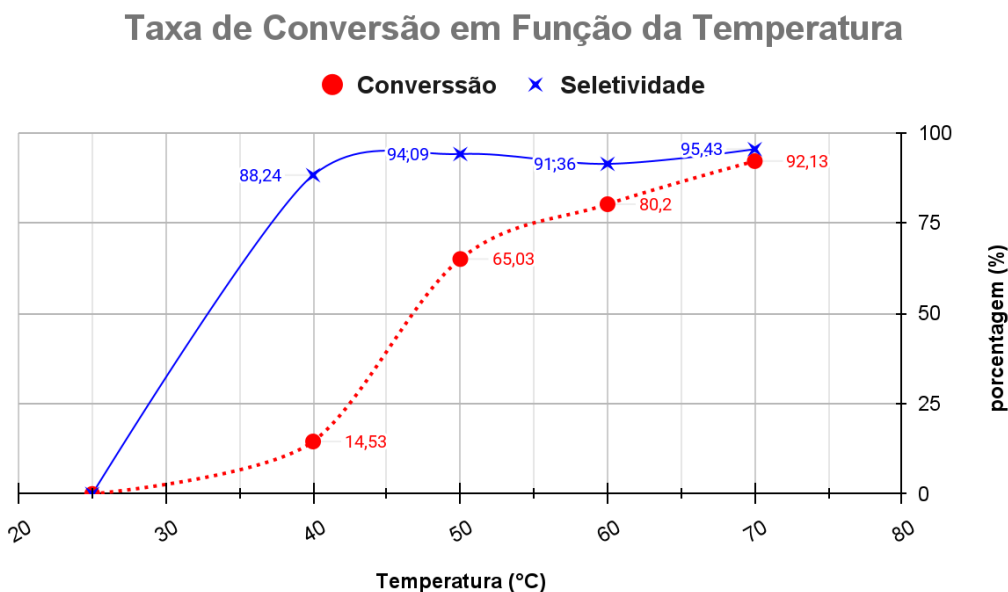


Figura 1. Teste catalítico com variação apenas de temperatura, tempo fixo em 24h e pressão a 1 bar.



Taxa de Conversão em Função do Tempo

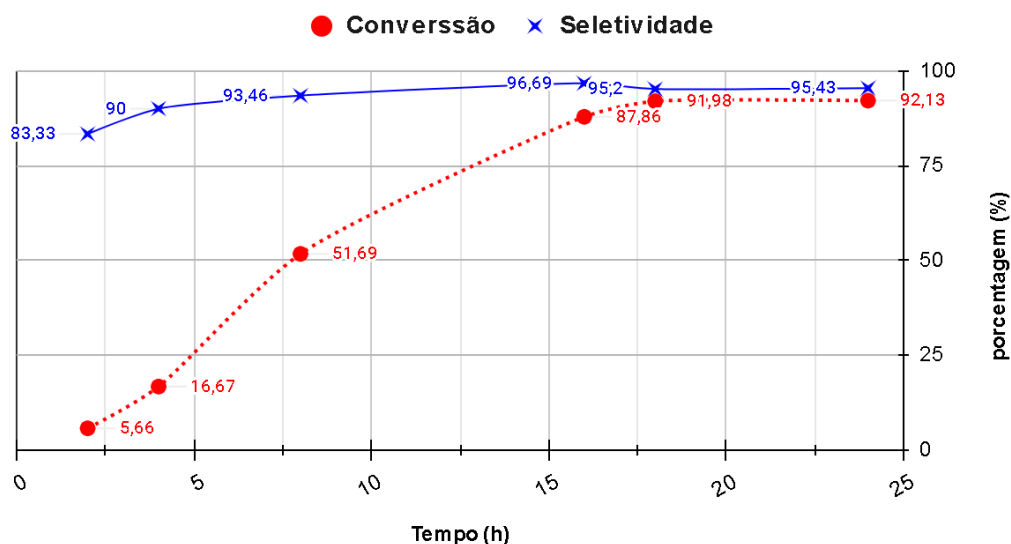


Figura 2. Teste catalítico com variação apenas de tempo, temperatura fixa em 70°C e pressão a 1 bar.

Ambos os gráficos demonstram uma tendência no aumento da conversão tanto em função da temperatura quanto do tempo, sendo o melhor resultado obtido nas condições de 24 horas a 70°C, chegando a uma conversão de ~92%, todos os resultados demonstraram uma alta taxa de seletividade o que é positivo na obtenção de um produto específico, como os carbonatos cíclicos.

References:

1. FRANZOI, A. C.; BRONDANI, D.; ZAPP, E. INCORPORAÇÃO DE LÍQUIDOS IÔNICOS E NANOPARTÍCULAS METÁLICAS NA CONSTRUÇÃO DE SENSORES ELETROQUÍMICOS. *Quím. Nova*, WEB, v. 34, n. 6, p. 1042-1050, 29 mar. 2011
2. TOMAZETT, Vinicius K. *etal.* Ionic liquid confined spaces controlled catalytic CO₂ cycloaddition of epoxides in BMIm.ZnCl₃ and its supported ionic liquid phases. *Journal of CO₂ Utilization*, WEB, v. 69, n. 6, p. 102400, 11 jan. 2023
DOI:<https://doi.org/10.1016/j.jcou.2023.102400>.



Cerúmen em estudos volatolômicos: Potenciais e Limitações

Ana Luiza R. R. Da Cunha^{*}, Anselmo E. Oliveira, Nelson Roberto Antoniosi Filho

Instituto de Química, Universidade Federal de Goiás, Goiânia, Brasil.

* Email: analuzarrcunha@gmail.com

HIGHLIGHTS: Nesse trabalho é descrita a otimização da análise de VOCs do cerúmen via HS/GC-MS. Os fatores significativos foram a massa e a homogeneidade da amostra, o que é contornado com a coleta de amostras em quantidades superiores a 10 mg, feita após acúmulo de cerúmen por alguns dias.

Palavras Chave: Cerúmen, HS/GC-MS, ROS

RESUMO: O cerúmen é uma matriz biológica pouco explorada composta de células descamadas e secreções de glândulas sebáceas e ceruminosas. No organismo, o cerúmen tem as funções biológicas de impermeabilizar e limpar o canal auditivo, manter o tímpano flexível, além de possuir ação antibacteriana¹. Entretanto, sua importância vai além das funções biológicas convencionais, pois devido os compostos orgânicos voláteis (VOCs) presentes nessa biomatriz, o cerúmen apresenta grande potencial para a identificação de desordens metabólicas, como diabetes e câncer². Nesse sentido, esse estudo objetivou otimizar a extração dos VOCs presentes no cerúmen via *headspace* e análise por cromatografia gasosa acoplada à espectrometria de massas (HS/GC-MS), bem como destacar as potencialidades e limitações dessa biomatriz em estudos volatolômicos. Logo, foi realizado um planejamento fatorial completo 2⁴ para avaliar a significância da massa de amostra, tempo de amostragem, tempo de extração e temperatura de extração na resposta número de VOCs analisados, sendo que, todos os fatores, exceto o tempo de extração, foram significativos considerando p-valor<0,01. A massa de amostra foi o fator mais significativo para a análise de cerúmen, sendo este também o fator mais limitante para o uso dessa biomatriz em estudos volatolômicos. A maioria dos compostos identificados na análise (78%) pertenciam às funções ácido carboxílico, álcool, aldeído, amidas, aminas, cetonas, ésteres, éteres e hidrocarbonetos, sendo que parte desses compostos são produtos estáveis da peroxidação lipídica, uma das principais vias de ação das espécies reativas de oxigênio (ROS) que estão intrinsecamente ligadas ao estresse oxidativo. Portanto, através da cera de ouvido, é possível identificar VOCs oriundos de processos oxidativos que podem se relacionar com diversas patologias, evidenciando o potencial dessa matriz em estudos volatolômicos. Entretanto, é necessário garantir a coleta e o uso de quantidades adequadas em massa de amostras que sejam homogêneas.

Agradecimentos: LAMES, IQ, UFG, Fundação RTVE, ANP, FUNAPE.

References:

[1] Guest JF, Greener MJ, Robinson AC, Smith AF. QJM. **2004**, vol. 97(8):477-88.

[2] Shokry E, Filho NRA. Biochem Med (Zagreb). **2017**, vol.27(3).



Estruturas de CRAMPS e peptídeos derivados determinadas por RMN de solução em meio mimético de membranas

Juliana B. Barra,^{a,*} Bruno P. O. Santos,^b Mariana T. Q. Magalhães,^b Octávio L. Franco,^c Luciano M. Lião.^a

^a LabRMN, Inst. de Química, Universidade Federal de Goiás, Brasil; ^b Lab. de Biofísica de Macromoléculas, Dept. de Bioquímica e Imunologia, Inst. de Ciências Biológicas, Universidade Federal de Minas Gerais, Brasil; ^c Centro de Análises Proteômicas e Bioquímicas, Pós-Graduação em Ciências Genômicas e Biotecnologia, Universidade Católica de Brasília, Brasil.

* Corresponding Email: buuenobarra@gmail.com

A partir da peçonha das serpentes *Crotalus durissus terrificus* e *Bothrops atrox*, foram identificados dois peptídeos viperídeos, relacionados à catelicidina crotalicidina e batroxidina, respectivamente. Ambas apresentam atividade antimicrobiana. As estruturas tridimensionais foram determinadas a fim de compreender os mecanismos de ação.

Palavras Chave: Peptídeos antimicrobianos, Catelicidinas, Estrutura 3D.

A disseminação de patógenos multirresistentes tornou-se uma preocupação no âmbito da saúde pública. Os peptídeos antimicrobianos são potenciais agentes terapêuticos devido à sua interação específica com a membrana de patógenos, como bactérias, fungos e parasitos [1]. Por uma estratégia de minimização das sequências, originou-se os peptídeos derivados Ctn[15-34] (KKRLKKIFKKPMVIGVTIPF-NH₂) e Btn[15-34] (KKRVKKFFRKPRVIGVTFPF-NH₂). Estes, por sua vez, foram minimizados e aprimorados em duas novas sequências, os peptídeos CrotAMP14 (KRLKKIFKKMIKIF-NH₂) e BotrAMP14 (KRWKKFFRKVIKFF-NH₂) [2]. Os espectros foram obtidos em espectrômetro Bruker Avance III 500 (IQ-UFG) a partir de soluções com 1,5 mM de peptídeo e 75 mM de SDS-d₂₅, e pH de 3,5 (derivados da batroxidina) e pH 6,5 (derivados da crotalicidina). Para o peptídeo Btn[15-34] (20-mer), correlações do tipo HN-HN foram identificadas entre as regiões 2Lys-17Thr, enquanto que correlações do tipo H α -HN (i,i+2) e (i,i+3) foram identificadas na porção N-terminal. Para o peptídeo derivado BotrAMP14 (14-mer), correlações do tipo HN-HN foram identificadas na faixa entre 2Arg-13Phe, bem como correlações H α -HN identificadas entre 1Lys-13Phe. Observou-se correlações do tipo H α -HN (i,i+2) entre os resíduos 2Arg-4Lys, 6Phe-8Arg e 8Arg-10Val e ainda correlações do tipo H α -HN (i,i+3) entre os resíduos 9Lys-12Lys e 10Val-13Phe. Para o CRAMP Ctn[15-34] poucas restrições de média distância foram observadas, H α -HN (i,i+3). Por fim, o CrotAMP14 (14-mer) apresenta correlações HN-HN e H α -HN sequenciais em toda sua extensão, além de algumas correlações médias (i,i+2), (i,i+3) e (i,i+4) na sua porção central. Esses resultados indicam que, mesmo na presença de micelas, os peptídeos Btn[15-34] e Ctn[15-34] apresentam uma porção N-terminal enovelada e uma porção C-terminal desenovelada.

Acknowledgements: INCT, CNPq, CAPES, FINEP, FAAPEG.

References:

- [1] Y. Zang & C. Cao, Magnetic Resonance Letters, 2022.
- [2] N. G. J. Oliveira, M. H. Cardoso, N. Velikova, M. Giesbers, J. M. Wells, T. M. B. Rezende, R. Vries, O. L. Franco, Scientific Reports, 2020, 10, 1-11.



Estudo de interações fármaco-excipiente entre Tartarato de Brimonidina e Maleato de Timolol na presença de alguns excipientes por análise térmica

Lucas Y. Sato (IC)^{a,*}, Maria Inês G. Leles (PQ)^a.

^aLaboratório de Métodos de Extração e Separação, Universidade Federal de Goiás (UFG), Goiânia, Brazil

* Corresponding Email: yugosato@discente.ufg.br

HIGHLIGHTS: Neste trabalho Tartarato de Brimonidina, Maleato de Timolol, Cloreto de Benzalcônio, Fosfato de Sódio dibásico anidro e Fosfato de sódio monobásico monoidratado foram analisados por TGA e DSC para checar por interações farmacêuticas entre ingrediente ativo e excipientes.

Palavras Chave: Brimonidina, Timolol, Excipientes, Compatibilidade, TGA, DSC.

RESUMO/ABSTRACT: O Tartarato de Brimonidina (BMT), um agonista α_2 -adrenérgico altamente seletivo e o Maleato de Timolol (TM), um bloqueador β não seletivo, são ambos medicamentos tópicos comumente utilizados na forma de colírios para tratar o glaucoma [1]. É importante realizar testes de pré-formulação com o ingrediente farmacêutico ativo (IFA) e os excipientes para checar por incompatibilidades entre eles. Isso é normalmente feito por meio de análise térmica (TGA e DSC). No presente trabalho, BMT, TM, Cloreto de Benzalcônio (BAC), Fosfato Dissódico Anidro (DSPA) e Fosfato Monossódico Monoidratado (MSPM) foram estudados termicamente, analisando tanto o IFA isolado quanto às misturas binárias de IFA + excipientes 1:1 (m/m). As curvas TG foram obtidas utilizando um TG/SDTA/851^o Mettler Toledo, aquecendo aproximadamente 7,000 mg de amostra de 25 a 1000 °C em um cadinho de α -Al₂O₃. As curvas DSC foram obtidas utilizando um DSC 822^o Mettler Toledo, aquecendo aproximadamente 5,000 mg de amostra em um cadinho de alumínio perfurado de 25 a 300 °C. Em ambas as análises, foi utilizada uma atmosfera de N₂ com fluxo de 50 mL min⁻¹ e taxa de aquecimento de 20 °C min⁻¹. A curva de DSC do BMT mostrou um pico endotérmico de fusão a 220 °C e dois picos exotérmicos em torno de 270 °C atribuídos à sua decomposição. A curva de DSC do TM mostrou dois eventos endotérmicos sucessivos em 210 °C e 220 °C, atribuídos à sua fusão e decomposição, respectivamente. Para as curvas de DSC das misturas binárias, em todas elas, cada evento térmico que ocorreu quando os componentes foram aquecidos separadamente ocorreram, também, na mesma temperatura quando combinados na mistura. Em conclusão, uma formulação de BMT ou TM na presença dos excipientes BAC, DSPA e MSPM é possível já que não ocorreram interações entre eles.

Acknowledgements: Os autores gostariam de agradecer a FUNAPE pela gestão do projeto.

References:

Lee AJ, McCluskey P. Fixed combination of topical brimonidine 0.2% and timolol 0.5% for glaucoma and uncontrolled intraocular pressure. Clin Ophthalmol. 2008 Sep;2(3):545-55. doi: 10.2147/oph.s3840. PMID: 19668752; PMCID: PMC2694019.



Oxidação catalítica da hidroquinona por um complexo metalaciclofano de cobre(II) irradiado

Jackson J. Santos (IC),¹ Maria Clara Oriol Edimio Souza (PG),¹ Pedro Victor Valadares(PG),¹ Renato Rabelo (PQ),¹ Lucas Hoffmann Gregghi Kalinke (PQ),² Joan Cano (PQ),⁴ Lívia Flório Sgobbi(PQ),¹ Danielle Cangussu (PQ).¹

¹Departamento de Química, UFG; ²Instituto Federal de Goiás, Campus Anápolis IFG; ⁴Instituto de Ciência Molecular, Universitat de València.

Jackson.souza@discente.ufg.br; danielle_cangussu@ufg.br

HIGHLIGHTS: Neste trabalho realizou-se o estudo da fotoatividade de um complexo metalaciclofano de cobre(II) com um ligante oxamato e um estudo comparativo da atividade catalítica do complexo antes e depois da irradiação, frente à oxidação da hidroquinona.

Palavras Chave: Química de coordenação, Fotoquímica, Catálise, Biosensores.

RESUMO/ABSTRACT:

Enzimas a base de Cu(II) são amplamente estudadas por desempenhar importantes funções biológicas. As enzimas oxidase possuem diversas aplicações biotecnológicas, em especial biosensores. Apesar da importância dessas enzimas, seu uso é limitado devido à baixa estabilidade térmica e a meios não fisiológicos. Visando minimizar esses problemas, pesquisas na área de síntese de complexos podem levar a compostos que mimetizam as funções enzimáticas como a de catalisadores de reações-modelo para biosensores. Neste trabalho estudou-se o dímero de Cu(II) de fórmula $[Cu_2(acriba)_2(H_2O)_2]^{4+}$ (**1**) utilizando o ligante $Et_2H_2acriba$ [onde *acriba* = *N,N'*-2,7-diaminoacridina-bis (oxamato)], que apresentou funções catalíticas para oxidação da hidroquinona (HQ). O composto **1** irradiado ($\lambda_{m\acute{a}x}=250nm$) apresentou uma mudança na sua função catalítica aumentando a velocidade da reação de oxidação da hidroquinona (HQ) para benzoquinona (BQ) (Figura 1).

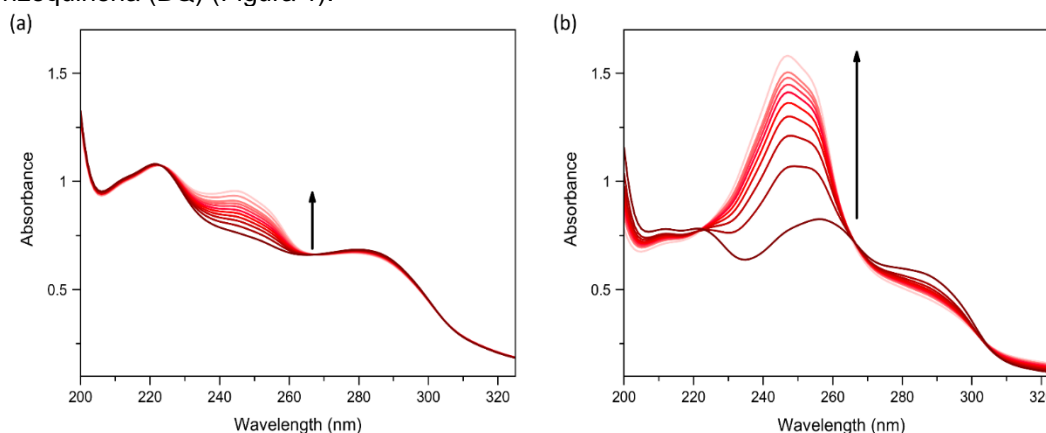


Figura 1. Evolução do espectro de absorção de uma solução aquosa de HQ 75 μ M e composto **1** (15 μ M) antes (a) e depois (b) da irradiação com luz UV por 5 minutos. As setas indicam o curso da reação de oxidação.



PERÓXIDO DE HIDROGÊNIO DE URÉIA (UHP) E LACTATO DE ETILA COMO SISTEMA MAIS VERDE NA SELENILAÇÃO DE IMIDAZO-HETEROARENOS

João Vitor Souza de Oliveira^{a*}, Isis Juliane Arantes Granja^a, Antonio Marciel de Souza^a, Jamal Rafique^{a,b}, Sumbal Saba^a

^a Instituto de Química – Universidade Federal de Goiás. Goiânia, Brasil

* Autor correspondente: oliveira.joao@discente.ufg.br

HIGHLIGHTS: Protocolo sustentável para a selenilação regioseletiva de imidazo-heteroarenos, livre de metais e sem catalisadores. A reação formou a molécula alvo com 92% de rendimento e possui bom desempenho em escala grama.

Palavras Chave: Selenilação, imidazo[2,1-b]tiazol, imidazo[1,2-a]piridina e química verde

RESUMO/ABSTRACT: Nos últimos anos, a funcionalização de compostos heterocíclicos nitrogenados de 5 membros tem sido um tema emergente em síntese orgânica. Tais compostos são conhecidos por sua bioatividade, apresentando propriedades anti-Alzheimer, anti-inflamatória, antioxidante e anticancerígena. A construção da ligação C-Se é muito importante em síntese orgânica, pois essas estruturas exibem propriedades biológicas fascinantes e propriedades medicinais. Assim, este trabalho relata pela primeira vez a C(sp²)-H selenofuncionalização do núcleo imidazo[2,1-b]tiazol mediada por peróxido de hidrogênio-ureia, utilizando lactato de etila como solvente. Essa abordagem é regioseletiva, ampla e livre de metal, e atuou de forma eficaz usando meio equivalente molar de disselenetos diorganílicos, sem necessidade de qualquer catalisador, em pressão atmosférica. A reação também foi estendida com sucesso para imidazo[1,2-a]piridina e imidazo[1,2-a]pirimidina. O lactato de etila é uma alternativa sustentável e economicamente viável quando comparado a solventes tradicionais. Da mesma forma, o peróxido de hidrogênio-ureia é considerado um agente oxidante seguro, barato, estável e verde. Com as condições otimizadas, a aplicabilidade de vários disselenetos de imidazotiazóis, além de imidazóis como a imidazo[1,2-a]piridina e imidazo[1,2-a]pirimidina, foram avaliadas. A selenilação de imidazotiazóis funcionou de forma eficaz para diferentes disselenetos, e a utilidade desta metodologia, a ampliação do escopo em relação ao substrato e a influência da fração imidazo[2,1-b]tiazol substituída foram avaliadas. A reação formou a molécula alvo com rendimento de 92%.

References:

Obaid, R. J., Mughal, E. U., Naeem, N., Al-Rooqi, M. M., Sadiq, A., Jassas, R. S., ... & Ahmed, S. A. (2022). Pharmacological significance of nitrogen-containing five and six-membered heterocyclic scaffolds as potent cholinesterase inhibitors for drug discovery. *Process Biochemistry*. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.procbio.2022.06.009>

Rafique, J., Rampon, D. S., Azeredo, J. B., Coelho, F. L., Schneider, P. H., Braga, A. L. (2021). Light-Mediated Seleno-Functionalization of Organic Molecules: Recent Advances. *The Chemical Record*, 2739-2761. DOI: <https://doi.org/10.1002/tcr.202100006>



Prospecção de compostos aromáticos em *Couropita guianensis* por HS-GC/MS para aplicação na indústria de cosméticos

Aline M. Aguiar,^{a*} Lilian F. de Oliveira,^a Dayane C. da Costa,^a Nelson R. Antoniosi Filho^a

^a Laboratório de Métodos de Extração e Separação (LAMES), Instituto de Química, Universidade Federal de Goiás, Goiânia, Brasil.

* E-mail correspondente: aline_moreira@discente.ufg.br

HIGHLIGHTS: Objetivou-se caracterizar os principais compostos orgânicos voláteis (VOC's) da flor Abriçó-de-macaco (*Couropita guianensis*) por HS-GC/MS visando a determinação de moléculas aromáticas relevantes para aplicação na indústria de cosméticos, sob o viés da química ambiental.

Palavras Chave: *Couropita guianensis*; compostos orgânicos voláteis; GC; cosméticos; química ambiental.

RESUMO/ABSTRACT: As empresas de aromas e fragrâncias inseridas no mercado global da indústria 4.0 estão constantemente em busca de produtos inovadores, *ecofriendly*, eficientes e de baixo custo. A competição nesse segmento industrial demanda pesquisas de âmbito sustentável para prospectar novas espécies aromáticas que se compõe de moléculas já consolidadas para uso em produtos de higiene pessoal e cosméticos. Essencialmente, os ingredientes de alto valor agregado para perfumaria carecem de grande quantidade de matéria-prima para produção de poucas quantidades de extratos de plantas, denominados de óleos essenciais, que são constituídos por complexas misturas de metabólitos secundários, os terpenos. Dado essa informação, a extração infrene do óleo essencial e o extrativismo exacerbado de espécies aromáticas potencializa a escassez de plantas no ecossistema, ameaçando espécies de extinção, como é o caso em especial da árvore pau-rosa (*Aniba rosaeodora*), cujo óleo essencial extraído da madeira é constituído, majoritariamente, por linalol (3,7-dimetilocta-1,6-dien-3-ol), ingrediente usado no perfume Chanel nº5. Com o propósito de encontrar opções para o abastecimento do mercado de perfumaria, enaltecendo a biodiversidade local e a preferência por métodos de extração e análise inerentes aos princípios da química ambiental, o presente trabalho emprega técnica de extração via *headspace* (HS) juntamente com a cromatografia gasosa (GC) e espectrometria de massas (MS), a fim de minimizar a quantidade de matéria-prima utilizada nessa triagem, proporcionando resultados confiáveis do perfil do óleo essencial. A espécie *Couropita guianensis* Aubl., popularmente conhecida pelo nome Abriçó-de-macaco, apresentou uma fração volátil com alto teor de linalol (33,45%) e de eugenol (47,96%) quando comparado com trabalhos na literatura que utilizam grande quantidade de biomassa (planta) e grandes volumes de solvente para extração da porção volátil, tendo potencial de se tornar matriz alternativa para produção desses ingredientes de uso no setor de perfumaria.

Referências bibliográficas

a) COSTA, D.C. TESE. 2021. b) KHAN, A. M.; SHIVASHANKARA, K.S.; ROY, T.K. Journal of Horticultural Sciences, 2014, 9(2):161-165. c) May, P.H.; Barata, L.E.S. *Economic Botany*, 2004, 58(2):257-265.



Uso de eletrodos portáteis e nanocristais de TiO₂-Co para detecção seletiva de AMX

Leyllanne K. A Souza^a, Habledias A Silva-Neto^a, Danielly S Rocha^a, Fabiane C de Abreu^b, Anielle CA Silva^b, Wendell K T Coltro^a, Paulo T Garcia^c

^a Instituto de Química, Universidade Federal de Goiás, Goiânia, Brasil. ^b Instituto de Ciências, Universidade Federal do Sul e Sudeste do Pará (UNIFESSPA), Marabá, Brasil.

^c Universidade Federal de Alagoas (UFAL), Instituto de Química, Maceió, Brasil,

* Corresponding Email: leylanearaujo@gmail.com

HIGHLIGHTS: Eletrodos portáteis modificados via drop casting com nanocristais de TiO₂-Co para determinação eletroquímica de AMX em formulações farmacêuticas.

Palavras Chave: Penicilina, Análise farmacêutica; Eletroanalítica; Plataformas portáteis; Nanomaterial.

RESUMO/ABSTRACT:

A amoxicilina um dos antibióticos mais amplamente utilizados no mundo¹. No Brasil, nos últimos sete anos, foram produzidos aproximadamente 800 milhões de antibióticos, e 32% desse total corresponde ao consumo de amoxicilina². Além disso, cerca de 60% da amoxicilina ingerida é excretada praticamente inalterada após algumas horas². Dessa maneira é importante propor métodos analíticos que permitam o monitoramento ambiental, bem como o controle de qualidade da AMX. Nesse estudo, propomos a combinação de eletrodos portáteis, confeccionados pela combinação de *stencil-printed carbon electrodes* (SPCE) e nanocristais de dióxido de titânio dopado com cobalto (TiO₂-Co) para detecção eletroquímica de AMX. O SPCE foi fabricado com uma geometria de três eletrodos: trabalho (ET), referência (ER) e auxiliar (EA). As caracterizações morfológicas, estruturais e eletroquímicas foram cuidadosamente realizadas. As caracterizações morfológicas mostraram que os nanocristais de TiO₂-Co foram distribuídos sobre a superfície do ET. Considerando as condições químicas e eletroquímicas para a voltametria de onda quadrada (VOQ), as medidas foram realizadas em tampão fosfato (PBS) 0,1 mol L⁻¹ em pH 7,0 utilizando os parâmetros otimizados de frequência, *step*, amplitude, tempo de deposição e potencial de deposição e de 5 Hz; 0,004 V; 0,04 V; 10 s 0,0 V vs Ag, respectivamente. A detecção de AMX (pH 7,0) por VOQ obteve uma linear ($R^2=0,99$) na faixa de 20 a 150 $\mu\text{mol L}^{-1}$, os limites de detecção (LOD) e de quantificação (LOQ) foram estimados em 5,8 $\mu\text{mol L}^{-1}$ a 19,5 $\mu\text{mol L}^{-1}$



respectivamente. Estudos de repetibilidade (intra-dia e inter-dia) dos eletrodos modificados revelaram valores de desvio padrão relativo que variaram de 5,8 a 8,1%. A seletividade indicou baixa interferência ($\leq 5\%$) aos principais compostos tradicionalmente encontrados em formulações farmacêuticas. Além disso, os resultados obtidos com $\text{TiO}_2\text{-Co/SPCE}$ para amostras reais farmacêuticas foram comparados com espectroscopia UV-Vis e foi possível inferir que não houve diferenças estatísticas entre os métodos com nível de confiança de 95%. A combinação proposta de SPCE modificado com novos nanocristais de $\text{TiO}_2\text{-Co}$ é uma estratégia atraente para análise AMX.

References:

1. Wong, A. et al. *Talanta* 206, 120252 (2020)
2. W.H. Organization, WHO Report on Surveillance of Antibiotic Consumption (2018)



Produção e aplicação de extratos de flores e frutos como indicadores ácido-base em aulas de Química Analítica Quantitativa Experimental

Karina Eliane Quege, Antonio Marciel de Souza Neto, Dion Carlos Moreira Filho, Frederico Gomes Pinheiro Fraga, Gabriel Brito Carneiro, Gabriel Dioara Silva Garcia, Igor Gabriel Assis Melo, Joao Paulo Santos Ferreira, Renata Ester dos Santos Ribeiro, Rhyan César Santos Dias, Paulo Cesar de Souza Guerra, Sandro Alves Nogueira, Wendell Karlos Tomazelli Coltro, Nelson Roberto Antoniosi Filho*

Instituto de Química, Universidade Federal de Goiás, Goiânia, Brasil.

* Email: nelsonroberto@ufg.br

HIGHLIGHTS: Esse trabalho explora o uso de indicadores ácido-base naturais, obtidos de frutas e flores, em aulas de Química Analítica Qualitativa Experimental, visando o ensino de Química Verde.

Palavras Chave: Antocianinas, Sustentabilidade, Extração, Titrimetria, Volumetria

RESUMO: Apesar de se saber que a fenolftaleína causa câncer e que a maioria dos Indicadores ácido-base convencionais têm sua ecotoxicidade, mutagenicidade e genotoxicidade desconhecidas, a maioria desses produtos sintéticos ainda é normalmente utilizada em titrimetria em aulas experimentais de graduação, e até mesmo em operações analíticas industriais. O problema se agrava quando se observa que os produtos gerados pela titrimetria, contendo tais indicadores sintéticos, são descartados em efluentes domésticos e industriais, sem que se conheça sua capacidade de depuração e seus impactos sobre os seres vivos, em especial da biota aquática. Nesse sentido, a escolha de indicadores ácido-base mais seguros e sustentáveis vem ganhando força¹, especialmente pelo fato de algumas flores e frutos apresentarem substâncias como antocianinas que mudam de cor em função do pH do meio. Assim, aproveitando as aulas de Química Analítica Quantitativa Experimental para a Graduação em Química da UFG no primeiro semestre de 2023, efetuou-se a obtenção de extratos de pigmentos de flores e frutos, os quais foram avaliados em função da adequabilidade para uso como indicadores ácido-base em titulações ácido forte-base forte (HCl e NaOH) e ácido fraco-base forte (AAS e NaOH). Para isso produziu-se extratos das flores de Primavera, Hibisco, Capota Vermelha, Crista Pluma, Alamanda Vermelha e Rabo de Arara e dos frutos de Amora e Uva Vitória. Os extratos de Amora e de Primavera se mostraram como sendo os mais adequados comparados a indicadores convencionais como fenolftaleína e vermelho de metila. Assim comprovou-se que utilizando plantas altamente disponíveis e que não apresentam toxicidade, é possível obter indicadores ácido-base de alta qualidade, capazes de serem aplicados em aulas de graduação e também em outras atividades acadêmicas e industriais, estimulando o discente a conhecer simultaneamente, de forma prática, sobre Química Analítica e Química Verde.

Agradecimentos: IQ-UFG



SEMANA DA QUÍMICA 2023

19 A 22 DE JUNHO

IQ
INSTITUTO DE QUÍMICA



UFG
UNIVERSIDADE FEDERAL DE GOIÁS



XVII SEMANA DA QUÍMICA
IV WORKSHOP DA PÓS GRADUAÇÃO

Referências:

[1] Guimarães W., Alves M.I.R., Antoniosi Filho N.R. *Quim. Nova*, 2012, Vol. 35, Nº 8, 1673-1679, 2012



Estudos Reacionais Para a Síntese Branda de Cetoimidazóis

José S. S. Neto,^{a*} Filipe T. Coelho,^a Leonardo V. E. Guimarães,^a Luciano Morais Lião,^a Felipe Lange Coelho^a

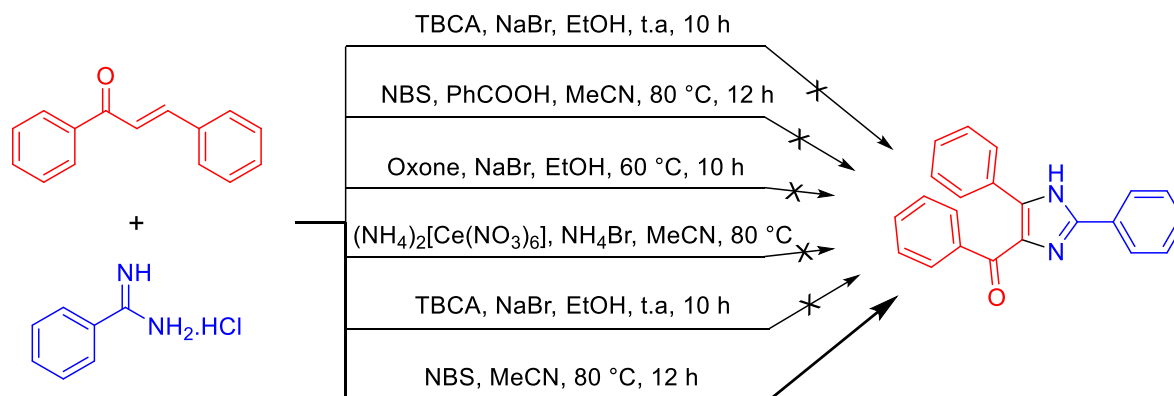
^a Instituto de Química, Universidade Federal de Goiás, Goiânia, Brasil.

* Corresponding Email: joseneto.qmc@gmail.com

HIGHLIGHTS: Investigação de condições reacionais sustentáveis para a obtenção de cetoimidazóis.

Palavras Chave: Síntese orgânica, imidazol, química verde, amidinas, chalconas

O núcleo imidazol é considerado como um esqueleto heterocíclico proeminente¹ devido às suas amplas aplicações que podem ser encontradas extensivamente, a exemplo de fármacos², pesticidas³ além de suas potenciais aplicações em áreas fotofísicas, como dispositivos eletroluminescentes orgânicos (OLEDS)⁴. Diversas metodologias para a síntese de imidazóis são relatadas na literatura. Entretanto, muitas delas fazem uso de alta temperatura, usos de metais de transição como sistema catalítico e atmosfera inerte.⁵ Assim, o desenvolvimento de métodos altamente eficientes, com condições brandas e sustentáveis para a obtenção de tal núcleo é altamente desejável e de grande importância para a química moderna. Considerando a importância do núcleo imidazol e nosso constante interesse no desenvolvimento de metodologias sustentáveis, realizamos a síntese de 4-acil-1*H*-imidazol a partir de fenilamidina e *trans*-chalcona. Para tanto, realizamos um estudo sistemático investigando abordagens sintéticas diferentes a fim de se encontrar a condição ótima para a obtenção do produto de interesse. Diversas condições reacionais foram testadas, sendo aquelas com rendimentos inferiores a 20% descartadas. Algumas das condições estudadas estão no Esquema 1, onde o melhor resultado foi obtido empregando *N*-bromosuccinimida (50 mol%) em acetonitrila, aquecendo a reação a 80 °C por 10h, o que levou a obtenção do produto em 60% de rendimento. A partir desse resultado, o método está em fase de otimização (solvente, tempo de reação, temperatura, quantidade dos reagentes).



Esquema 1: Estudo das condições reacionais na síntese de cetoimidazóis.

Referências:

1. a) X. Zhao, G. Wu, Y. Zhang, J. Wang, *J. Am. Chem. Soc.* **2011**, *133*, 3296–3299; b) D. Wang, N. Li, M. Zhao, W. Shi, C. Ma, B. Chen, *Green Chem.* **2010**, *12*, 2120–2123; c) D. Wang, M. Zhao, X. Liu, Y. Chen, N. Li, B. Chen, *Org. Biomol. Chem.* **2012**, *10*, 229–231; d) Y. Yang, Y. Zhang, J. Wang, *Org. Lett.* **2011**, *13*, 5608–5611;
2. a) S. Kantevari, S. V. Vuppalapati, D. O. Biradar, L. Nagarapu, *J. Mol. Catal. A* **2007**, *266*, 109–113; b) L. Nagarapu, S. Apuri, S. Kantevari, *J. Mol. Catal. A* **2007**, *266*, 104–108; c) Z. Zhao, D. D. Wisnoski, S. E. Wolkenberg, W. H. Leister, Y. Wang, C. W. Lindsley, *Tetrahedron Lett.* **2004**, *45*, 4873–4876.
3. a) W.-J. Li, Q. Li, D.-L. Liu, M.-W. Ding, *J. Agric. Food Chem.* **2013**, *61*, 1419–1426; b) J.-H. Choi, N. Abe, H. Tanaka, K. Fushimi, Y. Nishina, A. Morita, Y. Kiriwa, R. Motohashi, D. Hashizume, H. Koshino, *J. Agric. Food Chem.* **2010**, *58*, 9956–9959.



SEMANA DA QUÍMICA 2023

19 A 22 DE JUNHO

IQ
INSTITUTO DE QUÍMICA



UFG
UNIVERSIDADE FEDERAL DE GOIÁS



XVII SEMANA DA QUÍMICA
IV WORKSHOP DA PÓS GRADUAÇÃO

4. A. P. Kulkarni, C. J. Tonzola, A. Babel, S. A. Jenekhe, *Chem. Mater.* **2004**, *16*, 4556–4573.

5. D.A. Shabalin; J. E. Camp *Org. Biomol. Chem.*, 2020, 18, 3950-3964.



Complexos $RuCl_2(p\text{-cimeno})$ -Aminas como catalisadores bifuncionais para a fixação química de CO_2 com epóxidos

Emily T. Silva^a, Vinicius K. Tomazett^a, Gustavo H. C. Masson^b, Valdemiro P. Carvalho^{b,*}, Rafael Pavão Das Chagas^{a,*}

^a Instituto de química, Universidade Federal De Goiás, Goiânia, GO, Brasil.

^b Universidade Estadual Paulista Júlio de Mesquita Filho, Faculdade de Ciências e Tecnologia de Presidente Prudente.

Corresponding Email: rpchagas@ufg.br; valdemiro.carvalho@unesp.br; viniciustomazett2@ufg.br; emily.teles@discente.ufg.br

HIGHLIGHTS: Complexos de rutênio como catalisadores na síntese de carbonatos cíclicos sob condições brandas com baixa carga catalítica e com bons resultados de conversão e seletividade.

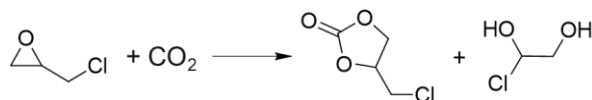
Palavras Chave: carbonato cíclico, complexos de rutênio, CO_2 , catálise.

Introdução

A Conversão de CO_2 a carbonato cíclico tem se mostrado uma alternativa para fixação química do CO_2 . Diversas substâncias tem sido testadas como catalisadores para a síntese de carbonatos cíclicos a partir da cicloadição de CO_2 a epóxidos entre elas estão complexos metálicos, sais orgânicos¹.

Resultados

Seis complexos do tipo $[RuCl_2(p\text{-cimeno})(amina)]^2$ com diferentes aminas como ligantes ancilares, foram testados para a síntese de carbonatos cíclicos a partir da cicloadição de CO_2 a epóxidos conforme **Esquema 01**, onde utilizou-se a epícloridrina como substrato modelo.



Esquema 01: Condição reacional: Substrato (6,25 mmol), catalisador (0,25 mol%), 80 °C, 24 h, 1 bar de CO_2 sem solvente.

Os resultados de conversão e seletividades foram obtidos por análise de RMN 1H da mistura reacional e estão listados na tabela abaixo (**Tabela 01**).

Tabela 01: Resultados dos testes catalíticos.

Catalisador	RuN (PIP)	RuN (POP)	RuN (PEP)	Ru N7	Ru N6	Ru N5
Conv. (%)	35,5	75,6	58,5	96,5	18,0	40,8
Selet. (%)	93	97	96	91	73	96

Conclusão

Foi observado que os complexos apresentaram boa atividade catalítica, com destaque para o complexo **RuN7** com 96% de conversão e **RuN(POP)** com 75% de conversão.

Agradecimentos: Agradecimentos ao CNPQ (350717/2023-0) e a CAPES pelo auxílio financeiro.

Referências:

- Bezerra, W.; Milani, J. L.; Franco, C.; Martins, F.; de Fátima, Â.; Mata, Á.; Das Chagas, R. *Molecular Catalysis* **2022**, C0m530, 112632.

Oliveira, D. P.; Cruz, T. R.; Martins, D. M.; Maia, P. I. S.; Machado, A. E. H.; Bogado, A. L.; Goi, B. E.; Lima-Neto, B. S.; Carvalho-Jr, V. P. *Catalysis Today* **2021, *381*, 34-41.**



CO₂: Capture and Fixation to Epoxides by Supported Ionic Liquids

Blendo Almeida da Silva,^aVinicius Kalill Tomazetti^a, Rafael Pavão das Chagas^a, Muhammad Irfan Qadir^a

^a Institute of Chemistry, University Federal of Goiás, Goiânia, Brazil.

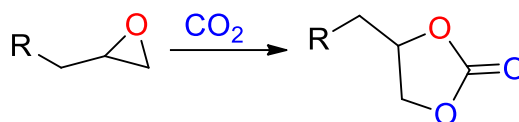
* Corresponding Email: ablendo@discente.ufg.br

HIGHLIGHTS: The fixation of CO₂ for the formation of cyclic carbonates is an excellent strategy to reduce this gas in the atmosphere and invests in the production of chemical products with high added value. Determining the conversion and selectivity through tests varies the pressure and temperature.

Palavras Chave: CO₂, cyclic Carbonate, epoxides.

RESUMO/ABSTRACT: Carbon dioxide (CO₂) capturing and activation with more efficient catalysts, is an excellent strategy to reduce this gas in the atmosphere and, at the same time, invest in the production of value-added chemical products. This approach is particularly notable in the formation of cyclic carbonates, formaldehyde and methanol [1]. Fixation of CO₂ to generate cyclic carbonates is widely recognized as one of the most efficient synthetic routes due to its atom economy and broad applicability [2]. The scheme below illustrates the CO₂ fixation process for the formation of cyclic carbonates.

(Scheme1)



Scheme 1. CO₂ fixation for carbonate formation.

Thus, this work aims to carry out the catalytic study of the SILPs (supported ionic liquid phases) catalysts for the epoxide conversion to cyclic carbonates under mild reaction conditions. For the tests, a Fischer-porter reactor was used in which 50 mg of catalyst and 6.25 mmol of epichlorohydrin were used for 24 h. Conversion and selectivity was determined by 1H NMR analysis using CDCl₃. Initially, tests were carried out keeping the temperature constant at 100°C and changing the pressure and later tests were carried out keeping the pressure constant and varying the temperature. The results are shown in Figure 1 and 2 below.

Figure 1. Catalytic tests with temperature variation and constant pressure at 4 bar.

Figure 2. Catalytic tests with pressure variation and constant temperature at 100°C.



SEMANA DA QUÍMICA 2023

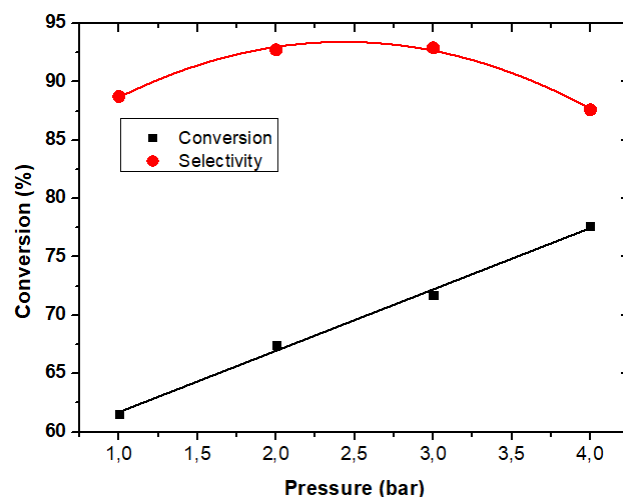
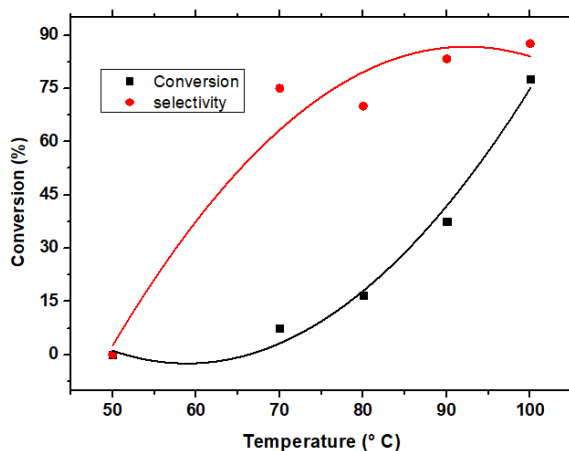
19 A 22 DE JUNHO

IQ
INSTITUTO DE QUÍMICA

UFG
UNIVERSIDADE FEDERAL DE GOIÁS



XVII SEMANA DA QUÍMICA
IV WORKSHOP DA PÓS GRADUAÇÃO



Through the above results, it was possible to observe a trend of increase in the conversion as the pressure and temperature increased. Thus, it was observed that the optimal reaction temperature was 4 bar and 100°C, where obtaining the best conversion and selectivity results with the BMI catalyst in epichlorohydrin was possible.

References:

- Sheng, T., Ou, J., Zhao, T., Yang, X., & Peng, Y. X. (2023). Efficient fixation of CO₂ into cyclic carbonate catalyzed by choline bromide/imidazole derivatives-based deep eutectic solvents. *Molecular Catalysis*, v. 536, p. 112907, 2023.
- Yang, J., Chen, P., Pan, Y., & Liang, Y. (2022). Fixation of Carbon Dioxide with Functionalized Ionic Liquids. *Asian Journal of Organic Chemistry*, v. 11, n. 11, p. e202200527, 2022.



Digital microfluidics as lab-on-a-chip: from sample preparation to colorimetric sensing of S-Nitrosocysteine

Danielly S. Rocha,^{a,*} Richard P. S. de Campos,^b Habdias A. Silva-Neto,^a Gerson D. F. Júnior,^a Fethi Bedioui,^c Wendell K. T. Coltro^{a,d}

^aInstitute of Chemistry, Federal University of Goiás, Goiânia, Goiás, Brazil. ^bNational Research Council Canada, Edmonton, Alberta, Canada. ^cInstitute of Chemistry for Life and Health Sciences i-CLeHS, Chimie ParisTech, Paris, France. ^dNational Institute of Science and Technology in Bioanalysis, Campinas, São Paulo, Brazil.

*Corresponding Email: danielly_rocha@discente.ufg.br

HIGHLIGHTS: A strategy for background light control and colorimetric detection on DMF was proposed
Sample preparation and colorimetric detection of S-nitrosocysteine was performed
Biological sample were successfully analyzed

Key words: *luminosity control, droplet movement, on-chip decomposition, colorimetric sensor, S-nitrosothiols.*

ABSTRACT: Digital microfluidics (DMF) is a versatile lab-on-a-chip platform that allows integration with several types of sensors and detection techniques, including colorimetric sensors. However, there is a challenge involving integration of DMF with optical detection techniques regarding light homogeneity. Here, was proposed, for the first time, the integration of DMF chips into a mini studio containing a 3D-printed holder with UV-LEDs to promote sample degradation and colorimetric sensing directly on chip by using of webcam. As a proof of concept, the feasibility of the integrated system was successfully used for indirect analysis of nitrosocysteine (CySNO); an important biomarker for diseases such as Parkinson and Alzheimer. The droplets movement were controlled by MicroDrop software. Droplet driving potentials ranged from 90 and 120 V, frequency of 10 kHz and time intervals ranging from 1 to 5 s. To promote the sample preparation, the photolytic cleavage of CySNO to nitrite (NO_2^-) was performed using a low-cost 3D printed holder. For decomposition of CySNO on the DMF chip, an aliquot of standard solution or sample (9 μL) was positioned on reservoir region and exposed to UV light for 15 minutes. Posteriorly, the samples volume of approximately 1 μL were moved to the detection zones to be mixed with a drop of Griess reagent. Finally, the colorimetric analysis was performed. Considering the analytical parameters, the proposed approach revealed linear behavior in the CySNO concentration range between 12.5 and 400 $\mu\text{mol L}^{-1}$ and a limit of detection equal to 2.8 $\mu\text{mol L}^{-1}$. Synthetic serum and human plasma samples were successfully analyzed, and the achieved results did not statistically differ from the data recorded by spectrophotometry at the confidence level of 95%, thus indicating the huge potential of the integration between DMF and mini studio to promote complete analysis of low-molecular weight compounds.

Acknowledgements: We thank CNPq; INCTBio; UFG; GME and Wheeler Lab.

References:

Choi, Kihwan et al. *Annual review of analytical chemistry*, v. 5, p. 413-440, 2012.



Aplicação do modelo classificatório de Linear Discriminant Analysis na investigação de similaridades e dissimilaridades do perfil químico do cerúmen entre animais domésticos e selvagens.

Ícaro do Nascimento Camelo,^{a,*} João Marcos G. Barbosa,^b Nelson Roberto Antoniosi Filho^b

^a LAMES, Instituto de Química, Universidade Federal de Goiás, Goiânia, Brasil. ^b

Corresponding Email: icaronascimento@discente.ufg.br

Palavras Chave: Cerúmen, cromatografia gasosa, Linear Discriminant Analysis (LDA), hierarchical cluster analysis (HCA).

HIGHLIGHTS: A análise química de voláteis em cerúmen permite diferenciar animais domesticados e selvagens.

RESUMO: Desde a pré-história o ser humano submete variados animais ao processo de domesticação, implicando em alterações físicas e químicas das características entre os animais selvagens e domesticados¹, o que vem sendo evidenciado por estudos genômicos². O intuito deste trabalho é ilustrar a capacidade de discriminação entre animais domésticos e selvagens a partir de informações dos metabólitos obtidos no cerúmen (cerumenômica) analisados por HS/GC-MS, aplicando um método de classificação Linear Discriminant Analysis (LDA). Ao todo amostras de 20 animais foram analisadas, sendo 10 selvagens e 10 domesticados. A matriz de dados foi adquirida através dos cromatogramas do HS/GC-MS e para cada amostra foram integrados e gerados uma lista dos compostos alinhados. Cada linha da matriz representou uma amostra e cada coluna uma “feature” (relação massa/carga). Em seguida aplicou-se uma análise não supervisionada de agrupamento hierárquico (HCA). Para a visualização do agrupamento de amostras foi utilizada a distância de Hamming para estimar a similaridade entre as observações. Os metabólitos mais importantes para a discriminação de domésticos e selvagens foram incluídos de acordo com o método de classificação LDA, na qual verificou-se alguns parâmetros para a realização da mesma. Obteve-se um erro estimado de 10% em cada classe, ou seja, dos 20 animais analisados, 9 foram corretamente classificados como selvagens e 9 foram classificados corretamente como domésticos, mostrando o potencial da técnica cerumenômica. Os metabólitos responsáveis por essa discriminação evidenciam as diferenças de estresse oxidativo entre animais domesticos e selvagens.. Assim, o método LDA se mostrou eficaz para a classificação das amostras de animais selvagens e domésticos, visto que não houve limitações do mesmo com o banco de dados.

Agradecimentos: LAMES, IQ, UFG, Fundação RTVE, ANP, FUNAPE.

References:

Wang, G. D., Xie, H. B., Peng, M. S., Irwin, D. & Zhang, Y. P. Domestication genomics: Evidence from animals. *Annu. Rev. Anim. Biosci.* 2, 65–84 (2014).



Desenvolvimento de uma nova metodologia para otimização de funcionais RSH pelo esquema J-GAP em sistemas orgânicos solvatados

Pedro H. Ferreira Matias (PG)*^a, Mateus Rodrigues Barbosa (PG)^a, Heibbe Cristhian Benedito de Oliveira (PQ)^a

^a Laboratório de Estrutura Eletrônica e Dinâmica Molecular, Instituto de Química, Universidade Federal de Goiás, Goiânia, Brasil
* Corresponding Email: phfmatias@discente.ufg.br

HIGHLIGHTS: Uma metodologia alternativa foi desenvolvida para otimização de funcionais da classe RSH para sistemas orgânicos solvatados, como forma de suprir a lacuna presente na literatura. A metodologia proposta provou-se efetiva em propriedades fotofísicas.

Palavras Chave: DFT, JGAP, Sistemas Solvatados.

Discrepâncias entre resultados teóricos e experimentais podem ser atribuídos pela modelagem molecular utilizada¹. Combinar o efeito do ambiente químico com a adição da otimização de funcionais ocasionam em barreiras teóricas. Ao empregar metodologias de solvatação implícita em conjunto do processo de otimização, são obtidos valores artificialmente baixos do parâmetro ω (bohr⁻¹)². Em contraste, metodologias de solvatação explícitas dos orbitais HOMO e LUMO apresentam-se espalhados pelo solvente ao contrário do soluto³.

Para circunvir estas barreiras, a otimização de funcional na presente metodologia será aplicada por meio do esquema J-GAP, utilizando a metodologia de solvatação explícita realizada pelo método S-QM/MM, onde as moléculas de solvente serão substituídas por pontos de carga pela aproximação ASEC⁴ em conjunto com a aproximação FEG⁵ para permitir o relaxamento da geometria do soluto em relação às cargas do solvente. O objeto de estudo "Para-Nitroanilina" foi selecionado por ser utilizado como sistema teste de propriedades na literatura devido a seu sistema π -conjugado com alta deslocalização π e mecanismo push-pull.

Todas as simulações foram executadas pelo programa computacional DICE em conjunto com o pacote de química computacional Gaussian 16⁶, como descrito nos trabalhos de Coutinho e colaboradores^{4,5,7}. A otimização de funcional foi realizada pelo programa de autoria própria *Golden Omega* desenvolvido na linguagem de programação Python 3.x/C++. O Algoritmo de busca *Golden Ratio* foi implementado para redução do custo computacional. O procedimento foi realizado de forma a minimizar a função custo J-GAP.

A inserção do algoritmo de busca levou a uma redução de 10 vezes o custo computacional, saindo de um escopo de 300 cálculos quanto-mecânicos para 27. Munido do sistema solvatado e otimizado obtemos os seguintes erros para absorção máxima em relação ao experimental^{8,9}: 10.76% (Ciclohexano); 14.15% (Dioxano); 17.23% (Dimetilsulfóxido); 9.92 (Água). Dentre todas as metodologias testadas a proposta no presente trabalho foi com a maior acurácia.

Agradecimentos: CNPQ, LAMCAD, UFG, IQ-UFG, LEEDMOL

References:



SEMANA DA QUÍMICA 2023

19 A 22 DE JUNHO

IQ
INSTITUTO DE QUÍMICA



UFG
UNIVERSIDADE FEDERAL DE GOIÁS



XVII SEMANA DA QUÍMICA
IV WORKSHOP DA PÓS GRADUAÇÃO

1. de Queiroz, T. B.; Kümmel, S. Charge-transfer excitations in low-gap systems under the influence of solvation and conformational disorder: Exploring rangeseparation tuning. *The Journal of Chemical Physics* 2014, 141, 084303.
2. Bhandari, S.; Cheung, M. S.; Geva, E.; Kronik, L.; Dunietz, B. D. Fundamental Gaps of Condensed-Phase Organic Semiconductors from Single-Molecule Calculations using Polarization-Consistent Optimally Tuned Screened Range-Separated Hybrid Functionals. *Journal of Chemical Theory and Computation* 2018, 14, 6287–6294.
3. de Queiroz, T. B.; Kümmel, S. Tuned range separated hybrid functionals for solvated low bandgap oligomers. *The Journal of Chemical Physics* 2015, 143, 034101.
4. Coutinho, K.; Georg, H.; Fonseca, T.; Ludwig, V.; Canuto, S. An efficient statistically converged average configuration for solvent effects. *Chemical Physics Letters* 2007, 437, 148–152.
5. Georg, H. C.; Canuto, S. Electronic Properties of Water in Liquid Environment. A Sequential QM/MM Study Using the Free Energy Gradient Method. *The Journal of Physical Chemistry B* 2012, 116, 11247–11254, PMID: 22894550.
6. Frisch, M. J. et al. Gaussian 16 Revision C.01. 2016; Gaussian Inc. Wallingford CT.
7. Coutinho, K.; Canuto, S. DICE: A Monte Carlo program for molecular liquid simulation. University of São Paulo, Brazil 1997.
8. Kovalenko, S.; Schanz, R.; Farztdinov, V.; Hennig, H.; Ernsting, N. Femtosecond relaxation of photoexcited para-nitroaniline: solvation, charge transfer, internal conversion and cooling. *Chemical Physics Letters* 2000, 323, 312–322.
9. Thomsen, C. L.; Thøgersen, J.; Keiding, S. R. Ultrafast Charge-Transfer Dynamics: Studies of p-Nitroaniline in Water and Dioxane. *The Journal of Physical Chemistry A* 1998, 102, 1062–1067.



N-Nitrosaminas em essência de cigarros eletrônicos: Avaliação da 4-metilnitrosamino-1-3-piridil-1-butanol por espectrometria de massas

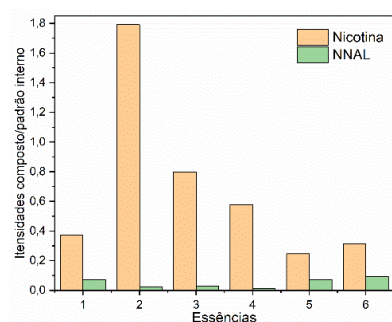
Yuri Arrates Rocha^{a,*} Almir Custodio Batista Junior^a, Andréa Rodrigues Chaves^a

^a Laboratório de Cromatografia e Espectrometria de Massas, Instituto de Química, Universidade Federal de Goiás, Goiânia, Brasil, *yuriarrates@hotmail.com

HIGHLIGHTS: Uso da espectrometria de massas para identificação de substâncias cancerígenas em essência de cigarro eletrônico. Análise de 4-(metilnitrosamino)-1-(3-piridil)-1-butanol presente nas essências de cigarro eletrônico.

Palavras Chave: Nicotina, Cigarros eletrônicos, N-Nitrosaminas, Espectrometria de massas.

O uso do cigarro eletrônico vem sendo uma tendência nas últimas com a popularização de vapes e pods. O intensivo uso de nicotina e outras substâncias provenientes da queima das essências, utilizadas nestes cigarros, estão reportadas na literatura como sérios problemas para a saúde, se mostrando causadora dos cânceres de pulmão, pâncreas, esôfago e cavidade oral [1,2]. A nicotina é percussora de substâncias cancerígenas como as nitrosaminas específicas do tabaco (NAT). Das NAT's conhecidas, destacamos a 4-(metilnitrosamino)-1-(3-piridil)-1-butanol (NNAL) que é potencialmente carcinogênica [3]. Portanto, este estudo objetivou a identificação da NNAL nas essências de marcas diferentes de cigarro eletrônico comparada a quantidade de nicotina. Assim, 6 essências comerciais utilizadas nos cigarros eletrônicos foram alvo do estudo. As amostras foram diluídas com metanol para concentração 10 µg/mL, com adição de padrão interno cafeína – 3C¹³ - 0,5 µg/mL. As análises foram feitas por injeção direta no espectrômetro de massas (microTOF-Q III Bruker), utilizando a ionização por eletrospray no modo positivo. Os resultados (figura 1) mostraram que todas essências analisadas apresentaram a NNAL, confirmado pelo baixo erro de massa



obtido experimentalmente (-1,1 ppm, m/z 210,1239). A essência da marca 5 e 6 apresentaram quantidade significativa da NNAL em relação à nicotina, o que é preocupante, considerando-se o potencial carcinogênico dessas substâncias. Esses achados destacam a importância de avaliar a presença de nitrosaminas nos cigarros eletrônicos, uma vez que essas substâncias representam riscos significativos para a saúde dos usuários.

Figura 1: Relação do teor de Nicotina e NNAL presente nas essências analisadas.

Agradecimentos: CNPq, LaCEM, e IQ-UFG.

Referencias:

1. EVANGELIA KONSTANTINOOU; FOTEINI FOTOPOULOU; DROSOS, Athanasios; et al. Tobacco-specific nitrosamines: A literature review. v. 118, p. 198–203, 2018.
2. GE SONG, et al., Urinary tobacco-specific nitrosamine 4-(methylnitrosamino)-1-(3-pyridyl)-1-butanol (NNAL) and cognitive functioning in older adults: The National Health and Nutrition Examination Survey 2013–2014. 2023;21(May):68,
3. E. MELINDA MAHABEE-GITTENS; MATT, Georg E ; MERIANOS, Ashley L. High Levels of the Carcinogenic Tobacco-Specific Nitrosamine NNAL and Associated Findings in Children of Smokers: A Case Series. v. 17, p. 117727192211188-117727192211188, 2022.



Detecção colorimétrica da proteína S em placa de micropoços de poliéster para diagnóstico de COVID-19 em amostras de swab e saliva

Nikaele S. Moreira^{a*}, Thaisa A. Baldo^a, Lucas C. Duarte^a, Leonardo Lopes-Luz^b, Karoliny A. Oliveira^a, Amanda M. Simões^a, Samira Bühner-Sékula^b, Paulo F. N. Estrela^a, Gabriela R. M. Duarte^a, Wendell K. T. Coltro^{a, c}

^a Instituto de Química, Universidade Federal de Goiás, Goiânia, Brasil. ^b Instituto de Patologia Tropical e Saúde Pública, Universidade Federal de Goiás, Goiânia, Brasil. ^c Instituto Nacional de Ciência e Tecnologia de Bioanalítica, Campinas, Brasil.

* Corresponding Email: nikaele_sousa@hotmail.com

HIGHLIGHTS: Imunoensaio direto de detecção colorimétrica do vírus SARS-CoV-2 em amostras de swab e saliva usando placa alternativa e de baixo custo para o diagnóstico de COVID-19 com boa precisão e menor geração de resíduos.

Palavras Chave: Imunoensaio direto; detecção colorimétrica, covid-19.

RESUMO: A pandemia de COVID-19 trouxe à tona a necessidade de desenvolver testes diagnósticos quantitativos rápidos, acessíveis, descentralizados, de baixo custo, para garantir um melhor manejo dos pacientes e, conseqüentemente, reduzir a transmissão do vírus.¹ Nesse sentido, este trabalho apresenta o desenvolvimento de uma microplaca de poliéster para detecção de proteína S especificamente relacionada ao SARS-CoV-2 em amostras de saliva e swab nasofaríngeo com base em ensaios de imunoabsorção enzimática direta (ELISA). A placa de micropoços de poliéster possui 96 micropoços (diâmetro de 3 mm) que contém 2-3 μL , reduzindo assim o reagente e o desperdício. As condições ótimas de concentração e tempo de reação nas etapas foram: sensibilização (30 min), BSA 1% (10 min), anticorpo de detecção a 2 $\mu\text{g/mL}$ (30 min), estreptavidina-HRP [1:1000] (60 min) e revelador (5 min). Portanto, o imunoensaio foi realizado em aprox. 2,5 horas. A imagem da placa foi capturada e analisada no canal de cor ciano utilizando o scanner e o software gráfico, respectivamente. A faixa linear obtida entre as concentrações de proteína S e intensidade de pixel foi de 0-10 $\mu\text{g.mL}^{-1}$, com r^2 de 0,99 e limite de detecção de 0,44 $\mu\text{g.mL}^{-1}$. A metodologia desenvolvida mostrou repetibilidade intraplaca e interplaca satisfatória com valores de RSD para quatro concentrações analisadas (n=3) entre 3,7-7,8% e 2,3-7,7%, respectivamente. Os resultados foram consistentes com o método RT-PCR e mostraram sensibilidade de 100% e 90%, e especificidade de 85,71% e 100%, para amostras de saliva e swab respectivamente. O imunoensaio direto proposto apresentou uma alternativa aos imunoensaios convencionais realizados em placas de poliestireno, dado o baixo custo do aparelho, baixo consumo de amostras e reagentes e menor geração de resíduos e tempo de análise. Além disso, o imunoensaio tem mostrado grande potencial para diagnosticar a covid-19 com precisão e exatidão.

Agradecimentos: Agradecemos ao INCTBio, CNPq, CAPES e a UFG.

References:

1. a) Hogan, C.A.; et al. J. Clin. Virol. **2020**, 128, 104410. b) Li, Q. et al. N. Engl. J. Med. **2020**, 382, 1199–1207.



Extração do Óleo Essencial de Capim Limão (*Cymbopogon citratus*)

Rhuan Emmanuel Silva Mendes,^{a,*} Alessandra Cristina Tomé,^b Camila Cristina Rodrigues Teixeira,^b Marcos Henrique Conceição Borba,^a

^a Departamento de Química do Instituto Federal Goiano *campus* Morrinhos, Morrinhos, Goiás. ^b Departamento de Alimentos do Instituto Federal Goiano, *campus* Morrinhos, Morrinhos, Goiás.

* Corresponding Email: rhuan.emmanuel@estudante.ifgoiano.edu.br

HIGHLIGHTS: Compostos químicos de interesse biológico. Principais características dos óleos essenciais e seu respectivo método de extração. Otimização da extração do óleo essencial de capim limão. Compostos voláteis encontrados no óleo essencial de capim limão.

Palavras Chave: Óleo essencial; Capim Limão; Extrações.

RESUMO: Os óleos essenciais são uma mistura de compostos voláteis, extraídos de partes de vegetais como caule, folhas e frutos, que apresentam odor característico. Na atualidade, vem sendo alvo de estudos acerca de suas atividades biológicas e antioxidantes, principalmente por conta de sua composição química¹. Uma das plantas que essa extração pode ser realizada é o Capim limão, este, é uma planta da família Poaceae, também conhecida como família das gramíneas, cultivada inicialmente em países asiáticos. Apresenta folhas alongadas, ásperas e finas, que, quando maceradas, exibem odor característico, ao qual, muitas das vezes remete ao odor de limão, vindo daí seu nome. Na cultura popular, é utilizado na forma de chás e extratos, sendo atribuído a efeitos medicinais. Seu óleo essencial apresenta como composto majoritário o citral, mistura isomérica dos compostos neral e geranial². Logo, esse estudo, teve por objetivo realizar a extração do óleo essencial de capim limão, a partir de suas folhas em três estados diferentes: recém-colhida, desidratada por duas semanas em temperatura ambiente, e imersa em água em temperatura ambiente por 24 horas depois de secas por duas semanas; e posteriormente, verificar o efeito da amostra no rendimento do óleo essencial. O método utilizado foi a extração por arraste a vapor, utilizando o aparelho *Clevenger*, se baseando na Farmacopeia Brasileira^{3,4}. Os resultados foram expressos em mililitros de óleo a cada 100g de folha pesada. A amostra em que o óleo foi extraído das folhas frescas apresentou menor rendimento (~1mL/100g), já as duas amostras que foram desidratadas por duas semanas apresentaram rendimentos similares (~1,5mL/100g), no entanto, as folhas que foram imersas em água, apresentaram, depois desse tempo, evidências de reações secundárias, como escurecimento das folhas e formação de bolhas de gases; seu óleo essencial, também apresentou odor desagradável e diferente dos anteriores. Esses resultados corroboram com o de Sfredo *et. al.*⁵, ao qual, extraiu volumes próximos dos apresentados pelo presente estudo. Logo, conclui-se que os objetivos deste estudo foram atingidos e a amostra com maior rendimento foi aquela em que se deixou secar por duas semanas. Por fim, estudos futuros serão realizados a fim de se analisar a possibilidade de degradação dos compostos no processo de secagem e se dentre eles há algum de interesse biológico.

Referências:



SEMANA DA QUÍMICA 2023

19 A 22 DE JUNHO

IQ
INSTITUTO DE QUÍMICA



UFG
UNIVERSIDADE FEDERAL DE GOIÁS



XVII SEMANA DA QUÍMICA
IV WORKSHOP DA PÓS GRADUAÇÃO

1. a) Sousa, A. V. DE et. al. CIAGRO. 2020, p. 1-9. 2. a) Oliveira, C. C. A. DE; Santos, J. S. Res., Soc. Dev. 2021, vol. 10, p. e263101220281. 3. a) Brasil. ANVISA. 5° ed. 2010, vol. 1. p. 1-545. 4. b) Brasil. ANVISA. 5° ed. 2010, vol. 2. p. 549-1448. 5. a) Sfredo, M. A. et. al. In: Brasil, C. C. B. Aten. Edi. 2022, vol. 1. p. 87-101.



Automatizando Cálculos de Estrutura: Desenvolvimento de um Software Robótico

Bárbara Júlia G. Dutra,^{a,*} Freddy F. Guimarães,^b

^a Instituto de Química, Universidade Federal de Goiás, Goiânia, Brasil., ^b Instituto de Química, Universidade Federal de Goiás, Goiânia, Brasil.

* Corresponding Email: barbara_dutr@discemte.ufg.br

HIGHLIGHTS: Como resposta dos atuais avanços tecnológicos se faz necessária agilidade nos processos. Neste trabalho é proposto a criação de um robô do tipo bot para automatização de submissão e coleta de dados de cálculos de estrutura eletrônica.

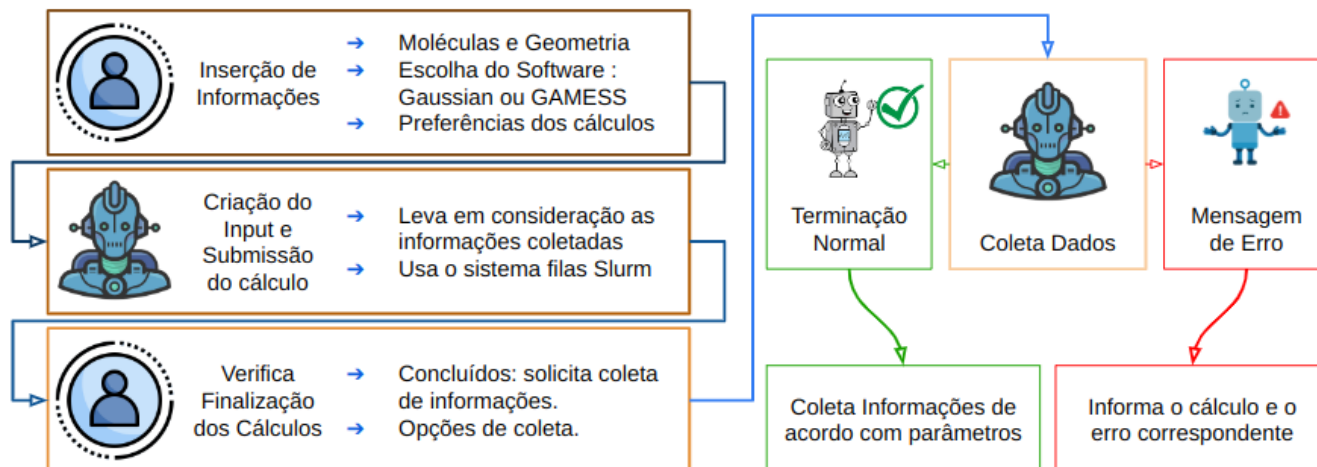
Palavras Chave: Robô, Automatização e Cálculos de Estrutura Eletrônica.

RESUMO/ABSTRACT: Quando são realizados cálculos de estrutura eletrônica algumas especificidades são solicitadas. Usando como exemplo o software Gaussian, é necessário informar a geometria da molécula, tipo do cálculo, bases a serem usadas, funcionais de troca e correlação, entre outros. Para se decidir o nível de cálculo a ser usado é necessário realizar um estudo sobre os resultados dos níveis obtidos, podem ser empregados milhares de cálculos nessas análises. Buscando otimizar esse trabalho foi desenvolvido um robô do tipo bot, apenas virtual, o qual monta o arquivo de submissão a partir dos dados necessários e submete o cálculo, minimizando o trabalho do usuário. Mesmo com essas facilidades a etapa de coleta de resultados desse montante ainda é trabalhosa, uma vez que o arquivo de retorno contém informações as quais podem não ser relevantes para o estudo em questão. Sendo assim foi implementado ainda a opção de coleta de resultados dos cálculos concluídos, onde as informações a serem coletadas podem também serem personalizadas. O funcionamento do robô em etapas está explicitado na Imagem 1.

Figura 1: Etapas de Funcionamento do Robô para otimização de cálculos

References:

M. J. Frisch, G. W. Trucks, H. B. Schlegel, G. E. Scuseria, et al. "Gaussian-16 Revision C.01," 2016. Gaussian Inc. Wallingford CT b) F.



Jensen, Introduction to Computational Chemistry. John Wiley Sons, 2007 c) A. Szabo, J. Szabo, and N. S. Ostlund., Modern Quantum Chemistry: Introduction to Advanced Electronic Structure Theory. Dover Publications, 1996.



Inserção de Dióxido de Carbono em Epicloridrina

João Paulo Miranda Nascimento^a, Vinicius Kalill Tomazetti^a, Muhammad Irfan Qadir^a

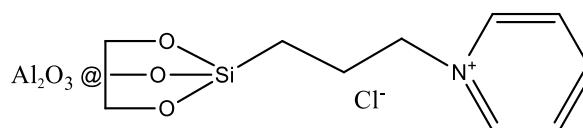
^a Instituto de química, Universidade Federal de Goiás, Goiânia, Brasil.

* E-mail de correspondência: joao_miranda@discente.ufg.br

HIGHLIGHTS: A fixação do CO₂ em carbonatos cíclicos é possível através do uso de um catalisador com piridina suportada em óxido de alumínio. Nesse processo, a epicloridrina atua como substrato. Esse método oferece uma abordagem eficiente para a transformação do CO₂ em compostos com maior valor agregado.

Palavras Chave: CO₂, conversão, catalisador.

RESUMO: Os líquidos iônicos são solventes verdes que são líquidos à temperatura ambiente eles são formados pela combinação de um cátion volumoso assimétrico com um ânion de baixa capacidade de coordenação. Como (Franzoi et al, 2011)* apresentou a utilização do cátion piridínio e o ânion cloroalumitado obtidos a partir de uma mistura de cloreto de alumínio (III) e N-alquilpiridínio. Essa formulação tem sido amplamente utilizada na investigação eletroquímica de compostos organometálicos e alquilaromáticos. Segue abaixo o catalisador de piridina suportando em óxido de alumínio(Al₂O₃).



Scheme : Estrutura do Catalisador usado neste estudo

Assim pretende-se com o respectivo trabalho, o estudo catalítico do CO₂ em epicloridrina, utilizando-se um líquido iônico de piridina suportado em óxido de alumínio para a inserção do dióxido de carbono dentro de epóxidos. Para conseguir os valores que foram analisados, foi necessário o uso de 50mg de catalisador e de 6,25mmol de epicloridrina. Os valores de conversão foram obtidos utilizando o método de ressonância magnética nuclear de Hidrogênio, usando-se CDCl₃ para análise. Uma vez que os testes foram realizados, observa-se um aumento de conversão em função da temperatura, onde a conversão máxima foi dada próximo de 80°C. Também foram analisados a seletividade de carbonato, que mostra o quanto do dióxido de carbono de fato, reagiu com o epóxido colocado para teste, já que, instaura-se como objetivo principal, inserir CO₂ dentro da molécula de epicloridrina.

Referencias:

Franzoi, A.C., Brondani, D., Zapp, E., Moccelini, S.K., Fernandes, S.C., Vieira, I.C. **INCORPORAÇÃO DE LÍQUIDOS IÔNICOS E NANOPARTÍCULAS METÁLICAS NA CONSTRUÇÃO DE SENSORES ELETROQUÍMICOS**. Quim. Nova, Vol. 34, No. 6, 1042-1050, 2011.

Tomazzet, V.K., Chacon, G., Marin, G., Castegnaro, M.V., Chagas, R. P., Lião, L. M., Dupont, J., Qadir, M. **Ionic liquid confined spaces controlled catalytic CO2 cycloaddition of epoxides in BMIm.ZnCl3 and its supported ionic liquid phases**. Journal of CO2 Utilization. Journal of CO2 Utilization 69 (2023) 102400.



Detecção molecular do vírus SARS-CoV-2 por RT-LAMP-LFA

Leonardo Matos Ferreira,^{a,*} Paulo Felipe Neves Estrela,^a Gabriela Rodrigues Mendes Duarte^a

^a Instituto de Química, Universidade Federal de Goiás, Goiânia, Brasil

* Email correspondente: matosleonardo@discente.ufg.br

DESTAQUES: O teste RT-LAMP-LFA desenvolvido possui alta especificidade e o tempo total de análise é inferior à 60 minutos. A simplicidade metodológica do teste possibilita aplicações como *point-of-care test* (POCT).

Palavras Chave: COVID-19, POCT, diagnóstico molecular, fluxo lateral.

RESUMO:

Em maio de 2023, a Organização Mundial da Saúde decretou o fim da emergência de saúde global da pandemia de COVID-19.¹ Embora o estado de pandemia tenha se encerrado, essa doença, causada pelo coronavírus SARS-CoV-2, ainda apresenta alto risco de saúde pública sendo responsável por uma morte a cada três minutos.¹ Isso evidencia a necessidade de metodologias simples que visam a testagem populacional com o fito de diminuir a propagação do vírus. As detecções moleculares, apesar de apresentarem alta acurácia, são comumente caracterizadas por demandar equipamentos sofisticados tornando-as incompatíveis na modalidade de testes *point of care* (POCT).² Assim, visando a simplicidade e aplicabilidade do teste em locais com recursos escassos, o objetivo deste trabalho foi realizar uma detecção molecular de SARS-CoV-2 utilizando a técnica de amplificação isotérmica RT-LAMP (do inglês, *Reverse Transcription - Loop-Mediated Isothermal Amplification*) combinada com o teste de fluxo lateral (LFA, do inglês *Lateral Flow Assay*). Para isso, foi realizada uma mistura reacional com volume final de 16 μL contendo 7,5 μL de kit colorimétrico LAMP WarmStart, 0,2 μM de primers externos, 1,6 μM de primers internos e 0,8 μM de primers de lopp, 1 ppm de FAM e 1,5 μL de amostra de RNA do SARS-CoV-2. A reação foi incubada a 65 °C por 30 minutos e, em seguida, adicionou-se uma fita de fluxo lateral para detecção de produtos de amplificação. A detecção foi realizada pela observação da presença ou ausência de uma banda vermelha na região teste da fita e a viabilidade do ensaio foi determinada pela banda controle. Após otimizado, o teste demonstrou não só elevada especificidade da detecção de SARS-CoV-2 como também simplicidade (fácil execução) e rapidez (tempo inferior a 60 minutos) metodológica durante todo o processo, desde a amplificação à leitura do resultado. Ao aliar a elevada acurácia do ensaio molecular com a simplicidade da técnica RT-LAMP-LFA, viabilizamos a detecção confiável do SARS-CoV-2 em locais descentralizados e com recursos escassos, fornecendo uma ferramenta a mais de combate ao avanço da disseminação do vírus.

Agradecimentos: à CAPES pela concessão da bolsa de mestrado.

Referências

1. Organização Mundial de Saúde. 2023, 5 de Maio. WHO – Press Conference.

Sun, Y. Qin, P. He, J. Biosensors and Bioelectronics. 2022, vol 197, 113771.



Análise por FTIR e de componentes principais visando a distinção de aditivação e do teor de enxofre em Óleo Diesel B S10 e S500

Marcos Filipe R. e Silva*, Leonardo Silva Gonçalves, Nelson Roberto Antoniosi Filho

Laboratório de Métodos de Extração e Separação, Instituto de Química, Universidade Federal de Goiás, Goiânia, Brasil

* Corresponding Email: mfilipers@discente.ufg.br

HIGHLIGHTS: Este trabalho demonstra que utilizando a técnica de FTIR e a análise quimiométrica é possível distinguir entre amostras de óleo diesel S10 e S500, mas não é possível distinguir a presença ou não de aditivos.

Palavras Chave: óleo diesel, enxofre, aditivos, FTIR, quimiometria

O óleo diesel é o combustível mais utilizado no Brasil, sendo denominado óleo diesel B devido à adição de biodiesel, e S10 e S500, pois pode possuir até 10 ou até 500 miligramas de enxofre por quilograma de óleo diesel. Além disso, há a presença de aditivos que são utilizados para melhorar a qualidade e a eficiência desse combustível. Nesse sentido, este trabalho busca investigar o perfil químico de amostras de óleo diesel B S10 e S500, para verificar uma possível discriminação quimiométrica das amostras pelo teor de enxofre e pela presença ou não de aditivos.

Para isso fez-se a análise dos resíduos de destilação de óleo diesel em um espectrofotômetro de infravermelho com transformada de Fourier (FTIR), na região do infravermelho médio (650 a 4000 cm^{-1}), seguido de pré-tratamento dos dados obtidos e análise exploratória por meio de análise de componentes principais (PCA). Em seguida, foram realizados três pré-tratamentos dos dados, dois deles com o método de Savitzky-Golay, com 21 e 15 janelas, e outro com *Standard Normal Variation* (SNV), para corrigir efeitos aditivos e multiplicativos. Foram realizadas PCAs para cada um dos pré-tratamentos, escolhendo-se o SNV para análise, pois este foi o que mais explicou a variância dos dados com duas componentes principais.

Com base na primeira análise, suspeitou-se de uma possível separação dos grupos quanto ao teor de enxofre. Assim, realizou-se outra PCA, dividindo os dados em 4 grupos, quanto ao teor de enxofre e a presença de aditivos. Observou-se uma discriminação natural das amostras quanto ao teor de enxofre, sendo que isso se dá devido a bandas dos espectros de infravermelho relativas à presença de enxofre. Entretanto, não houve discriminação quanto a presença ou não de aditivos.

Assim a metodologia aplicada é eficiente para a discriminação de amostras quanto ao teor de enxofre, mas não permite a discriminação de amostras aditivadas e não aditivadas.

Agradecimentos: LAMES, IQ, UFG, Fundação RTVE, ANP, FUNAPE.

References:

1. Painel Dinâmico do Mercado Brasileiro de Combustíveis Líquidos. <https://www.gov.br/anp/pt-br/assuntos/distribuicao-e-revenda/painel-dinamico-do-mercado-brasileiro-de-combustiveis-liquidos>.
Da Silva, M. P. F. *et al.* Classification of gasoline as with or without dispersant and detergent additives using infrared spectroscopy and multivariate classification. *Fuel* **116**, 151–157 (2014).



Craqueamento termocatalítico de polímeros empregando catalisador de nióbio

Jackeline de A. M. da Mota,^{a,*} Maríthiza G. Vieira,^b Nelson Roberto Antoniosi Filho^b

^a LAMES, Instituto de Química, Universidade Federal de Goiás, Goiânia, Brasil. ^b LAMES, Instituto de Química, Universidade Federal de Goiás, Goiânia, Brasil. * Corresponding Email: jackealcantara@discente.ufg.br

HIGHLIGHTS: O polietileno (PE) é composto por carbono e hidrogênio. Quando aquecido em um processo de craqueamento, forma parafinas, olefinas, entre outros. As parafinas são muito almeçadas para o presente trabalho, por serem a matéria-prima de derivados de petróleo.

Palavras Chave: polietileno, catalisador, craqueamento, Random Forest

RESUMO/ABSTRACT: Os polímeros são macromoléculas constituídas por pequenas unidades, os monômeros, unidos por ligações covalentes. Eles podem ser naturais, como a celulose, ou sintéticos, como o PE. O PE, quando sujeito a um processo de craqueamento, forma parafinas, olefinas, aromáticos, entre outros, como moléculas ramificadas. A formação de parafinas é muito cobiçada, por ser matéria-prima para a produção de derivados de petróleo, como combustíveis e lubrificantes. Nos experimentos realizados, foi utilizado o catalisador de nióbio, Nb_2O_5 , com o objetivo de verificar em quais condições reacionais ocorre maior produção das parafinas contendo de 8 a 16 carbonos, componentes do querosene de aviação. Os óleos obtidos foram caracterizados por cromatografia gasosa acoplada à espectrometria de massas (GC-MS) utilizando um GC 2010 Plus – MS QP2010 Shimadzu e uma coluna DB-5-MS. Os dados foram submetidos a um método não supervisionado, a *Hierarchical Cluster Analysis* (HCA), que busca construir uma hierarquia de agrupamentos. Ela foi dividida em grupos 1, 2 e 3. O grupo 1 é composto por reações que não utilizaram catalisador de Nióbio. Porém, a amostra PEO70, utilizou-o, e está neste grupo, sendo considerado um *outlier*. Já os grupos 2 e 3 são reações com o uso de catalisador. Portanto, os dados foram submetidos a um novo método de classificação, o *Random forest*, que cria “árvores de decisão” de forma aleatória, no qual cada “árvore” é usada na escolha do resultado final. A formação de parafinas de C_{17} - C_{32} é favorecida com o uso do catalisador, por conta da área superficial do mesmo e o tamanho dos seus poros. A formação de parafinas de C_8 - C_{16} e olefinas de C_8 - C_{16} e de C_{17} - C_{32} foi favorecida sem o uso de catalisador. Portanto, o uso de catalisador de Nióbio não é favorável para a obtenção do querosene de aviação. Vale salientar que foi obtido um resultado mais favorável para a formação de parafinas C_{17} - C_{32} , que é a composição de óleo base de lubrificantes, importantes para diversas propriedades tribológicas.¹

Acknowledgements: LAMES, IQ, UFG, FUNAPE.

References:

1. Sikdar, S., Siddaiah, A., & Menezes, P. L. (2020). Conversion of waste plastic to oils for tribological applications. *Lubricants*, 8(8).



Determinação Metabólica do Gérmen de Milho cru e fermentado, por RMN Quantitativa

Christian D. Gomides,^a Gabriella L. Magalhães,^b Manoel S. S. Junior,^b Luciano M. Lião.^a

^aInstituto de Química, Universidade Federal de Goiás, Brasil. ^bEscola de Agronomia, Universidade Federal de Goiás, Brazil.
E-mail: christiancdg@discente.ufg.br

O Gérmen de Milho é um subproduto da indústria alimentícia usado na extração de óleo e ração. Limitações para consumo humano incluem alto teor de ácidos graxos, micotoxinas e fatores antinutricionais. Estudos visam estabilizá-lo por meio de fermentação para uso na indústria de panificação.^a

Uma das etapas desse projeto é a determinação do perfil metabólico do gérmen de milho, utilizando a técnica de ressonância magnética nuclear (RMN). Essa abordagem permite uma compreensão mais aprofundada da composição e das transformações metabólicas ocorridas durante a fermentação sólida, fornecendo informações essenciais para o aprimoramento do processo.

A quantificação em RMN é possível pela relação direta entre a intensidade do sinal e o número de núcleos responsáveis pelo sinal. Essa informação é traduzida através da área do sinal, obtida pela integração do mesmo, que reflete a concentração da substância. Para uma quantificação precisa, é importante seguir determinadas condições experimentais, como calibrar os pulsos de excitação, usar um tempo de repetição adequado ($> 5 T_1$), relação sinal/ruído apropriada, temperatura controlada e um padrão de quantificação. A sintonia da sonda e a homogeneidade do campo também são essenciais.^b

Tabela 1– Conteúdo dos compostos detectados no extrato de D₂O do Gérmen de Milho Cru. ^bMédia \pm Erro padrão (N= 6).

Composto	Conteúdo (mg/g) \pm E.P.M.	Composto	Conteúdo (mg/g) \pm E.P.M.
Acetato	0,254 \pm 0,005 ^b	Glicerol	9,438 \pm 0,3
Ácido Glutâmico	0,466 \pm 0,02	Glutamina	0,851 \pm 0,04
Ácido γ -aminobutírico	0,483 \pm 0,05	Isoleucina	0,062 \pm 0,006
Alanina	0,395 \pm 0,01	Leucina	0,058 \pm 0,004
Arginina	1,150 \pm 0,08	Lisina	0,487 \pm 0,02
Asparagina	1,616 \pm 0,1	Piruvato	0,056 \pm 0,005
Aspartato	1,485 \pm 0,1	Tirosina	0,319 \pm 0,02
Colina	0,846 \pm 0,02	Treonina	0,342 \pm 0,02
Formiato	0,020 \pm 0,002	Valina	0,087 \pm 0,007

Agradecimentos: Ao LabRMN – IQ UFG, Instituto de Química – UFG, Escola de Agronomia – UFG, CAPES, PPGQ – UFG.

Referências:

- SADH, P. K.; DUHAN, S.; DUHAN, J. S. Agro - industrial wastes and their utilization using solid state fermentation: a review. *Bioresources and Bioprocessing*, 2018.
- Bharti, S.K., Roy, R. Quantitative 1H NMR spectroscopy. *Trends in Analytical Chemistry*, 2012.



SELENILAÇÃO DIRETA DA LIGAÇÃO C(sp²)-H DE IMIDAZO[2,1-b]TIAZOL NA PRESENÇA DE PERÓXIDO DE HIDROGÊNIO DE URÉIA (UHP) E LACTATO DE ETILA

Jhefferson dos Santos Guilhermi¹, Thiago Silva Lima¹, Marcos F. O. Cavalcante¹,
Muhammad Adil Ali², Jamal Rafique^{1,3}, Sumbal Saba*¹

¹Instituto de Química, Universidade Federal de Goiás – UFG

²Institute of Chemical Sciences - University of Peshawar – Paquistão

³Instituto de Química – Universidade Federal de Mato Grosso do Sul – UFMS

RESUMO

Este trabalho teve como finalidade investigar um escopo reacional mais sustentável em etapa única da selenilação direta da ligação C(sp²)-H de imidazo[2,1-b]tiazol na presença de peróxido de hidrogênio de uréia como catalisador orgânico. As investigações apontam alto desempenho na presença de lactato de etila como um solvente mais verde, em 60°C por 3h de reação. O protocolo investigado apresenta excelentes condições reacionais que remetem à altos rendimentos, fácil desempenho de escala em gramas e condições livre de metal. Deste modo, o presente trabalho se demonstra de grande interesse uma vez que moléculas de organoselênio vem demonstrando atualmente grandes aplicabilidades biológicas e medicinais.

Palavras-chave: Química-verde, organoselênio, catalisador orgânico.



Polímero de coordenação de érbio (III) baseado em um ligante oxamato: propriedades magnéticas

Jhonny Willians Maciel (PG),^{a,*} Renato Rabelo (PQ),^a Meiry Alvarenga (PG),^a Felipe Terra Martins (PQ),^a Danielle Cangussu de Castro Gomes (PQ),^a

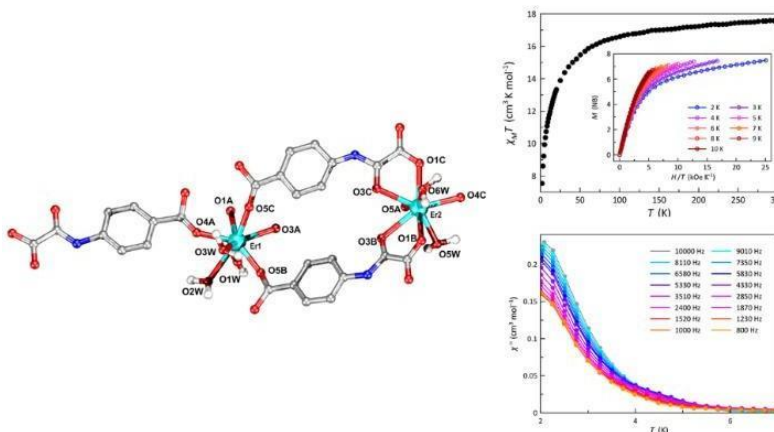
^a Instituto de Química, UFG, Goiânia, Brasil

* Corresponding Email: jhonnywmaciel@gmail.com

HIGHLIGHTS: In this work, we present the preparation, magnetic properties and structural results concerning the formation of the complex between the Erbium(III) ion with the *N*-(4-carboxyphenyl)oxamic acid (EtH₂pcpa).

Palavras Chave: Oxamato, EtH₂pcpa, Er(III).

RESUMO/ABSTRACT: A preparação e compostos de coordenação com ligantes do tipo oxamato tem sido bastante explorada nas últimas décadas com inúmeros exemplos de onde a estratégia de síntese leva a diferentes topologias estruturais e propriedades físicas.^{1,2} Neste trabalho, apresentamos os resultados estruturais relativos a formação de complexo entre o íon de érbio(III) com o ligante ácido *N*-(4-carboxifenil) oxâmico etil éster (EtH₂pcpa). O complexo foi obtido na forma de monocristal por difusão lenta em tubo na forma de H na estequiometria de 1:1 (ligante:metal) em água. Rendimento: 72%. A estrutura do complexo metálico de fórmula [Er₂(Hpcpa)₃(H₂O)₅]_n foi determinada por difração de raios X de monocristal. Os resultados cristalográficos revelam que o complexo cristaliza no sistema monoclinico grupo espacial Cc. A unidade assimétrica compreende dois íons metálicos Er^{III} cristalograficamente independentes (Er1 e Er2), três ligantes Hpcpa²⁻ e seis moléculas de água. O polímero obtido é isoestrutural aos relatados anteriormente³. O gráfico de $\chi_M T$ versus T do complexo Er mostra um valor de $\chi_M T$ à temperatura ambiente de 17,5 cm³mol⁻¹K, que diminui continuamente com o resfriamento devido ao despovoamento térmico dos estados M_J e atinge 7,5 cm³mol⁻¹K a 1,9 K. Nenhum sinal χ_M'' foi encontrado na ausência de um campo magnético dc aplicado (H_{dc}) devido a efeitos QTM. No entanto, quando um H_{dc} diferente de zero é aplicado, os sinais χ_M'' aparecem abaixo de 6,0 K, indicando a ocorrência do fenômeno de relaxamento lento da magnetização induzida por H_{dc} .



Agradecimentos: CNPQ, CAPES, FAPEG e UFG.

References:

1. Oliveira, T. L. *et al. Polyhedron* **81**, 105–114 (2014).
2. Maciel, J. *et al. J Braz Chem Soc* **30**, 2413–2429 (2019).
3. de Oliveira Maciel, J. W. *et al. Inorg Chem* **60**, 6176–6190 (2021).