

Universidade Federal de Goiás



Livro de Resumos

2024

Realização



PPGEQ
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM
ENGENHARIA QUÍMICA

PPGQ
PROGRAMA DE
PÓS-GRADUAÇÃO EM
QUÍMICA

IQ
INSTITUTO DE
QUÍMICA



Organização:

Universidade Federal de Goiás

Instituto de Química

01 a 05 de outubro de 2024

Membros da comissão Organizadora:

Presidente: Profa. Dra. Andréa Rodrigues Chaves

Vice-Presidente: Prof. Dr. Paulo Roberto Martins

Profa. Dra. Danielle Cangussu de Castro Gomes, Prof. Dr. Martin Schwellberger Barbosa, Profa. Dra. Lúcilía Kato, Profa. Dra. Araceli Aparecida Seolatto, Profa. Dra. Fernanda Ferreira Freitas, Me Almir Custódio Batista Júnior, Me Larissa Garcia Velasco, Yuri Arrates Rocha, Allyster Rodrigues Silva, Henrique Rodrigues de Moraes, Alexandre Alves Rabelo, João Paulo Miranda Nascimento, Ana Laura Santos de Paula, Marcel Machado Amorim, Gustavo Oliveira Alves, João Varia Verano, João Francisco Ponse, Heloísa Aguiar Ribeiro, Jamile Caroline Belo da Silva, Antonio Marciel de Souza Neto, Eduardo Lima Nascimento, Arthur Rosa Cortez, Rodney Alarcon Silva Filho, Gabrielly Gonçalves da Silva Campos, Naara da Silva Balbino, Maria Joana Pereira Mendes, Jonas Alves Vicentini Júnior, Filipe de Oliveira Miranda, Aline Moreira Aguiar, Allyson Gabriel Oliveira da Silva, Adima Araujo de Alencar.

Membros da comissão científica:

Prof. Dr. Rafael Pavão das Chagas, Profa. Dra. Livia Flório Sgobbi, Prof. Dr. Wendell Karlos Tomazelli Coltro, Prof. Dr. Boniek Gontijo Vaz, Profa. Dra. Gabriela Rodrigues Mendes Duarte, Profa. Dra. Margarete Martins Pereira Ferreira, Profa. Dra. Nyuara Araújo da Silva Mesquita, Prof. Dr. Rafael Macedo, Prof. Dr. Leonildo Alves Ferreira, Prof. Dr. Marlon Hebert F. Barbosa Soares, Profa. Dra. Vanessa Gisele Pasqualotto Severino, Profa. Dra. Camila Cíntia Sousa Melo Brito.

Realização



Apoio e Patrocínios



SESSÃO DE PÔSTERS III SIIQ		
AUTOR	CÓDIGO RESUMO	SEQUÊNCIA
João Victor Borges Assis	6294968	SIIQ01
Lauanne Rocha Silva	1219971	SIIQ02
Rhyan César S. Dias	9873792	SIIQ03
Marcel Machado Amorim	5866565	SIIQ04
Natália Sabina dos Santos Galvão	7456869	SIIQ05
Aline Moreira Aguiar	1335732	SIIQ06
Manuela Zoppei Flores	6929368	SIIQ07
Rodney Alarcon Silva Filho	4846459	SIIQ08
Sokadjo Letchede Desire	1754992	SIIQ09
Lilian Fernandes de Oliveira	3142784	SIIQ10
Iara Schlag Durães Campos	6833594	SIIQ11
Larissa Garcia Velasco	9776240	SIIQ12
Charleane Assunção	9829938	SIIQ13
Jackson Junior Santos De Souza	8164637	SIIQ14
João Elias Pinheiro Sousa De Paula	6660470	SIIQ15
ISIS JULIANE ARANTES GRANJA	8567001	SIIQ16
Karolina Nascimento da Silva	3729847	SIIQ17

Lucas Cauê Costa de Oliveira	4487672	SIIQ18
Lara Gabriela De Faria Andrade	5311992	SIIQ19
Joyce Moreira de Araújo	7240843	SIIQ20
Izadora Rodrigues Borges	9142249	SIIQ21
Nathalia dos Santos Conceição	8179644	SIIQ22
Eduarda de Sousa Hirle	5602429	SIIQ23
Gabriel Brito Carneiro	9440897	SIIQ24
Pedro Henrique Almeida de Faria	1973850	SIIQ25
Dion Carlos Moreira Filho	5351446	SIIQ26
Cleysla Mendes da Silva	9802315	SIIQ27
Ícaro do Nascimento Camelo	9727018	SIIQ28
Marcos Filipe Ramos e Silva	3392219	SIIQ29
Ana Luiza Reis Rodrigues da Cunha	3284763	SIIQ30
Daniel Santos de Paula	7839914	SIIQ31
Werberson de Almeida Bezerra	2470539	SIIQ32
Mauricio Matheus Lucio Pereira	7288752	SIIQ33
Genildo dos Santos Costa Junior	5093808	SIIQ34
Leonardo Matildes Fonseca	1263603	SIIQ35
João Vitor Fernandes Paiva	4271489	SIIQ36
Luiz Felipe Cabral Lino	8058282	SIIQ37

Leonardo Victor Espindola Guimarães	2294187	SIIQ38
Jonas Xavier Torres	1459739	SIIQ39
Filipe Teodoro Coelho	3590697	SIIQ40
Gustavo Fernandes de Paula	6418491	SIIQ41
Lucas Ferrão Marinho	4543435	SIIQ42
Filipe de Souza Cardoso	7440993	SIIQ43
Maria Isabel Ribeiro Alves	6283133	SIIQ44
Jhefferson dos Santos	4512291	SIIQ45
Lucas Augusto Araújo	3787879	SIIQ46

APRESENTAÇÃO ORAL III SIIQ			
SEQUÊNCIA	AUTOR	CÓDIGO RESUMO	LOCAL
01	Daniel Santos de Paula	7839914	IQ1
02	Nathalia dos Santos	8179644	IQ1
03	Pedro Henrique Almeida	1973850	IQ1
04	Ana Luiza Reis	3284763	IQ1
05	Filipe de Souza Cardoso	7440993	IQ1
01	Izadora Rodrigues	9142249	IQ2
02	Manuela Zoppei Flores	6929368	IQ2
03	Dion Carlos Moreira	5351446	IQ2
04	Karolina Nascimento	3729847	IQ2
05	Filipe Teodoro Coelho	3590697	IQ2

AS APRESENTAÇÕES ACONTECERÃO NOS ANFITEÁTROS DO INSTITUTO DE QUÍMICA 1 E 2

DESENVOLVIMENTO DE UM SENSOR ELETROQUÍMICO MINIATURIZADO PARA DETECÇÃO DE CARBENDAZIM

**Lauanne Rocha Silva 1^a (IC), João Vitor F. Paiva 2^a (PG), Guilhermina Ferreira
Teixeira 3^a (PQ), Luiz Felipe Cabral Lino 4^b (IC), Lívia Flório Sgobbi 5^a (PQ)**

^a Universidade Federal de Goiás 1, Instituto de Química, Goiânia, Goiás, Brazil, 74690-900

^b Universidade Federal de Goiás 2, Faculdade de Farmácia, Goiânia, Goiás, Brazil, 74605-170

*livia_sgobbi@ufg.br

Palavras-Chave: carbendazim, eletrodo, sensores, miniaturizados.

O carbendazim é um fungicida benzimidazol com ampla gama de atividade sistêmica. Ele inibe a formação de microtúbulos mitóticos durante a mitose, afetando o crescimento e a divisão dos esporos.¹ Devido à toxicidade e ao risco potencial que o carbendazim representa para a saúde pública e o meio ambiente, é essencial desenvolver métodos eficazes para detectar esse composto em alimentos e bebidas. Uma solução promissora para detectar compostos nocivos em produtos consumíveis é o uso de sensores eletroquímicos. A principal vantagem do uso desse tipo de sensor é sua alta sensibilidade e a detecção em tempo real *in situ*. Semicondutores multifuncionais, como o Niobato de Sódio (NaNbO_3), podem ser usados na fabricação de sensores eletroquímicos. Com base nisso, este estudo visa explorar a eficiência do NaNbO_3 para a detecção de carbendazim usando eletrodos de carbono serigrafados (SPCE). O NaNbO_3 foi produzido por aquecimento convencional da fase metaestável $\text{Na}_2\text{Nb}_2\text{O}_6 \cdot \text{H}_2\text{O}$ sintetizada pelo método hidrotérmico assistido por micro-ondas.² O NaNbO_3 apresentou partículas semelhantes a fibras e estrutura cristalina ortorrômbica com grupo espacial P21ma e Pbcm.³ Os sensores foram obtidos pelo método de serigrafia usando tinta de carbono em um substrato de tereftalato de polietileno (PET). Para avaliar a melhor modificação da superfície, o eletrodo de trabalho foi preparado pela queda de 2,0 μL de suspensões contendo NaNbO_3 em diferentes solventes, como etanol, isopropanol, DMSO, DMF e água, na presença e ausência de Nafion®. Para preparar a solução padrão de carbendazim $8.89 \times 10^{-3} \text{ mol L}^{-1}$, o fungicida foi dissolvido em dimetilformamida (DMF). Depois disso, a solução de teste foi preparada diluindo a solução padrão de carbendazim no tampão Britton-Robinson no pH=4. A taxa de varredura da voltametria cíclica também foi otimizada, com varreduras realizadas de 10 a 120 mVs^{-1} na faixa de potencial de -0,1 a 1,2 V. Todas as medições de CV foram realizadas em um potenciostato/galvanostato microAutolab TYPE III controlado pelo software NOVA (versão 2.1.7). Finalmente, a curva de calibração do padrão externo de carbendazim foi construída usando as condições previamente otimizadas. Os resultados mostraram que o eletrodo modificado com NaNbO_3 2,0 g L^{-1} em DMSO + Nafion® 0,5% apresentou a melhor distribuição e adesão das partículas de NaNbO_3 na superfície do eletrodo de trabalho. Além disso, essa condição de deposição promoveu um ganho na intensidade do sinal e o deslocamento do pico de oxidação do carbendazim para potenciais menos positivos. A curva de calibração exibiu uma faixa linear de 0,20 a 10,0 $\mu\text{mol L}^{-1}$, com $R^2 = 0,994$. O limite de detecção e o limite de quantificação foram 0,23 e 0,71 $\mu\text{mol L}^{-1}$, respectivamente. Como perspectivas futuras, o uso da voltametria de onda quadrada será inicialmente investigado. Por fim, para validação analítica mais robusta, serão conduzidos testes de exatidão e precisão intermediária, bem como a avaliação do efeito matriz em amostras de suco de laranja.

1PMRA. Pest Management Regulatory Agency. Re-evaluation of Carbendazim. Reevaluation Note. REV2006-3. 2006.

2USEPA. United States Environmental Protection Agency. Thiophanate-Methyl and Carbendazim (MBC). Human Health Assessment Scoping Document in Support of Registration Review. Memorandum. 2014.

3Teixeira, G. F.; Seleghini, S.; Bastos, W. B.; Jacomaci, N.; Stojadinovic, B.; Mitrovic, Z. D.; Colmati, F.; San Miguel, M. A.; Longo, E.; Zaghe, M. A. On the coexistence of ferroelectric and antiferroelectric polymorphs in NaNbO_3 fibers at room temperature. J. Mater. Chem. C, 2023, 11, 5524

Agradecimentos: [SIIQ/ CNPq / FAPEG (Processo nº 202310267001369)/UFG]

CATALISADORES DE PLATINA SUPORTADA EM CARBONO E ÓXIDO DE NIÓBIO PARA GERAÇÃO ELETROLÍTICA DE HIDROGÊNIO VERDE

Leonardo Matildes ^{a*} (IC), Tarso Bastos^a (PG), Flávio Colmati ^{a,b} (PQ)

^a Universidade Federal de Goiás, Instituto de Química, Goiânia, Goiás, Brasil, 74000

^b Centro de Excelência em Hidrogênio e Tecnologias Energéticas Sustentáveis (CEHTES)

* leonardomatildes@discente.ufg.br

Palavras-Chave: Catalisador, PtSn, Voltametria, Nióbio, Hidrogênio

A célula de combustível é capaz de transformar energia química em energia elétrica com alta eficiência, sem liberar subprodutos poluentes^[1]. Para essa geração de energia, o hidrogênio é o combustível mais comum utilizado em células a combustível devido suas características e eficiência na geração de eletricidade. Em uma célula a combustível, o hidrogênio molecular se dissocia em prótons H⁺ que atravessam o eletrólito até o cátodo, enquanto os elétrons são conduzidos por um circuito externo, gerando corrente elétrica. No cátodo o próton reage com o oxigênio, formando moléculas de água, sendo um processo altamente eficiente e que não gera emissão de poluentes. No entanto, a produção do hidrogênio é um dos maiores desafios para o uso dessa tecnologia, pois os processos utilizados atualmente geram poluentes, como por exemplo a reforma a vapor que libera CO₂ como subproduto. A armazenagem e o transporte também são um desafio, pois o hidrogênio possui baixa densidade molecular, o que exige uma estrutura complexa e especializada. A PEMFC pode ser alimentada por combustíveis líquidos como etanol, metanol ou álcoois de baixo peso molecular em meio ácido, e geram como produto do gás hidrogênio (H₂)^[2] quando este dispositivo atua como eletrolisador. Esse H₂ proveniente da reação eletroquímica não produz nenhum poluente. O eletrocatalisador de Pt-Sn (platina e estanho) é o mais eficaz eletroquimicamente para a reação de oxidação de etanol, portanto pode apresentar eficiência na geração eletrolítica de H₂ em soluções alcoólicas. Seguindo por essa vertente, foi estudada a influência do nióbio no suporte do catalisador Pt-Sn, tendo como objetivo o aumento da performance da geração eletrolítica do H₂. Os catalisadores foram sintetizados utilizando NaBH₄ como agente redutor, óxido de Nióbio juntamente com carbono Vulcan (50% m/m) foram usados como suportes para fase metálica. As análises de voltametria lineares foram realizadas a potenciais de 0,2 V a -0,5 V em H₂SO₄ 0,5 mol·L⁻¹ com 1,0 mol L⁻¹ de etanol. Dentre os catalisadores estudados, Pt/CSn, Pt/CSnNb₂O₅ e Pt/CSnNb₂O₂ o catalisador Pt/CSnNb₂O₅ apresentou um início no desprendimento de hidrogênio ligeiramente melhor que os outros dois, com um potencial de início de desorção em aproximadamente -0,22V enquanto as espécies de Nióbio Pt/CSnNb₂O₅ e Pt/CSnNb₂O₂ apresentaram -0,23 e -0,24 respectivamente. Os materiais Pt/CSnNb₂O₅ e Pt/CSn apresentaram resultados muito próximos. Dessa forma, pode-se afirmar que a presença do óxido de nióbio não reduz a atividade eletroquímica do catalisador Pt/CSn e que o material Pt/CSnNb₂O₅ tem atividade eletroquímica para a geração eletrolítica de H₂ em solução de etanol em ácido sulfúrico.

1 VILLULLAS, H. M.; TICIANELLI, E. A.; GONZÁLEZ, E. R. Células a combustível: energia limpa a partir de fontes renováveis. Quím. Nova na escola, nº 15, 2002

2 FADZILLAH, D.M. KAMARUDIN, S. K. ZAINOODIN, M. A. MASDAR, M. S. Critical challenges in the system development of direct alcohol fuel cells as portable power supplies: An overview. Int. J. Hydro. Energy, v. 44, p. 3031-3054, 2019.

ATIVIDADE DA ATRAZINA EM SOLOS DA BOLÍVIA

Almeida, D. R. (PG)^a, Aguiar, A. M. (IC)^{b*}, Kunzler, B. E. (PG)^a, Damini, V. (PQ)^a

^aUniversidade Federal de Goiás, Escola de Agronomia, Goiânia, Goiás, Brasil, 74690-900

^bUniversidade Federal de Goiás, Instituto de Química, Goiânia, Goiás, Brasil, 74690-900

*e-mail: aguiarninha4@gmail.com

Palavras-Chave: herbicida, atributos do solo, curva dose-resposta, *Cucumis sativus*

A atrazina (6-chloro-4-N-ethyl-2-N-propan-2-yl-1,3,5-triazine-2,4-diamine), do grupo das triazinas, é um herbicida seletivo amplamente utilizado na agricultura brasileira no controle de plantas infestantes de folha larga (dicotiledôneas) em condição de pré-emergência ou pós-emergência precoce das culturas.¹ A molécula da atrazina pode se comportar de diferentes maneiras em cada solo, sendo dependente da interação dos atributos físicos e químicos do solo e das propriedades físicas e químicas da molécula, o que implica na aplicação de doses personalizadas desse herbicida para que o seu desempenho seja ampliado e o seu impacto ambiental, reduzido.² Nesse sentido, objetivou-se investigar a eficácia da atrazina no controle do pepino (*Cucumis sativus*), espécie bioindicadora, em solos do Departamento de Santa Cruz - Bolívia, bem como determinar os atributos físicos e químicos que influenciam na relação herbicida-solo. O experimento foi conduzido em delineamento inteiramente casualizado (DIC), em esquema fatorial 7 x 8, com 5 repetições. Os fatores avaliados foram 7 tipos de solo e 8 doses do herbicida atrazina (PROOF®): 0x, 1/16x, 1/8x, 1/4x, 1/2x, 1x, 2x, 4x, em que x correspondeu à 1500 g i.a. ha⁻¹. Após 28 dias, realizou-se a colheita de parte aérea e da raiz e manteve-se o material em estufa por 72 h a 65 °C para se obter a massa seca e determinar o percentual de controle. A tabela 1 apresenta a equação de regressão da curva dose-resposta, por meio da qual se determinaram as doses correspondentes a 90% de controle da espécie em questão, e o percentual de redução da dose de campo (dose de campo). Ademais, o teste de correlação de Spearman não foi significativo para nenhum dos atributos físicos e químicos do solo, o que impossibilita prever o comportamento do herbicida de acordo com os atributos do solo.

Tabela 1. Equação de regressão, dose correspondente a 90% de controle e percentual de redução da dose de campo.

Solo	Equação de regressão	Dose (g i. a. ha ⁻¹)	Percentual de redução da dose (%)
S/A11	$f = 98,2(1 - e^{-0,007x})^*$	328,4	78,1
B22	$f = 92,27(1 - e^{-0,032x})$	116,5	92,2
RV/A1	$f = 92,01(1 - e^{-0,049x})$	78,0	94,8
He/C4	$f = 92,24(1 - e^{-0,033x})$	110,6	92,6
RV/B37	$f = 97,55(1 - e^{-0,011x})$	226,8	84,9
He/B2	$f = 96,35(1 - e^{-0,014x})$	193,9	87,1
Le/C6	$f = 94,57(1 - e^{-0,013x})$	228,7	84,8

O solo que apresentou menor redução foi o SA11, sendo necessários 328,4 g i.a. ha⁻¹. Já em RV/ A1 atingiu-se uma redução de 94,8%. Dessa forma, foi possível diminuir a dose do herbicida atrazina em todos os solos, o que permite redução dos custos e menor dano ao meio ambiente.

¹Vargas, L.; Peixoto, C. M.; Roman, E. S. Manejo de plantas daninhas na cultura de milho. Passo Fundo: Embrapa Trigo, 2006. 20 p.

²Traghetta, D. G. *et al.* Mecanismos de sorção da atrazina em solos: estudos espectroscópicos e polarográficos. São Carlos: Embrapa Instrumentação Agropecuária, 1996, 7p, Comunicado Técnico, 14.

Agradecimentos:

Herbil, EA-UFG, IQ-UFG, III SIIQ UFG



DETECÇÃO RÁPIDA DE BACTÉRIAS RESISTENTES A ANTIBIÓTICOS POR LAMP

Charleane Justino de Assunção^{a*} (PG), Amanda Alves de Oliveira^b (PG), Gabriela Rodrigues Mendes Duarte^c (PQ), Elisa Flávia Luiz Cardoso Bailão^d (PQ), Leandro Fonseca de Lima^e (PG)

^a UFG, Instituto de Química, Goiânia, Goiás, Brasil, 74690-900

^b UFG, Instituto de Química, Goiânia, Goiás, Brasil, 74690-900

^c UFG, Instituto de Química, Goiânia, Goiás, Brasil, 74690-900

^d UEG, Instituto de Ciências Biológicas, Anápolis, Goiás, Brasil, 75132-903

^e UFG, Instituto de Química, Goiânia, Goiás, Brasil, 74690-900

*e-mail:charleane_justino@discente.ufg.br

Palavras-Chave: *Staphylococcus aureus*, LAMP, Resistência bacteriana.

De acordo com a Organização Mundial da Saúde, estima-se que, até 2050, infecções causadas por bactérias resistentes a antibióticos poderão resultar em até dez milhões de óbitos.¹ Entre essas bactérias, destaca-se a *Staphylococcus aureus*, responsável por causar uma ampla diversidade de doenças, desde infecções agudas até crônicas, em humanos e animais. A resistência antimicrobiana dessa bactéria é atribuída principalmente ao gene *mecA*, que provoca resistência a metilina.² Atualmente, os métodos tradicionais de detecção de MRSA (*Staphylococcus aureus* resistente à metilina) baseiam-se em cultura bacteriana, seguida de testes de suscetibilidade a antibióticos.³ Contudo, esses métodos são trabalhosos e demorados, exigindo de dois a três dias para a conclusão dos testes. Assim, se faz necessário metodologias mais rápidas para a detecção dessas bactérias resistentes. Sendo assim, este trabalho teve como objetivo desenvolver um método de detecção rápida de *Staphylococcus aureus* e do gene *mecA* utilizando a técnica de Amplificação Isotérmica Mediada por Loop (LAMP). Para isso, foi realizada uma mistura reacional LAMP com volume final de 15 µL contendo 0,2 µM de cada iniciador externo (F3 e B3), 1,6 µM de cada iniciador interno (FIP e BIP), 0,8 µM de cada iniciador de loop (LF e LB), 8 mM de MgSO₄, 2,0 mM de Dntp, 0,48 U.µL⁻¹ da enzima Bst 2.0 DNA Polimerase, indicador de pH vermelho de cresol e 1,5 µL de amostra. Os iniciadores foram desenhados com o auxílio do software Primer Explorer v5 avaliando mais de 1.000 sequências possíveis de acordo com parâmetros termodinâmicos. A reação foi incubada a 61°C por 25 minutos e a detecção dos produtos de amplificação foi realizada em seguida visualmente a partir da coloração da solução: rosa (negativo) e amarelo (positivo). Após otimização, o teste demonstrou especificidade na detecção de *Staphylococcus aureus* e MRSA, além ser simples e rápido com tempo total de análise inferior a 1 hora, desde a amplificação até a interpretação do resultado final. Essa abordagem tem o potencial de aprimorar consideravelmente os cuidados de saúde, proporcionando diagnósticos rápidos, uma vez que a cultura não será necessária e, conseqüentemente, um tratamento mais direcionado e eficiente.

1 WHO, E. Y. OMS destaca prioridades de pesquisa sobre resistência antimicrobiana. 23 de junho de 2023.

2 CHEUNG, G, Y,C; BAE,J, S; OTTO, M. Virulence , v. 12, n. 1, p. 547-569, 2021.

3 YALEW, S, T. Biomedical Journal of Scientific and Technical Research, v. 24, n. 5, p. 18651-18657, 2020.

Agradecimentos:



Captura seletiva de CO₂ e sua cicloadição a epóxidos através de líquidos iônicos à base de ferro sem halogenetos

Jonas Xavier Torres^{1*} (IC), Camila P. Ebersol² (PG), Muhammad Irfan Qadir³ (PQ)

¹ Universidade Federal de Goiás, UFG, Departamento de Química, Goiânia, GO, Brasil, 74690-900.

*e-mail: jonas_torres@discente.ufg.br

Palavras-Chave: CO₂, carbonato-cíclico, LIs, epóxidos, catálise

O estudo investiga a cicloadição do CO₂ em epóxidos para formar carbonatos cíclicos, visando a conversão do CO₂ em produtos químicos úteis, como solventes e combustíveis [1]. Devido à estabilidade do CO₂, utiliza-se catalisadores, como os líquidos iônicos (LIs), conhecidos por suas propriedades como estabilidade térmica e baixa pressão de vapor [2]. O catalisador BMIn.Fe(CN)₆ demonstrou um efeito catalítico promissor em condições moderadas (2 bar, 70 e 100°C, 24 h) (esquema da reação abaixo), alcançando até os 100% de conversão e 100% de seletividade para carbonato como apresentado na tabela abaixo. Os estudos realizados demonstram um promissor efeito de seletividade desse catalisador frente a formação de carbonatos cíclicos. As amostras foram solubilizadas em clorofórmio deuterado (CDCl₃) e a quantificação dos produtos foi realizada por ressonância magnética nuclear de prótons e carbono (RMN ¹H e ¹³C).

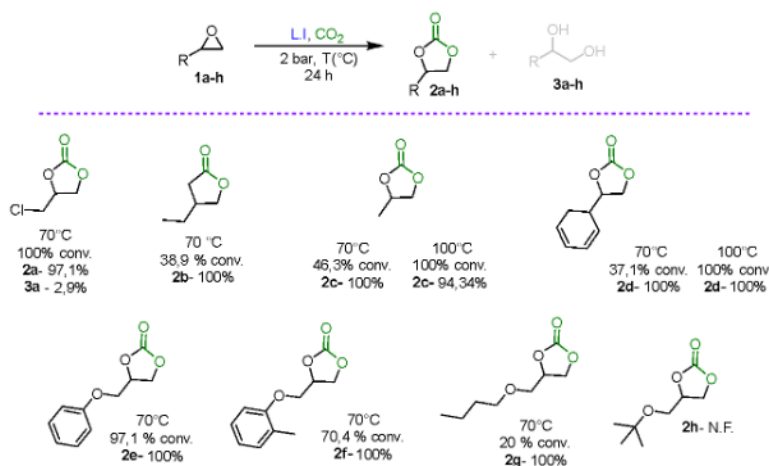


Tabela 1: Resultados de conversão e seletividade para os diferentes epóxidos

[1]. Vinicius K. Tomazett, Gustavo Chacon, Graciane Marin, Marcus V. Castegnaro, Rafael P. das Chagas, Luciano M. Lião, Jairton Dupont, Muhammad I. Qadir, Ionic liquid confined spaces controlled catalytic CO₂ cycloaddition of epoxides in BMIm.ZnCl₃ and its supported ionic liquid phases, Journal of CO₂ Utilization, Volume 69, 2023, 102400, doi: 10.1016/j.cou.2023.102400

[2]. Ou, Y., Roney, C., Alsalam, J. et al. Mitigação profunda de gases de efeito estufa CO₂ e não-CO₂ em direção a futuros de 1,5 °C e 2 °C. Nat Commun 12, 6245 (2021). doi: 10.1038/s41467-021-26509-z.

Agradecimentos:

O autor expressa sua gratidão ao CNPq e ao Instituto de Química IQ-UFG.

Estudo da Formação de Nitrosaminas Através da Nitrosação de Aminas Secundárias e Terciárias: Uma Abordagem Baseada em Dinâmica Molecular e Campo de Força Reativo

Sokadjo Letchede Desire Kouassi¹ (IC), Heibbe Cristhian Benedito De Oliv

¹Estudante, Instituto de Química (UFG), Goiânia-Goiás

²Orientador, Instituto de Química (UFG), Goiânia-Goiás

letchede@discente.ufg.br

palavras-chaves: nitrosação, reaxff, dinâmica molecular.

Resumo

As nitrosaminas são uma classe de compostos que têm atraído atenção significativa devido ao seu potencial carcinogênico^[1,2]. Formadas pela reação de aminas com nitritos, essas substâncias podem ser encontradas em diversos ambientes, incluindo alimentos processados e água potável. A formação de nitrosaminas pode ocorrer tanto em condições ambientais quanto em processos industriais, sendo uma área de preocupação para a saúde pública. Este estudo foca na investigação dos mecanismos de formação de nitrosaminas a partir de aminas secundárias e terciárias utilizando simulações de dinâmica molecular.

O objetivo deste estudo é compreender os mecanismos de formação de nitrosaminas a partir de aminas secundárias e terciárias através de simulações de dinâmica molecular utilizando o campo de força reativo ReaxFF^[3]. Especificamente, buscamos identificar as espécies reativas e os produtos intermediários formados durante o processo de nitrosação.

Para investigar os mecanismos de formação de nitrosaminas, realizamos simulações de dinâmica molecular utilizando o campo de força ReaxFF. As simulações foram conduzidas em diferentes condições de temperatura e concentração de nitritos para avaliar a influência desses parâmetros na formação das nitrosaminas. Os produtos e espécies reativas foram identificados e analisados para compreender melhor os caminhos reacionais.

As simulações revelaram a formação de várias espécies reativas e intermediárias durante a nitrosação de aminas. Em particular, observamos a formação de H_2NO_2 e NO^- , que atuam como agentes nitrosantes (Figura 1). Além disso, identificamos a formação de produtos intermediários, como liberina e camelimidazol (Figura 1), sugerindo possíveis vias alternativas para a formação de nitrosaminas. Os resultados indicam que a nitrosação de aminas terciárias é menos favorecida devido ao impedimento estérico^[4] (figura 1), enquanto a formação de nitrosaminas é mais eficiente na presença de aminas secundárias.

Este estudo demonstrou que a formação de nitrosaminas a partir de aminas secundárias e terciárias pode ser eficientemente investigada através de simulações de dinâmica molecular. Os resultados obtidos fornecem insights valiosos sobre os mecanismos reacionais envolvidos e destacam a importância de considerar diferentes condições reacionais na avaliação do potencial de formação de nitrosaminas.

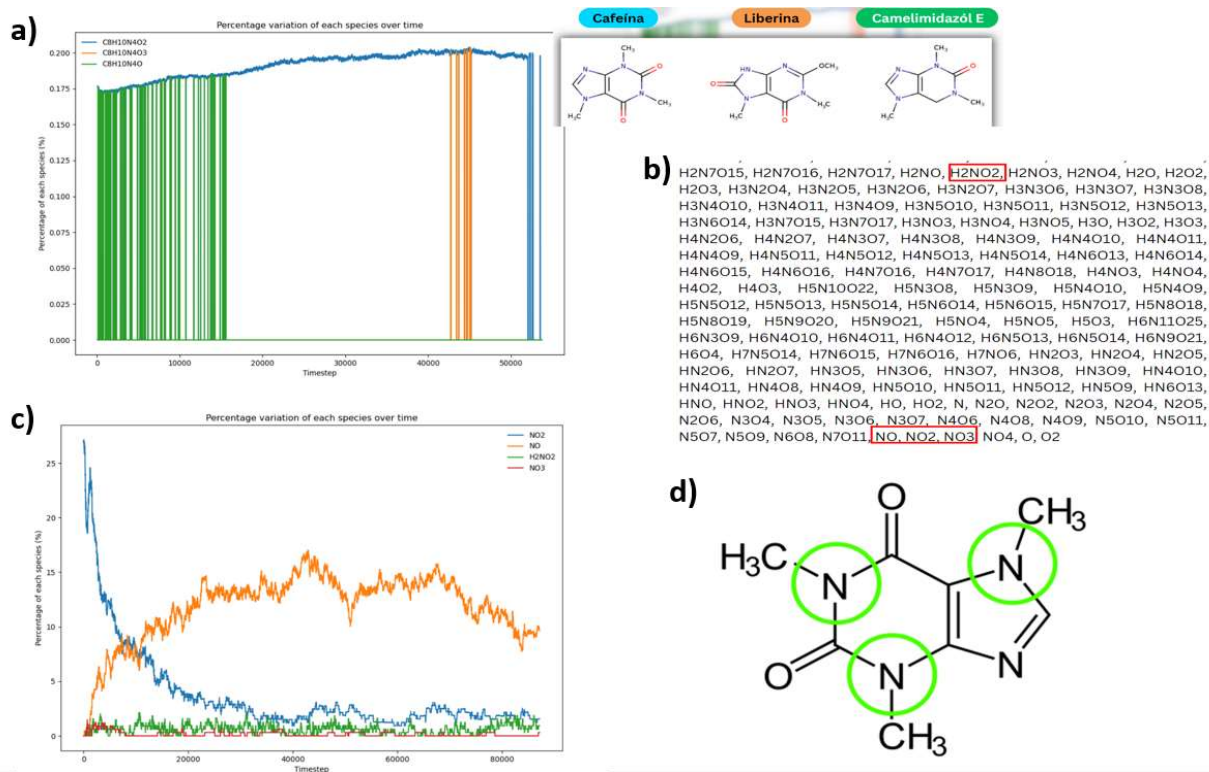


Figura 1: **a)** Gráfico de formação da liberina e camelimidazol **b)** Identificação de alguns agentes nitrosantes, **c)** Porcentagem formada de agentes nitrosantes, **d)** aminas terciárias na molécula da cafeína

REFERÊNCIA

- [1] Adam J. Gushgari, Rolf U. Halden, major sources of human exposure to *N*-nitrosamines, Volume 210, November 2018, Pages 1124-1136.
- [2] Magee, P. N.; Barnes, J. M.; *Adv. Cancer Res*, 2014, 10, 163. [Crossref].
- [3] VAN DUIN, Adri CT et al. ReaxFF: a reactive force field for hydrocarbons. **The Journal of Physical Chemistry A**, v. 105, n. 41, p. 9396-9409, 2001.
- [4] Sal'nikova, L. S., Stankevich, S. V., Maktaz, E. D., Kul'bich, T. S., Terekhova, V. A., Rudneva, I. I., Poromov, A. A., & Kydraliev, K. A. (2019). Nitrosamines in Aquatic Ecosystems: Sources, Formation, Toxicity, Environmental Risk. *Water Resources*, 46(6), 818-831.

Mecanoquímica aplicada à síntese de 2-fenilimidazo[1,2- α]piridina como ferramenta de ensino de química verde

Leonardo Victor E. Guimarães^a, Filipe T. Coelho^a, Felipe L. Coelho^a, Luciano M. Lião^a, José S. S. Neto^a

^a Universidade Federal de Goiás, Instituto de Química, Goiânia, GO, Brasil, 74690-900

*José.Sebasião@ufg.br

Palavras-Chave: Química-Verde, Mecanoquímica, Imidazopiridina, Educação

RESUMO

As aulas práticas na graduação são essenciais para aplicar conceitos teóricos em situações reais, promovendo uma compreensão mais profunda da química. Além disso, elas incentivam a conscientização sobre a química verde e práticas laboratoriais sustentáveis, preparando os estudantes para desenvolverem soluções inovadoras e ecologicamente corretas voltadas à preservação ambiental.¹ Dessa forma, o aprendizado vai além da teoria, preparando os alunos para enfrentar os desafios atuais e futuros com uma visão crítica e sustentável. Nesse sentido, novas metodologias para ensino prático e sustentável vêm sendo desenvolvidas, com o objetivo de integrar os princípios da química verde e a preservação ambiental ao aprendizado experimental na graduação. Assim, no presente trabalho, a mecanoquímica foi explorada como uma alternativa sustentável para a síntese da 2-fenilimidazo[1,2- α]dipiridina, em uma aula experimental. O objetivo foi introduzir os princípios da química verde² por meio de técnicas simples, como mistura manual e vórtex. A metodologia mostrou-se eficaz com os alunos de graduação em química e possui potencial de aplicação em outros cursos, como farmácia e biotecnologia. (Figura 1)

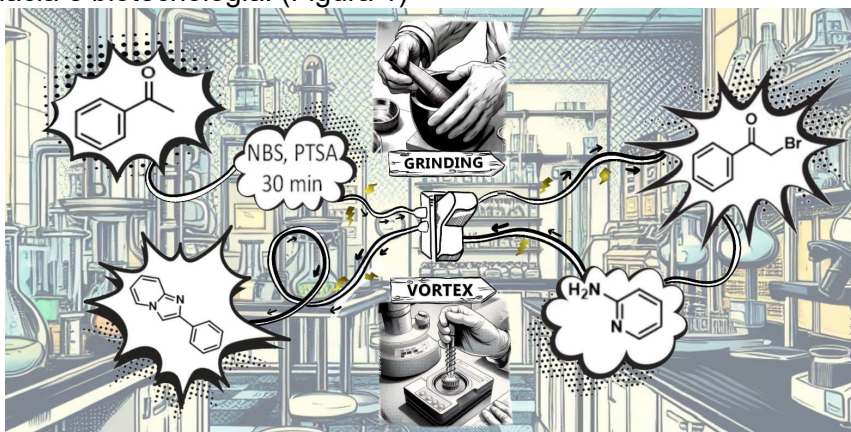


Figura 1. Esquema Geral do trabalho

O experimento foi realizado por 32 estudantes de química em duplas, durante uma aula de 4 horas. Eles alternaram a moagem e deixaram o produto secar por uma semana. Foram calculados o rendimento, ponto de fusão e realizada a caracterização espectroscópica. A brominação α da acetofenona foi adaptada para mecanoquímica, resultando em 96% de rendimento após 30 minutos de moagem. No segundo passo, a reação de 2-bromoacetofenona com 2-aminopiridina foi realizada com trituração manual, resultando em 77% de rendimento após filtração. Ao final dos experimentos, foram destacados os princípios da química verde, os fundamentos teóricos das reações e os alunos foram incentivados a explicar os mecanismos e interpretar os dados de caracterização

1. Santaniello, B. S.; Price, M. J.; Murray Jr., J. K. *J. Chem. Educ.* **2017**, *94*, 388 [https://doi.org/10.1021/acs.jchemed.6b00286]; Costa O. B. S.; Santana, L. L., B.; Cunha, S. *Quim. Nova*, **2015**, *38*, 874 [https://doi.org/10.5935/0100-4042.20150080]; Cunha, S.; Lião, L. M.; Bonfim, R. R.; Bastos, R. M.; Monteiro, A. P. M.; Alencar, K. S. *Quim. Nova*, **2003**, *26*, 425 [https://doi.org/10.1590/S0100-40422003000300022]; Cunha, S., Fontes, T., Araujo, D. M., Riatto, V. B. *Quím. Nova*, **2018**, *41*, 116 [https://doi.org/10.21577/0100-4042.20170138].

2. Anastas, P. T.; Warner, J.; *Green Chemistry: Theory and Practice*, Oxford University Press: **1998**.

Agradecimentos: CNPq, Funape-UFG, IQ-UFG

Uso de rejeitos de mineração como catalisadores no craqueamento de poliestireno visando a obtenção de hidrocarbonetos para gasolina de alta performance

Lilian F. de Oliveira^{a*} (IC), Lucas F. Marinho^a (IC), Dayane C. da Costa^a (PG), Nelson R. Antoniosi Filho^a (PQ)

^aLaboratório de Métodos de Extração e Separação (LAMES), Instituto de Química, Universidade Federal de Goiás, Goiânia, Goiás, Brasil, 74690-900

*e-mail: lilianfernandes@discente.ufg.br

Palavras-Chave: *craqueamento; plásticos; poliestireno; catalisadores; gasolina.*

A demanda por combustíveis de alta qualidade e a necessidade de gerenciar resíduos plásticos têm fomentado pesquisas por alternativas na produção, por exemplo, da chamada gasolina Podium, combustível de alta performance com alta octanagem e ótimo poder de combustão. Nesse contexto, o uso de resíduos plásticos, como o poliestireno, se estabelece como potenciais matérias-primas na produção de combustíveis, a partir do craqueamento catalítico, processo de quebra das cadeias poliméricas para formação de hidrocarbonetos menores constituintes da gasolina (5 a 12 átomos de carbono).¹ A utilização de catalisadores derivados de rejeitos de minerações, com ação catalítica devido a presença de óxidos metálicos ou silicatos na composição, promove uma aplicação vantajosa para esses materiais no craqueamento de resíduos plásticos.^{1,2} Portanto, o objetivo deste trabalho é avaliar a eficiência dos catalisadores derivados de rejeitos de mineração e analisar a composição dos produtos obtidos ao empregar o craqueamento do poliestireno, previamente tratado com acetona para remoção do ar e compactação do plástico, em uma temperatura constante de 360°C, sob agitação por 60 minutos, utilizando-se 10% do catalisador com base na massa de plástico pesada. A caracterização dos óleos foi feita via cromatografia gasosa (GC) acoplada a espectrometria de massas (MS). Os rendimentos líquidos dos óleos obtidos no craqueamento com rejeito da barragem de Brumadinho (88,56%) e com o rejeito de mineração de esmeraldas (87,76%) foram semelhantes. Os óleos resultantes do uso de cada catalisador apresentaram hidrocarbonetos aromáticos com cadeias na faixa de 7 a 24 carbonos. O craqueamento com o catalisador de rejeito da barragem de Brumadinho resultou em maiores teores de hidrocarbonetos de menor massa molecular, como tolueno, etilbenzeno e estireno, em comparação com os provenientes do craqueamento a base do rejeito de mineração de esmeraldas. Embora os catalisadores apresentem diferenças em suas composições químicas, ambos se mostraram promissores na ação catalítica do craqueamento do poliestireno, com rendimentos líquidos médios satisfatórios e elevados teores de hidrocarbonetos aromáticos mais leves que podem apresentar grande potencial como componentes essenciais para a produção da gasolina de alta performance. Ademais, o craqueamento de plásticos, como o isopor, com catalisadores derivados de rejeitos de mineração propõe um novo destino para esses materiais com papel fundamental nas reações de catálise.

¹M.F. Paucar-Sanchez et al. Thermal and catalytic pyrolysis of a real mixture of post-consumer plastic waste: An analysis of the gasoline-range product. *Process Safety and Environmental Protection* 168 (2022) 1201–1211. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.psep.2022.11.009>.

²B. Hegedüs et al. Investigation of gasoline-like transportation fuel obtained by plastic waste pyrolysis and distillation. *Journal of Cleaner Production* 447 (2024) 141500. <https://doi.org/10.1016/j.jclepro.2024.141500>.

Agradecimentos: IQ/UFG, LAMES, ANP, FUNAPE.

CARACTERIZAÇÃO DAS DIFERENÇAS NA COMPOSIÇÃO QUÍMICA VOLÁTIL DA CERA DE OUVIDO DEVIDO AO SEU FENÓTIPO VIA HS/GC-MS

Ana Luiza R. R. da Cunha^a (PG), João Marcos G. Barbosa^a(PG), Rhyan César S. Dias^a(IC), Ícaro N. Camelo ^a(PG), Marcos Filipe R. e Silva ^a(PG), Lurian C. David^a(PG), Nelson Roberto Antoniosi Filho^a(PQ)

^a LAMES – Laboratório de Métodos de Extração e Separação, Instituto de Química UFG, Goiânia, GO, Brasil, 74690-900

*e-mail: analuiza.reis@discente.ufg.br

Palavras-Chave: Perfil metabólico, volatolômica, cerúmen, GC-MS

A cera de ouvido ou cerúmen é uma matriz biológica complexa produzida no canal auditivo externo através das secreções de glândulas apócrinas e sebáceas.¹ Devido sua composição química ampla, essa biomatriz têm demonstrado grande potencial em estudos de fenotipagem metabólica global para investigações clínicas. Além do estado fisiológico do indivíduo, outros fatores também podem causar mudanças no perfil químico volátil encontrado na cera de ouvido, como por exemplo a idade, sexo e o fenótipo do cerúmen. No que diz respeito ao fenótipo da cera, essa biomatriz pode apresentar uma ampla faixa de coloração, que varia de amarelo claro a preto. Já quanto ao seu tipo, a cera de ouvido pode ser classificada em seca ou úmida, sendo essa característica determinada por dois alelos no gene *ABCC11*, na qual um polimorfismo de nucleotídeo único nesse gene codifica uma proteína que promove uma variação na secreção da glândula apócrina, alterando assim o tipo de cera.¹ Dessa forma, a diferença no fenótipo da cera pode ser acompanhada de alterações na composição química do cerúmen.² Nesse sentido, é de fundamental importância determinar os metabólitos que se relacionam diretamente com o fenótipo da cera, a fim de discriminá-los daqueles relacionados ao estado fisiológico de um indivíduo. Portanto, o objetivo desse trabalho foi avaliar de forma ampla as diferenças da composição química volátil da cera de ouvido devido ao seu fenótipo (cor e tipo) utilizando a técnica de extração por *headspace* estático seguida da análise via cromatografia gasosa acoplada à espectrometria de massas (*HS/GC-MS*). Foram incluídas nesse trabalho amostras de 83 indivíduos, sendo elas classificadas quanto sua cor (“clara” e “escura”) e quanto ao seu tipo (“seca” e “úmida”). O perfil químico volátil de cada amostra foi determinado através de *HS/GC-MS* e as diferenças metabólicas entre os grupos avaliados foi determinada por análises estatísticas paramétricas (análise de variância – ANOVA e teste t-Student). Foram encontrados compostos de diversas classes químicas (ácidos orgânicos, álcoois, aldeídos, amidas, aminas, cetonas, estes, éteres, hidrocarbonetos, entre outros compostos). Não foram encontradas diferenças estatisticamente significativas entre o número médio de compostos extraídos de cada grupo de amostra. Ainda assim, a quantidade média de éteres e ésteres entre os grupos avaliados foram estatisticamente diferentes entre os grupos de amostras. A cor da amostra não foi um fator determinante para o perfil volátil das amostras. Entretanto, quanto ao tipo (cera seca ou cera úmida), foram encontrados 26 compostos que apresentaram diferença significativa entre os grupos, indicando que a presença e a quantidade desses compostos no cerúmen são diretamente influenciadas pelo fenótipo do cerúmen, quanto ao tipo de cera. Os resultados aqui dispostos são importantes para ampliar o conhecimento dos fatores que afetam a composição química da cera de ouvido, bem como para destacar o potencial e as limitações dessa biomatriz não-convencional em estudos volatolômicos.

¹ Shokry E, Filho NRA. *Biochem Med (Zagreb)*. 2017 Oct 15;27(3):030503.

² Prokop-Prigge KA, Mansfield CJ, Parker MR, Thaler E, Grice EA, Wysocki CJ, Preti G. *J Chem Ecol*. 2015 Jan;41(1):67-74.



Análise de Compostos Orgânicos Voláteis (VOCs) em 4 tipos de queijos artesanais via HS/GC-MS

Marcos Filipe Ramos e Silva^{a*} (PG), Dayane Cristina da Costa^a (PQ), Nelson Roberto Antoniosi Filho^a (PQ)

^a Laboratório de Métodos de Extração e Separação (LAMES), Instituto de Química (IQ), Universidade Federal de Goiás (UFG), Campus II – Samambaia, Goiânia, GO, 74690-900, Brasil

*e-mail:mfilipers@discente.ufg.br

Palavras-Chave: Ácidos graxos, Cromatografia, PCA e PLSDA.

Os queijos são alimentos que possuem grandes variações em relação a textura, sabor, aroma, aspecto, processo de produção, apresentam alto valor nutricional e grande variedade em relação a tipos, além disso, são produtos muito consumidos em todo o mundo, no Brasil o consumo per capita ultrapassa os 5,0 kg segundo estudo publicado pela Embrapa em 2023. Tendo em vista o grande consumo e as variedades desse alimento, buscou-se investigar a composição química da fração volátil de diferentes tipos de queijo. Assim, foram analisados queijos que participaram do VI Concurso de Produtos Lácteos do Centro Oeste, sendo 6 queijos do tipo prato, 6 do tipo minas padrão, 6 do tipo parmesão e 9 do tipo muçarela.

Para a realização dessas análises a extração se deu por *headspace* (HS) e foi utilizada a técnica de cromatografia gasosa (GC) com detecção feita por espectrometria de massas (MS). Em cada análise pesou-se 7,0 gramas de amostra, seguida da extração por 30 minutos a 150°C com uma agitação constante de 700 rpm. A programação de temperatura do forno iniciou a 40°C por 10 minutos, seguida por uma rampa de aquecimento de 5°C/min até atingir 240°C, mantendo esta temperatura constante por 20 minutos, totalizando 70 minutos de corrida cromatográfica.

Após a obtenção dos resultados experimentais foi possível observar a variação no perfil químico dos diferentes tipos de queijos, além da presença de substâncias variadas pertencentes a diversas classes químicas como aldeídos, cetonas, álcoois, ésteres, ácidos graxos e outras classes com menos compostos. Em relação a composição química os compostos com presença em praticamente todas as amostras foram os ácidos carboxílicos, sempre ocorrendo em números pares de carbono, isto é, os ácidos de 2 até 20 carbonos com cadeia normal e saturada, exceto o ácido oléico. Além disso, a presença de algumas cetonas também foi recorrente, tais compostos podem ser indicadores de maturação dos queijos¹, exemplos são 2-pentanona, 2-heptanona e 2-nonanona. Os compostos presentes apresentam relação com os microorganismos utilizados na produção do queijo², pois estes eliminam metabólitos formados a partir das substâncias presentes no leite e geram a massa final.

Os dados obtidos experimentalmente foram processados e tratados para a realização das análises quimiométricas. Inicialmente foi realizada a análise de componentes principais (PCA), para verificar tendências de formação de grupos há redução de dimensionalidade devido ao baixo número de amostras, assim, foi observado que apenas os queijos parmesão apresentaram discriminação em relação aos demais tipos, estes outros três apresentaram tendência de formação de grupos. Em seguida foi realizada a análise discriminante por mínimos quadrados parciais (PLSDA), para verificar a possibilidade de formação de classes entre as amostras com relação a seus tipos, foi observada uma discriminação das classes para os quatro tipos de queijos. A partir da PLSDA foi obtido um gráfico das *VIPscores*, que indicou os compostos de maior importância na discriminação das classes para essa análise supervisionada dos dados, as principais substâncias apontadas foram respectivamente: 2-metil-propanal, 3-metil-butanal, trissulfeto de dimetila e 2-nonanona, sendo todos de alta importância para discriminação da classe parmesão, isto é, todas apresentaram *VIPscore* acima de 2,0.

1 Manning, D. J., & Moore, C. (1979). *Journal of Dairy Research* (Vol. 46).



2 Ricci, M., Gasperi, F., Betta, E., Menghi, L., Endrizzi, I., Clicerì, D., Franceschi, P., & Aprea, E. (2023). *LWT*, 173.

Estudos Reacionais Para a Síntese de 2-(fenilselenil)ciclohexan-1-ona Mediada por Ácido Tricloroisocianúrico.

Filipe T. Coelho^a, Jordanna Prado Matias Gomes, Felipe L. Coelho^a, Luciano Morais Lião^a e José S. S. Neto^a

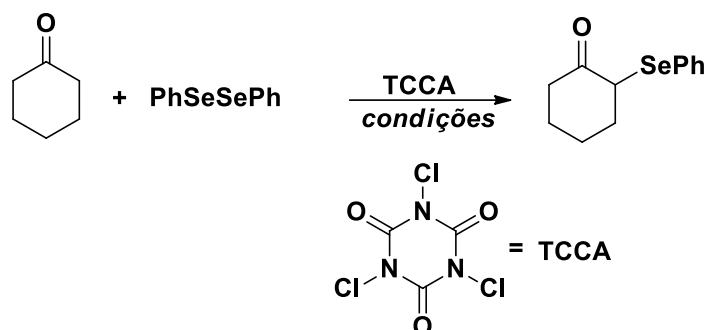
^aUniversidade Federal de Goiás, Instituto de Química, Goiânia, GO, Brasil, 74690900

*filipecoelho@discente.ufg.br

Palavras-Chave: Química-Verde, Síntese, Otimização, Selenetos, Sustentabilidade.

RESUMO

A formação de ligações C-Se tem despertado crescente interesse na síntese orgânica, devido às propriedades biológicas benéficas dos compostos que as contêm, incluindo atividades antioxidante, anti-inflamatória, anticancerígena e anti-Alzheimer.¹ Os diorganoil-selenetos, em particular, são amplamente reconhecidos por essas atividades. O ácido tricloroisocianúrico (TCCA), um reagente verde, estável e econômico, é comumente utilizado na desinfecção de piscinas e em reações de cloração e oxidação. Quando combinado com diorganoil-dicalcogenetos, o TCCA proporciona uma abordagem ambientalmente amigável para a geração de eletrófilos de calcogênio.² Diante disso, o presente estudo teve como foco a otimização da síntese de organoselenil-cetonas a partir de ciclohexanona, disseleneto de difenila e TCCA (Esquema 1).



Esquema 1. Equação geral para síntese de 2-(fenilselenil)ciclohexa-1-ona

Os estudos apresentados a seguir investigaram a otimização das condições para a síntese de 2-(fenilselenil)ciclohexan-1-ona. Foram avaliados diferentes parâmetros, como solvente, proporções de reagentes, tempo e temperatura, com o objetivo de determinar as condições ideais. O melhor rendimento, de 95%, foi alcançado utilizando 1 mmol de cetona, 0,17 mmol de TCCA, 0,25 mmol de disseleneto de difenila, etanol como solvente, à temperatura ambiente, em um período de 1 hora. A caracterização do produto foi realizada por RMN-¹H e RMN-¹³C, confirmando sua estrutura. A metodologia mostrou-se eficiente e sustentável, e trabalhos futuros investigarão sua aplicação a outros substratos e condições reacionais.

1[a] Chen, Z., Lai, H., Hou, L. & Chen, T. Rational design and action mechanisms of chemically innovative organoselenium in cancer therapy. *Chem. Commun.* 56, 179 (2020). [b] Sonawane, A. D., Sonawane, R. A., Ninomiya, M. & Koketsu, M. Diorganyl diselenides: A powerful tool for the construction of selenium containing scaffolds. *Dalton Trans.* 50, 12764 (2021).

2. [a] Neto, J. S. S. et al. Trihaloisocyanuric acids in ethanol: An eco-friendly system for the regioselective halogenation of imidazoheteroarenes. *Green Chem.* 22, 3410 (2020). [b] Yang, F., Yang, Z., Li, H., Jia, F. & Yang, Y. Occurrence and factors affecting the formation of trihalomethanes, haloacetonitriles and halonitromethanes in outdoor swimming pools treated with trichloroisocyanuric acid. *Environ. Sci. Water Res. Technol.* 4, 218 (2018).

Agradecimentos: CNPq, Funape-UFG, IQ-UFG

ATIVIDADE ANTIVIRAL DE COMPLEXOS DINUCLEARES DE Cu(II) COM LIGANTE OXAMATO DERIVADO DO BIS-TIAZOL

Karolina Nascimento da Silva^a (IC), Adima Araújo de Alencar^a (IC), Mariany dos Santos Silva^a (PG) e Danielle Cangussu de Castro Gomes^a (PQ)

^a Universidade Federal de Goiás, Instituto de Química, Goiânia, Goiás, Brasil, 74690-900

*karolinanascimento@discente.ufg.br

Palavras-Chave: Síntese, Arbovírus, Cristal.

Os complexos metálicos são fundamentais para a manutenção dos processos bioquímicos nos organismos vivos, tornando-se um tema de grande relevância na ciência. A química de coordenação, em particular, tem desempenhado um papel crucial ao sintetizar complexos metálicos com diversas aplicações na medicina terapêutica e diagnóstica. Neste estudo, o objetivo foi sintetizar complexos de Cu(II) com ligantes do tipo oxamato e investigar suas atividades biológicas contra diversos arbovírus. Os complexos dinucleares $[\{Cu(bipy)(DMF)\}_2(dabtzo)]$ (**1**) e $[\{Cu(pmdta)\}_2(dabtzo)] \cdot 2DMF \cdot 2H_2O$ (**2**) (dabtzo = N,N'-(4,4'-bitiazol-2,2'-diyl)-bis(oxamato), bipy = 2,2'-bipiridina, e pmdta = N,N,N',N'',N''-Pentametildietilenotriamina) foram sintetizados e submetidos a evaporação lenta, resultando em monocristais verdes que foram caracterizados por espectroscopia na região do infravermelho e difração de raios X de monocristal. A atividade antiviral foi investigada em linhagens celulares infectadas com os vírus Chikungunya (CHIKV), Zika (ZIKV) e Mayaro (MAYV) na presença ou ausência dos compostos. Foi avaliado a viabilidade celular em células incubadas com os compostos e a inibição da replicação viral em células incubadas com os complexos em concentrações específicas, cujos resultados estão apresentados na Tabela 1. Os pré-ligantes bipy, dabtzo e pmdta foram testados individualmente e não demonstraram inibição da replicação viral. Embora estudos detalhados sobre os mecanismos antivirais estejam em andamento, os resultados cristalográficos de difração de raios X de monocristal revelam que ambos os complexos consistem em unidades dinucleares de Cu(II) com o ligante dabtzo⁴⁻ em ponte entre essas unidades. O ligante tridentado pmdta e o dabtzo⁴⁻ em **2** completam a esfera de coordenação do Cu(II) ao bloquear a posição axial, resultando em uma geometria piramidal quadrada. Em contraste, o ligante bipy é bidentado, permitindo a coordenação na posição axial através dos oxigênios do oxamato da unidade dinuclear vizinha, levando a uma estrutura polimérica em **1** com menor solubilidade. Consequentemente, o complexo **2** apresenta maior solubilidade, o que contribui para seu desempenho superior nos estudos antivirais.

Table 1 – Inibição de replicação viral em concentrações específicas dos compostos.

	1		2	
	Inibição de Replicação	Concentração	Inibição de Replicação	Concentração
CHIKV	67,7 %	10 µM	81,2 %	10 µM
ZIKV	47,4 %	10 µM	91,4 %	50 µM
MAYV	44,7 %	2 µM	94,4 %	50 µM

1 RONCONI, Luca; SADLER, Peter J. *Coordination Chemistry Reviews*, v. 251, p. 1633-1648, 2007.

2 KALINKE, Lucas H. G. et al. *Inorganic Chemistry*, v. 61, n. 15, p. 5696-5700, 2022.

Agradecimentos: UFG, UFU, CAPES, CNPq e FAPEG.

Oxidação seletiva catalisada por KIO₃ de tiois em dissulfetos usando água sob condições ambiente

Lucas Augusto Araújo* (PG), Sumbal Saba^a (PQ), Jamal Rafique^b (PQ)

^aUniversidade Federal de Goiás (UFG), Instituto de Química, Goiânia, Goiás, Brasil, 74.690-900

^bUniversidade Federal do Mato Grosso do Sul (UFMS), Instituto de Química, Campo Grande, Mato Grosso do Sul, Brasil, 79070-900

*e-mail: Lucas_araujo_augusto@discente.ufg.br

Palavras-Chave: Sustainable synthesis, bioactivity

O enxofre é o 16^o elemento mais abundante na crosta terrestre, e os compostos organossulfurados têm grande relevância biológica e farmacológica. As ligações dissulfeto, presentes em compostos como a cistina e dissulfeto de dialila, desempenham funções essenciais em sistemas biológicos e são amplamente utilizadas em síntese orgânica. No contexto da pandemia de COVID-19, verificou-se que as ligações dissulfeto influenciam a afinidade de ligação da proteína spike ao receptor ACE2.

Devido à importância dos dissulfetos em síntese orgânica, o desenvolvimento de métodos sustentáveis e eficientes para sua preparação é essencial. Muitos métodos tradicionais para oxidar tiois em dissulfetos sofrem de limitações, como o uso de solventes não verdes e catalisadores de metais tóxicos. A água, por ser um solvente universal e ambientalmente benigno, tem ganhado destaque na química verde.

Desenvolvemos um protocolo sustentável para a oxidação de tiois a dissulfetos simétricos, utilizando KIO₃ como catalisador em água à temperatura ambiente. A reação foi otimizada utilizando tiofenol como substrato modelo e monitorada por microextração em fase sólida (SPME) e análise de headspace.

O protocolo se mostrou eficaz para uma ampla variedade de tiois, incluindo ariltiois e tiois heterocíclicos, com rendimentos bons a excelentes. A adição do surfactante Triton X-100 melhorou significativamente os rendimentos de tiois pouco solúveis em água. O catalisador KIO₃ demonstrou ser reciclável, mantendo sua eficiência por até quatro ciclos consecutivos.

Foi desenvolvido um método verde, eficiente e econômico para a síntese de dissulfetos simétricos. O protocolo é escalável, utiliza água como solvente, KIO₃ como catalisador não tóxico e dispensa o uso de metais de transição, tornando-o uma alternativa sustentável para a síntese orgânica.

1 SOUSA, José et al. *Chemistry* v. 16, n. 6, p. 814, 2023.

Agradecimentos:





ELECTROCHEMICAL SENSOR WITH GOLD NANOSTRUCTURES FOR NITRITE MONITORING IN TAP WATER

João Vitor F. Paiva^{a*} (PG), Daniel A. de Azevedo^b (PG), Pedro V. V. Romanholo^a (PG), Sergio A. S. Machado^c (PQ), Maria L. Felsner^{d,e} (PQ), Andressa Galli^d (PQ), Livia F. Sgobbi^a (PQ)

^a UFG, Instituto de Química, Goiânia, GO, Brazil, 74690-900

^b UFG, Instituto de Física, Goiânia, GO, Brazil, 74690-900

^c USP, Instituto de Química de São Carlos, São Carlos, SP, Brazil, 13566-590

^d UNICENTRO, Departamento de Química, Guarapuava, PR, Brazil, 85040-080

^e UEL, Departamento de Química, Londrina, PR, Brazil, 86057-970

*e-mail: joaoouvittor97@discente.ufg.br

Palavras-Chave: *Electrochemical sensor, Nitrite, Printed electrode, Drinking water, Analytical validation.*

Elevated nitrite concentrations can cause significant environmental and health problems. The Ministry of Health and the National Environmental Council (CONAMA) have set the maximum nitrite limit in drinking water at 1.0 mg L⁻¹. Conventional analytical methods, such as chromatography and spectrophotometry, provide accurate results, exhibiting high specificity and selectivity. However, they come with significant drawbacks, including the need for large or medium-sized instrumentation, which makes real-time and in situ analyses impractical, as well as the requirement for specialized personnel to operate the equipment. As a result, electrochemical sensors have emerged as a promising analytical tool, offering simplicity in construction, portability, affordability, high sensitivity, and rapid analysis through point-of-care testing. In this context, the present work presents the fabrication, development, optimization, and validation of a disposable electrochemical sensor for the detection and quantification of nitrite in drinking water. The device is based on the electrodeposition of gold nanostructures on the working electrode's surface. The electrodes were screen-printed using carbon conductive ink. Gold electrodeposition was carried out via chronoamperometry, applying -0.3 V for 600 s in a solution of 1.5 mmol L⁻¹ tetrachloroauric acid in 0.1 mol L⁻¹ H₂SO₄ medium. The detection process involved chronoamperometry, which monitored the oxidation of nitrite in a solution containing NaClO₄ (0.1 mol L⁻¹) and H₂SO₄ (pH 2) as the supporting electrolyte. Chronoamperometric parameters were optimized to apply 0.576 V for 20 seconds. The analytical curve for nitrite was prepared using the standard addition method in tap water, which showed a linear range of 1.0 to 24.0 μmol L⁻¹. The limit of detection (LOD) and limit of quantification (LOQ) were 0.72 μmol L⁻¹ (0.033 mg L⁻¹) and 2.18 μmol L⁻¹ (0.100 mg L⁻¹), respectively. The LOD and LOQ values are below the maximum value stipulated by Brazilian legislation. Precision estimates were obtained through repeatability tests, in which 5 replicates were performed in a single day using the same electrode (RSD = 12.54%). For intermediate precision tests, 5 measurements were taken over 3 different days using nine distinct electrodes, resulting in an RSD of 23% and a Horrat value of 0.72. Recovery assays were conducted, yielding results within the recommended range of 80-110%. Based on the analyzed figures of merit, the developed sensor demonstrated good precision, low limits, and adequate linearity for its application, showing potential for real-time analyses.

1POULSEN, 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, 2018.
2RAO, 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, 2017.

Agradecimentos: SIIQ, CNPQ, FAPEG (Processo n° 202310267001369), UFG.

Simple Method for Glyphosate Determination Using Distance-Based μ PADs

Lucas Cauê C. de Oliveira^{1*} (IC), Nikaele S. Moreira (PG)¹, Wendell K. T. Coltro (PQ)^{1,2}

¹ Universidade Federal de Goiás, Instituto de Química, Goiânia, Goiás, Brazil, 74001-970

²Instituto Nacional de Ciência e Tecnologia de Bioanálítica, Campinas, SP, Brazil, 13083-970

*e-mail: lccothe12th@gmail.com

Palavras-Chave: Glyphosate, μ PADs, Distance based detection.

Glyphosate is a non-selective systemic herbicide widely used to combat various plants and weeds in crops. Although the use of this herbicide provides better productivity in agriculture, the use of glyphosate has been causing speculation about its risks to the environment and public health since it has been linked to several diseases.¹ Therefore, analyzing glyphosate at the point of need (PON) becomes essential. Conventional analysis methods are laborious, time-consuming, limited portability, and require sophisticated equipment and qualified personnel for the analyses. So, microfluidic paper-based analytical devices (μ PADs) emerge as an alternative for the analysis of glyphosate at the PON since they are low-cost, practical to manufacture, require reduced amount of sample and low energy consumption. In addition, μ PADs are affordable and portable. Furthermore, the association of μ PADs with distance-based detection, in which the analyte concentration is correlated with the distance traveled by the analyte along a channel, further enables the application in PON since the distance measurement can be performed with a scale printed on the device, or with the aid of a measuring instrument, such as a ruler or caliper. In this sense, the present work aims to develop μ PADs with distance-based detection to analyze glyphosate in environmental samples. For this, the μ PADs were designed in Software Corel Draw, containing a rectangular channel of 44 mm in length connected to a circular zone of 5 mm in diameter. The device layout was cut out of a 125 μ m polyester sheet using the cutting plotter (Silhouette Cameo). The chromatographic paper was then placed between the polyester sheets and heated to 180 °C for 20 min so that the polyester film's thermosensitive glue penetrated the paper's pores, creating hydrophobic barriers (Fig. 1A). The detection of glyphosate was based on the method proposed by Chang et al.,² which inhibits the peroxidase-like activity of Cu (II). The glyphosate molecule acts by complexing with the copper Cu²⁺, reducing the amount of copper available to catalyze the oxidation of TMB with hydrogen peroxide (Fig. 1B). Thus, the reaction occurs along the channel as soon as the sample is added to the circular zone, in which a decrease in the intensity of the blue color resulting from the oxidation of TMB was observed. Based on the preliminary results, the methodology employed is promising for detecting glyphosate in the PON using μ PADs.

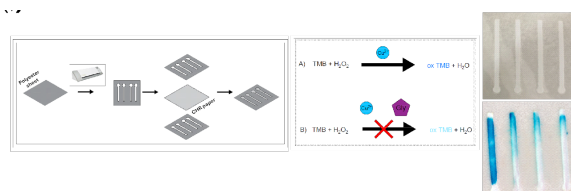


Figure 1. (A) Scheme of the device fabrication. (B) Reaction mechanism. (C,D) Optical images showing the final device before and after reaction of glyphosate at 0, 5, 10 and 20 mM.

¹ Gui, Y.X. et al., Neurotoxicology and Teratology, 34(3), 2012, 342-349. DOI: 10.1016/j.ntt.2012.03.005.

² Chang, Y. Et al., Sensors and Actuators B: Chemical, 228, 2016, 410-415. DOI: 10.1016/j.snb.2016.01.048.

DIRECT SELENYLATION OF C(SP²)-H OF IMIDAZOPYRIDINES WITH KIO₃-CATALYZED DIPHENYL DISELENIDES FOR THE CONSTRUCTION OF BIOACTIVE COMPOUNDS

Jhefferson dos Santos Guilhermi^a (PG), Renata Trentin Perdomo^b (PQ), Jamal Rafique^b (PQ), Sumbal Saba^a (PQ)

^a Universidade Federal de Goiás (UFG), Instituto de Química, Goiânia, Goiás, Brasil, 74.690-900

^b Universidade Federal do Mato Grosso do Sul (UFMS), Instituto de Química, Campo Grande, Mato Grosso do Sul, Brasil, 79070-900

*e-mail: jheffersonguilhermi@discente.ufg.br

Palavras-Chave: Sustainable synthesis, imidazopyridine, selenium, bioactivity

The functionalization of indole and imidazo[1,2-*a*]pyridine nuclei is a highly relevant task, since these compounds are present as active ingredients in several drugs, such as alpidem, miroprofen, naratriptan and delavirdine.^{1,2} In addition, the formation of C-Se bonds has aroused the interest of the academic community due to its potential biological applications.³ In the last decades, compounds containing this type of bond have demonstrated antioxidant, anti-inflammatory, antitumor and antiviral activities.⁴ Although there are promising methodologies in the literature, some still face limitations regarding sustainability, such as the use of non-green solvents, low atomic efficiency, dependence on transition metal catalysts and the need for multiple steps in the process.^{5,6}

Here, we report a greener protocol for the synthesis of 3-Se-indoles and imidazo[1,2-*a*]pyridines via direct chalcogenation of the C(sp²)-H bond of heteroarenes with half molar equivalents of different dichalcogenides, using KIO₃ as a non-toxic and easy-to-handle catalyst, 100°C for 6h and a stoichiometric amount of glycerol. The reactions were carried out by conventional heating, during which the catalyst, additive, time and temperature parameters were optimized. The compounds obtained were purified by normal phase chromatography and characterized by Nuclear Magnetic Resonance (NMR). After optimization, the scope of the reaction was analyzed, investigating the influence of different functional groups present in the structures. Electron donor and acceptor groups were considered, as well as aliphatic, aromatic and bulky groups, both in the indole and imidazopyridine nucleus and in the selenium compounds. Finally, some structures were forwarded for biological tests by collaborating groups.

The reaction features high yields based on atom economy, easy gram-scale performance, metal- and solvent-free conditions, as well as applicability to different types of N-heteroarenes. The methodology is of interest, since the selenylated imidazo[1,2-*a*]pyridines produced proved to be efficient and less toxic than conventional drugs for the study of biocompatibility and pro-oxidant effects in tumor cells.

1 R. Dalpozzo, *Chem. Soc. Rev.* 2015, 44, 742–778;

2 M. Bandini, A. Eichholzer, *Angew. Chem. Int. Ed.* 2009, 48, 9608–9644;

3 A. L. Braga, J. Rafique, in *The Chemistry of Organic Selenium and Tellurium Compounds*, Vol. 4, Wiley, Chichester, 2014, Chapter 13–15, pp. 989–1174;

4 D. Plano, D. N. et. al, *J. Med. Chem.* 2016, 59, 1946–1959;

5 H.-A. Du, R.-Y. Tang, et. al, *Adv. Synth. Catal.* 2011, 353, 2739–2748;

6 C. Ravi, N. N. K. et. al, *J. Org. Chem.* 2016, 81, 9964–9972.

Agradecimentos:



IQ
INSTITUTO DE QUÍMICA



Síntese de novo composto organometálico de rutênio(ii) contendo ligante hidroximato

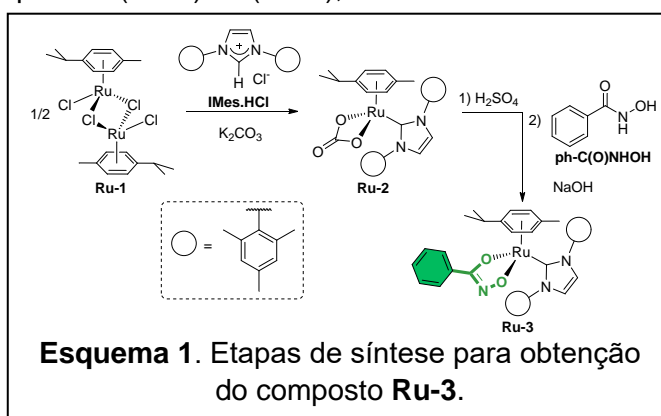
Rodney Alarcon Silva Filho* (IC), **Leonildo Alves Ferreira** (PG)

Grupo de Catálise e Inovação – Gcati, Grupo de Catálise e Inovação - Gcati, Instituto de Química, Universidade Federal de Goiás - UFG, Goiânia, Goiás, Brasil, 74690-900

*e-mail: rodney_filho@discente.ufg.br

Palavras-Chave: Catálise Homogênea; Química organometálica; Rutênio; Ligante Hidroximato

Os catalisadores organometálicos atualmente disponíveis para metátese de olefinas frequentemente perdem eficiência ou se degradam em água, mesmo em pequenas quantidades, limitando suas aplicações em processos industriais ou em reações em meio biológico.^{1,2} Um dos motivos que rendem pouca tolerância à água aos catalisadores de metátese de olefinas de rutênio(II) comerciais é a presença de ligantes cloreto, facilmente hidrolisáveis. Neste contexto, o presente projeto visou a síntese de compostos de rutênio(II) contendo ligantes hidroximatos (RC(O)N=O) em substituição aos ligantes cloretos. Tais ligantes possuem o potencial de conferir maior tolerância aos compostos organometálicos de rutênio(II), permitindo o desenvolvimento de pré-catalisadores para metátese de olefinas com maior resistência, especialmente em água, e aplicá-los para a promoção de Catálise Sustentável a partir da valorização de matérias-primas renováveis. O pró-ligante ácido fenil-hidroxâmico (**ph-C(O)NHOH**) foi sintetizado a partir da reação entre hidroxilamina e benzoato de metila que, por sua vez, foi sintetizado a partir da reação de esterificação de Fischer do ácido benzoico. O complexo [Ru(CO₃)(IMes)(p-cimeno)] (**Ru-2**) (IMes = = 1,3-Bis(2,4,6-trimetilfenil)-1,3-di-hidro-2H-imidazol-2-ilideno) foi sintetizado utilizando o dímero precursor [RuCl₂(p-cimeno)]₂ (**Ru-1**), o pró-ligante IMes.HCl e K₂CO₃ em acetona, fazendo-se algumas modificações de um procedimento descrito na literatura.³ Em seguida, **Ru-2** foi reagido com ácido sulfúrico seguido da adição do pró-ligante **ph-C(O)NHOH** e hidróxido de sódio, para formar o complexo [Ru(Ph-C(O)=NO)(IMes)(p-cimeno)] (**Ru-3**) (Esquema 1). Todas as etapas de síntese dos compostos organometálicos de rutênio(II) foram realizadas em condições não-anidras. Os compostos foram caracterizados por espectroscopia de ressonância magnética nuclear de hidrogênio, RMN-1H. Os resultados obtidos até o momento indicam um progresso significativo na direção de sintetizar um catalisador de rutênio(II) que seja resistente à hidrólise em ambientes aquosos. Com a síntese dos compostos (**Ru-2**) e (**Ru-3**), eles ainda deverão ser avaliados como catalisadores na reação de metátese de olefinas, para verificar se as modificações nos ligantes resultam em uma maior durabilidade e eficiência catalítica. Estes estudos podem permitir que novos catalisadores que possam operar em condições aquosas e ser aplicados em uma variedade de reações importantes na indústria química sejam sintetizados.



¹ Blanco CO, Sims J, Nascimento DL, Goudreault AY, Steinmann SN, Michel C, Fogg DE. ACS Catalysis, 11, 2021, 893.

² Blanco CO, Fogg DE. ACS Catalysis, 13 (2), 2023, 1097.

³ Ma X, Guillet SG, Peng M, Van Hecke K, Nolan SP. Dalton transactions, 50(11), 2021, 3959.

Agradecimentos: IQ-UFG

Fabrication of 3D Printed Microfluidic Devices with Integrated Sensor Electrodes for Electrochemical Detection of Ketamine

Genildo dos S. Costa-Junior^a (PG), Mauricio M. L. Pereira^a (PG), Lucas C. Duarte^a (PG), Luciano C. Arantes^b(PQ), Wallans T. P.dos Santos^c (PQ), Wendell K.T.Coltro^a(PQ)^a

^a Universidade Federal de Goiás, Instituto de Química, Goiânia, GO, Brazil, 74690-900

^b Polícia Civil do Distrito Federal, Instituto de Criminalística, Brasília, DF, Brazil, 70610-907

^c Universidade Federal dos Vales do Jequitinhonha e Mucuri, Diamantina, MG, Brazil, 39100-000

*genildojunior@discente.ufg.br

Palavras-Chave: 3d printing, electrochemistry, amperometry, ketamine.

Ketamine is a pharmaceutical drug with psychoactive properties that has gained popularity as a recreational drug in teenagers^{1,2}. Due to increasing consumption, innovative methods for detecting and quantifying this compound are crucial. Conventional methods like spectroscopy and colorimetric tests are widely used, but they may face challenges with colored samples, specialized labor requirements and low selectivity. Consequently, this study aims to develop microfluidic devices with integrated sensing electrodes using a 3D printer based on fused deposition modeling (FDM) technology. The integrated device containing microfluidic channels and sensing electrodes was designed in a straight format (Figure 1A) and printed using polylactic acid (PLA) and PLA doped with carbon black for conductive regions. The channels were 45 mm long, 1 mm wide, and 1 mm deep. The electrochemical cell comprised three electrodes with a theoretical geometric area of 2 mm² each. The electrodes were electrochemically/chemically pretreated with 1 mol L⁻¹ NaOH via amperometry for 10 min at potentials of 1.4 and -1.0 V. Initially, a redox probe composed of Fe(CN)₆^{4-/3-} was used to demonstrate the feasibility of the 3D printed device. For this purpose, the flow was generated into microchannels using an NE-300 syringe pump from New Era Pump Systems with a flow rate fixed at 25 μL min⁻¹ of 0.1 mol L⁻¹ KCl. Different aliquots (2-10 μL) of sample containing 1 mmol L⁻¹ Fe(CN)₆^{4-/3-} was injected into microchannels using an Eppendorf Multipette® E3 automatic micropipette. As can be seen in Figure 1B, the larger the sample injection volume, the higher the recorded peak current. Afterwards, the 3D printed device was tested for detecting Ketamine drug. 10-μL aliquots of 1 mmol L⁻¹ Ketamine solution were sequentially injected through an automatic pipette under a continuous flow (300 μL min⁻¹) of 0.12 mol L⁻¹ Britton-Robinson (BR) buffer (pH 7) containing 10 mg mL⁻¹ sodium dodecyl sulfate (SDS). The relative standard deviation for 10 consecutive injections (Figure 1C) was 9.1%. The proposed device revealed linear behavior (Figure 1D) for the Ketamine concentration range between 0.5 and 2.5 mmol L⁻¹. Future investigations will be focused on eliminating the electrode fouling, studying selectivity, and analyzing seized samples.

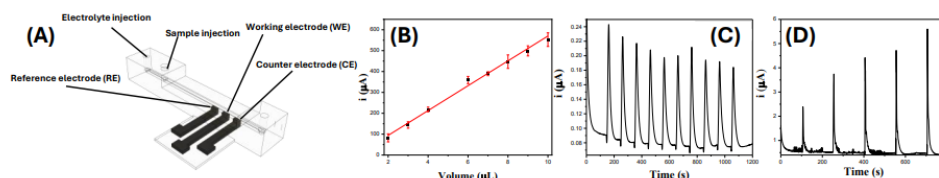


Figure 1: (A) Layout of the 3D printed microfluidic device containing sensing electrodes for amperometric detection; (B) Effect of the sample injection volume on the recorded peak current using a redox probe composed of 1 mmol L⁻¹ Fe(CN)₆^{4-/3-} under continuous flow of KCl at 25 μL min⁻¹. (C) Consecutive injections (10 μL aliquots) of 1 mmol L⁻¹ Ketamine under a continuous flow (300 μL min⁻¹) of BR buffer containing SDS. (D) Amperograms recorded for the injection (10 μL) of Ketamine solutions prepared in the concentration range between 0.5 and 2.5 mmol L⁻¹. For the detection of Fe(CN)₆^{4-/3-} and ketamine, the potentials applied to the working electrode were 1.3 V (vs C), respectively.

1. Ding, Y., Li, X., Guo, Y. et al., Anal. Bioanal. Chem. 409, 2017, 7027–7034.

2. Jin, C., Li, M., Duan, S. et al., Biosens. Bioelectron. 226, 2023, 115134.

[CNPq, CAPES, FAPEG, INCTBio]

Assessment of Paper Treatment Methods for the Development of Distance-Based Microfluidic Devices Using Office Paper

Lara Gabriela de F. Andrade¹(IC), Nikaele S. Moreira (PG)¹, Wendell K. T. Coltro (PQ)^{1,2}

¹ Universidade Federal de Goiás, Instituto de Química, Goiânia, Goiás, Brazil, 74001-970

²Instituto Nacional de Ciência e Tecnologia de Bioanálítica, Campinas, SP, Brazil, 13083-970

e-mail: lgfa0602@gmail.com

Palavras-Chave: Paper treatment, microfluidic, fluid flow.

Microfluidic paper-based analytical devices (μ PADs) are widely explored due to the advantages provided by their properties in analysis¹. Different paper sources including nitrocellulose, filter, chromatographic, tissue, and towel papers have been used for manufacturing μ PADs, in which chromatography paper is by far the most popular. Sousa et al. recently reported the use of office paper as an extremely low-cost alternative material to manufacture μ PADs². From this perspective, the objective of the present work is to evaluate washing and modification methods and modifying to improve the microfluidic transport through capillarity effect on μ PADs fabricated using office paper, given that this native paper does not present good capillarity due to additives from the industrial production process. They were printed on an A4 sheet (grammage of 75 g/m²) using a wax printer and then heated in an oven at 150°C for 5 min to form the hydrophobic barriers. The first treatment was performed by immersion of the devices in a 0.5 mol L⁻¹ potassium periodate (KIO₄) solution, an oxidizing agent, and the second treatment was performed only by immersing devices in ultrapure water. The immersion times evaluated were 5, 15, 30 and 60 min. Both devices were dried at room temperature. For the evaluation of the treatment, 20 μ L of a mixture containing 0.1 mol L⁻¹ NaOH and 1% phenolphthalein were added to the circular zone, and the distance traveled by the solution in the rectangular channel was measured between the times 3 and 15 min using a digital caliper. The data obtained from treatments 1 and 2 are presented in Figures 1. It is possible to observe that treatment 2 (Figs. 1B and 1D), with only water, presented better results in relation to microfluidic transport through capillarity action, with greater flow of the solution in comparison with treatment 1 (Figs. 1A and 1C). The lateral flow velocity was calculated for each time investigated to evaluate the best immersion time of the devices in treatment 2. The velocity values ranged from 3.57 to 5.14 mm/min, with immersion for 30 min being responsible for the highest velocity. Thus, as future perspectives, we intend to evaluate other paper treatment methods, different grammages as well as to explore office paper for producing devices for clinical diagnostics.

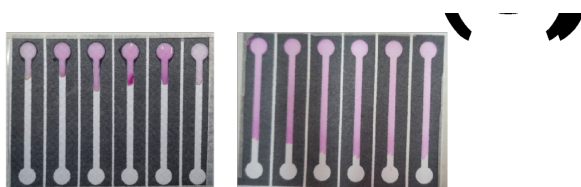


Figure 1. (A, B) Optical images and (C, D) measured distance values for the colored plug length on office paper microfluidic devices. The data were obtained for the distance traveled during 15 minutes for different immersion times (A, C) in KIO₄ solution (treatment 1) and (B, D) in water (treatment B).

¹Kamel, A., et al., *Analytical and Bioanalytical Chemistry*, 414, 1783–1793, 2022.

²Sousa, Lucas R. et al. *Lab on a Chip*, v. 24, n. 3, p. 467-479, 2024.

CONVERSÃO DE CO₂ EM PROPILENO CARBONATO VIA ORGANOCATÁLISE

Dion Carlos Moreira Filho (IC)^a, Reniedy Flávia Clemente Dias (PQ)^a, Yuri Clemente Andrade Sokolovicz (PQ)^b, Davi F. Back (PQ)^b, Rafael Pavão das Chagas (PQ)^{a,c}

^a Universidade Federal de Goiás, Instituto de Química, Goiânia, Goiás, Brasil, 74.690-900

^b Universidade Federal de Santa Maria, Instituto de Química, Santa Maria, Rio Grande do Sul, Brasil, 97.105-900

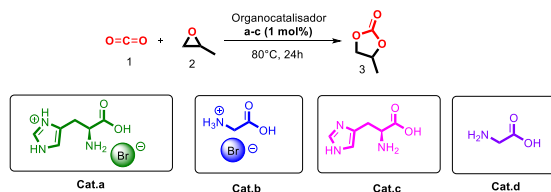
^c CEHTES - Centro de Excelência em Hidrogênio e Tecnologias Energéticas Sustentáveis, Goiânia, Goiás, Brasil, 74.690-900

dion_carlos@discente.ufg.br

Palavras-Chave: dióxido de carbono; aminoácidos; organocatálise; propileno carbonato.

A conversão química do dióxido de carbono (CO₂) em produtos químicos valiosos é crucial na química verde e sustentável, sendo o CO₂ uma fonte abundante e renovável de carbono. A alta estabilidade do CO₂ exige o uso de catalisadores para realizar a sua conversão química. No presente estudo, produzimos bromidratos derivados de 2 aminoácidos: L-histidina e glicina. Esses catalisadores foram empregados na conversão do CO₂ em propileno carbonato (PC). A síntese dos organocatalisadores foi realizada utilizando ácido bromídrico 48% (HBr), sob agitação de 24 horas à temperatura ambiente. Todos os catalisadores foram caracterizados por RMN de ¹H e ¹³C empregando DMSO-*d*₆ como solvente deuterado e por ESI-MS [1]. Além disso, o estudo de DFT foi empregado com o funcional B3LYP e o conjunto de bases 6-31++G(d). Os cálculos foram realizados utilizando o software Gaussian 09W e o software Chemcraft foi empregado para visualização e renderização dos orbitais. Os testes reacionais foram realizados no reator de aço-inox. A condição reacional empregada foi de 14 mmol de óxido de propileno (P.O) (**2**), 8 bar de CO₂ (**1**), 1 mol % do catalisador em relação ao P.O, 80°C e 24h. A conversão foi determinada por RMN de ¹H (CDCl₃, 400 MHz), analisando a mistura reacional bruta. Os testes preliminares com bromidrato de L-histidina (**a**) e bromidrato de glicina (**b**), demonstraram uma conversão de P.O a P.C de 95% e <1%, respectivamente. Enquanto isso, os aminoácidos livres (**c** e **d**) não catalisaram a reação de conversão para propileno carbonato.

Esquema 1- Obtenção de carbonato propileno a partir do óxido de propileno (PO)



Os resultados, demonstraram que no intermediário formado para reação com (**b**), alcançou uma energia livre de Gibbs (ΔG) ‡ notavelmente estável. Ou seja, o intermediário com glicina (**b**) possui uma energia muito mais próxima dos produtos, o que pode representar um composto metaestável. A menor diferença de energia entre os orbitais foi para o intermediário contendo histidina, sugerindo uma maior reatividade. Isto indica que a histidina protonada tem o melhor desempenho catalítico devido a termodinâmica do estado de transição. Esses resultados são animadores, demonstram que os resultados experimentais corroboram com o estudo teórico realizado, permitindo o planejamento de novos testes catalíticos, alterando alguns parâmetros reacionais.

Referências: [1] M. Li, Y. Long, Z. Deng, H. Zhang, X. Yang, G. Wang, *Catal. Commun.* **2015**, 68,4648. **Agradecimentos:** CNPq, FAPPEG, CEHTES.

Conversão de CO₂: Obtenção de carbonatos cíclicos catalisada por GlyNH₃⁺Br⁻ imobilizada em nanocristais de celulose

Eduarda de Sousa Hirle (IC)^a, Dion Carlos Moreira Filho (IC)^a, Renieidy Flávia Clemente Dias (PQ)^a, Daniel Pasquini (PQ)^b, Rafael Pavão das Chagas (PQ)^{a,c}

^a Universidade Federal de Goiás, Instituto de Química, Goiânia, Goiás, Brasil, 74.690-900

^b Universidade Federal de Uberlândia, Instituto de Química, Uberlândia, Minas Gerais, Brasil, 38.408-100

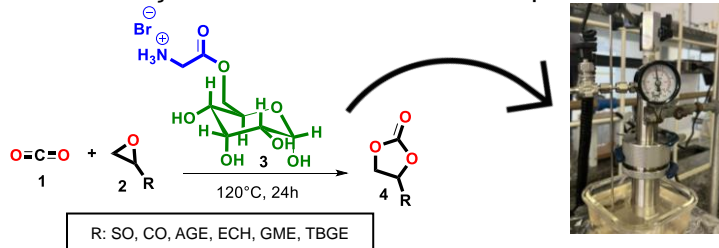
^cCEHTES - Centro de Excelência em Hidrogênio e Tecnologias Energéticas Sustentáveis, Goiânia, Goiás, Brasil, 74.690-900

eduarda.hirle@discente.ufg.br

Palavras-Chave: carbonato cíclico; nanocristais de celulose; dióxido de carbono; catálise heterogênea.

O desenvolvimento da civilização tem sido historicamente ligado ao uso de combustíveis fósseis. A intensa exploração antropológica dos recursos naturais contribuiu para o aumento das concentrações de gases do efeito estufa na atmosfera, por exemplo, o CO₂, causando diversas alterações climáticas. Nesse contexto, uma alternativa para a mitigação de CO₂ é utilizá-lo como um sinton para a construção de moléculas orgânicas com maior valor agregado como: carbonatos, carbamatos, metano e olefinas leves. No presente trabalho, foi avaliada a reação entre CO₂ e epóxidos para a formação de carbonatos cíclicos, usando bromidrato de 2-amino cloreto de etanoíla (GlyNH₃⁺Br⁻) imobilizado em nanocristais de celulose (CNs). Os CNs foram preparados a partir de polpa Kraft de celulose branqueada de eucalipto utilizando ácido sulfúrico (H₂SO₄) 64% (m/v), à 40°C por 45 minutos por agitação magnética constante e a reação foi interrompida com água destilada fria. A solução foi dialisada por 4 dias, sonicada e a suspensão dos CNs resultantes foi armazenada a 4°C. Os NCs foram funcionalizados com o sal iônico (GlyNH₃⁺Br⁻), usando um sistema de refluxo por 24 horas em tolueno e piridina como base. Posteriormente, o material obtido, GlyNH₃⁺Br⁻@NC, foi lavado com acetona, seco à 40°C por 72 horas e caracterizado por EDS, DRX, MEV, IV e TGA [1]. O material (GlyNH₃⁺Br⁻@NC, **3**) foi usado como catalisador na reação entre CO₂ (**1**) e diferentes epóxidos (**2**) (Esquema 1). Os resultados catalíticos demonstraram que houve conversões entre 84 e 100% dos epóxidos em seus respectivos carbonatos. Entretanto, ao utilizar apenas o sal iônico com uma carga de 2 mol%, a conversão do óxido de estireno em carbonato de estireno foi de apenas 7%. Além disso, na reação usando apenas a CNs no sistema com CO₂ e óxido de estireno, não foi formado carbonato de estireno. Os resultados catalíticos com GlyNH₃⁺Br⁻@NC são relevantes pois demonstram a eficiência de um organocatalisador imobilizado, produzido de forma simples a partir de dois materiais orgânicos (celulose e um derivado de aminoácido), na conversão seletiva de CO₂ e epóxidos em carbonatos cíclicos.

Esquema 1- Obtenção de carbonatos cíclicos a partir de vários epóxidos ^{a,b,c}



Legenda: ^aCondições de reação: **1**: pressão de CO₂ (8 bar); **2**: 5 mmol; **3**: 30% (m/m); 24 horas em refluxo a 120°C; ^bConversão determinada por espectroscopia de Ressonância Magnética Nuclear (RMN) de ¹H da mistura reacional bruta (CDCl₃, 500 MHz); ^c A síntese foi feita dentro de um reator modelo pequeno.

Referência: [1] Z. Wu et al., Cellulose, 25, 4905–4918, (2018).

Agradecimentos: CNPq, FAPEG, CEHTES.

COMPLEXOS METÁLICOS DE BIS(PIRAZOL)-PIRIDINA COMO CATALISADORES PARA CICLOADIÇÃO DE CO₂ EM EPÓXIDOS

Marcel M. Amorim^{a*} (IC), Álvaro F. A. da Mata^a (PG), Jorge L. S. Milani^b (PQ), Rafael P. das Chagas^a (PQ)

^a Universidade Federal de Goiás – UFG, Instituto de Química, Goiânia, Goiás, Brasil, 74.690-900
^b Universidade Federal de Juiz de Fora – UFJF, Departamento de Química, Juiz de Fora, Minas Gerais, Brasil, 36.036-900

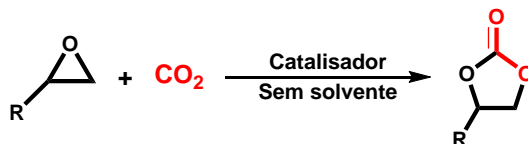
*marcel.amorim@discente.ufg.br

Palavras-Chave: Complexos metálicos, Catálise homogênea, Dióxido de carbono, Carbonato cíclico

RESUMO:

O dióxido de carbono (CO₂) a cada dia mais vem se tornando uma pauta de preocupação global por parte das autoridades climáticas e pela população em geral, devido ao fato deste gás ser um dos responsáveis pelas mudanças climáticas. O crescente nível de concentração de CO₂ na atmosfera terrestre é reflexo das emissões substanciais de gases poluentes geradas, além dos altos índices de devastação da vegetação florestal.

Dessa forma, diante da grande dependência ainda existente de recursos fósseis finitos, utilizados como fonte de carbono, o estudo de vertentes de sínteses mais sustentáveis vem ganhando destaque. Assim, o CO₂, matéria prima renovável, não tóxica e barata, surge como uma opção de bloco de construção C1¹ para a síntese de moléculas de maior valor agregado e de grande demanda industrial, assim como os carbonatos cíclicos². Essa molécula pode ser obtida através da reação de cicloadição de CO₂ em epóxidos, como observado no Esquema 1.



Esquema 1. Reação genérica de cicloadição de CO₂ em epóxidos.

Assim, este trabalho investiga a atividade catalítica de uma série de complexos metálicos de bis(pirazol)-piridina para produção de carbonatos cíclicos. Inicialmente, foram sintetizados dois tipos de ligantes, 2,6-bis(*N*-pirazol)-piridina e 2,6-bis(3,5-dimetil-*N*-pirazol)-piridina, os quais foram posteriormente coordenados com diversos íons metálicos, resultando em uma série de complexos metálicos. Posteriormente, esses complexos foram utilizados como catalisadores, utilizando um reator sob condições de experimento controladas de pressão, temperatura e tempo. Os resultados revelaram uma alta atividade catalítica dos complexos de zinco, sendo o de maior destaque o que possuía o primeiro tipo de ligante, evidenciado pelas elevadas conversões do produto. Esses resultados destacam a relevância da pesquisa em catalisadores de zinco para o avanço da química sustentável.

¹ DA MATA, Álvaro Farias Arruda et al. **New Journal of Chemistry**, v. 46, n. 25, p. 12237-12243, 2022.

² LEAL, Julia PSC et al. **Inorganic Chemistry**, v. 60, n. 16, p. 12263-12273, 2021.



Bioherbicidas obtidos a partir de resíduos de cascas de frutos do Cerrado

Ingrid Alves Dourado (IC), Maria Isabel Ribeiro Alves* (PQ)

Universidade Federal de Goiás, Instituto de Química, Goiânia, GO, Brasil, 74690-900

*e-mail: misabel@ufg.br

Palavras-Chave: biodefensivos, bioherbicidas, resíduos, plantas do Cerrado

O uso intensivo de pesticidas convencionais na agricultura por um longo período criou desafios como poluição dos ecossistemas terrestre, aquático e atmosférico; bioacumulação e biomagnificação; perdas de biodiversidade; insurgência de pragas secundárias; eliminação de inimigos naturais/benéficos e diversas doenças aos seres humanos e animais. A crescente preocupação com as consequências ao meio ambiente e à saúde humana e dos animais, tem levado a comunidade científica a buscar alternativas sustentáveis aos herbicidas sintéticos, e neste contexto, bioherbicidas tem se revelado uma excelente ferramenta eco-friendly para o manejo sustentável de ervas-daninhas. Bioherbicidas consistem em microrganismos como patógenos e outros micróbios ou fitotoxinas derivadas de micróbios, insetos ou extratos de plantas que atuam como um meio natural de controle de plantas daninhas.

A literatura reportando a obtenção de bioherbicidas a partir de plantas é vasta¹, envolvendo vários biomas, e neste trabalho pretende-se avaliar as potencialidades de cascas de frutos do Cerrado como possíveis herbicidas naturais e sustentáveis. As espécies que terão as cascas de seus frutos avaliadas serão: **Araticum (*Annona crassiflora*)**, **Buriti (*Mauritia flexuosa*)**, **Cagaita (*Eugenia dysenterica*)²**, **Coquinho azedo (*Butia capitata*)**, **Jatobá (*Hymenaea sp.*)**, **Mangaba (*Hancornia speciosa*)**, **Murici (*Byrsonima crassifolia* (L.) Rich)**, **Pequi (*Caryocar brasiliense*)**, e **Pitomba (*Talisia esculenta*)**. Dentre essas espécies, o araticum, a cagaita e o pequi têm relatos de atividade herbicida de suas folhas, casca do caule e raízes. No entanto, não há trabalhos avaliando a casca dos frutos destas espécies. Assim, este trabalho pretende avaliar as cascas dos frutos em função de gerarem resíduos, e muitas vezes não serem aproveitados ou, então, terem usos menos nobres, agregando valor a esta fonte de biomassa. Além disso, não há a necessidade de retirar partes da planta visto que já há uma atividade de aproveitamento desses frutos na indústria extrativista, principalmente a alimentícia e a de cosméticos.

Os extratos serão obtidos via extração etanólica, a partir do fatiamento das cascas e posteriormente roto-evaporação para obtenção do extrato concentrado. Soluções nas concentrações variando de 0,5 ppm a 500 ppm serão aplicadas em espécies de plantas daninhas e culturas para avaliação da atividade herbicida e da seletividade dos compostos naturais.

1 Novaes P, Torres PB, Santos DYAC. Braz. J. Bot (2016) 39(1):131–137

2 Pina GO, Borghetti F, Silveira CES, Pereira LAR. *Allelopathy Journal* 23 (2): 313-322 (2009)

Agradecimentos: **CNPq**



ESTADO DA ARTE DO PREPARO DE AMOSTRAS *QuEChERS* PARA ANÁLISES MULTIRRESÍDUOS DE PESTICIDAS

João Victor Borges Assis^{a*} (PG), Andréa Rodrigues Chaves^a (PQ)*
^a Universidade Federal de Goiás, Instituto de Química, Goiânia, GO, Brasil, 746990-900

*e-mail: andrea_chaves@ufg.br

Palavras-Chave: monitoramento, extração, robustez, sustentabilidade.

Nos últimos anos, o preparo de amostras tem tido crescente demanda por procedimentos que sejam mais rápidos, simples e sustentáveis, mantendo a precisão, exatidão e robustez. O método *QuEChERS*, acrônimo para *Quick, Easy, Cheap, Effective, Rugged, e Safe*, surgiu como uma alternativa inovadora no preparo de amostras para determinação de multiresíduos de pesticidas. Atualmente, o método *QuEChERS* tem se expandido e é amplamente adotado em análises rotineiras, tornando-se o método oficial tanto pela *Association of Official Agricultural Chemists* (AOAC, método 2007.01) quanto pelo *European Committee for Standardisation* (CEN, Método 5662) para determinação de multiresíduos destes analitos em amostras de frutas e vegetais.¹ Desenvolvido por Anastassiades e colaboradores, em 2003, o método apresenta múltiplas vantagens, como a ampla aplicabilidade em diferentes matrizes (biológicas, alimentícias e ambientais), altos percentuais de recuperação, baixo custo, rapidez e facilidade de preparo.² O procedimento combina a extração sólido-líquido com particionamento por *salting-out* e uma etapa de limpeza por extração em fase sólida dispersiva (*clean-up*). As variáveis que influenciam a eficiência da extração incluem a quantidade e composição da amostra, o tipo e proporção do solvente, o modo de agitação, temperatura e tempo de extração, além do uso de sais, co-solventes e sorventes específicos na etapa de limpeza. Originalmente, foi aplicado ao preparo de amostras de frutas e vegetais, utilizando 10 g de amostra e 10 mL de acetonitrila (ACN), seguido de agitação, centrifugação, adição de sulfato de magnésio (MgSO₄), cloreto de sódio (NaCl) e amina primária-secundária (PSA). A escolha de ACN como solvente se deve à sua eficiência na separação de fases e menor extração de componentes lipofílicos, além de sua compatibilidade com cromatografia líquida e cromatografia gasosa. A adição de sais ao extrato faz com que, além de ocorrer a separação da fase aquosa e orgânica, haja uma diminuição da solubilidade dos analitos polares na fase aquosa. Por outro lado, o uso de sais de metais alcalinos para promover a separação de fases pode reduzir o desempenho do sistema do espectrômetro de massa devido ao acúmulo de resíduos não voláteis na fonte de ionização. Pensando nisso, alternativas, como sais de amônio quaternário, têm sido estudadas para mitigar este problema. Adicionalmente, a variação do pH demonstrou ter pouco impacto na recuperação dos pesticidas quando a ACN é utilizada. Em relação aos sorventes usados, o PSA tem se destacado por sua capacidade de remover maiores quantidades de coextratos da matriz, especialmente quando combinado com carbono grafitado negro (GCB). Contudo, a forte afinidade do GCB por moléculas planares pode resultar na remoção de pesticidas estruturalmente planos, razão pela qual o PSA sozinho é frequentemente preferido. A popularidade dos kits comerciais *QuEChERS* por diversos fabricantes reforça sua aplicação prática e bem aceita.³ Portanto, tal preparo de amostras tem se consolidado como uma ferramenta essencial para análise de multiresíduos, destacando-se por sua simplicidade, eficiência e adaptabilidade a diferentes matrizes.

1 Santana-Mayor A, Socas-Rodríguez B, Herrera-Herrera AV, Rodríguez-Delgado MA. Trends in Analytical Chemistry. 2019.

2 Anastassiades M, Lehoutay S, Stajnbaher D, Schenck F. J. J. AOAC Int. 2003.

3 Santana-Mayor A, Rodríguez-Ramos R, Herrera-Herrera AV, Socas-Rodríguez B, Rodríguez-Delgado MA. Trends in Analytical Chemistry. 2023.

Agradecimentos: Os autores expressam sua gratidão à CAPES, CNPq e FAPEG.

Estudos Reacionais na Síntese de Selenil Cromenonas a Partir de 2-Alquinil Benzoesteres via Fotocatálise

Gustavo F. de Paula^{a*} (IC), Felipe L. Coelho^a (PQ), Luciano M. Lião^a (PQ), José S. S. Neto^a(PQ).

^a Universidade Federal de Goiás, Instituto de Química, Goiânia, Goiás, Brasil, 74690-900

*e-mail: fernandes_gustavo@discente.ufg.br

Palavras-Chave: ciclização, fotoquímica, calcogênio, heterociclos e química verde.

Na área de síntese orgânica, houve um grande avanço em pesquisas relacionadas à formações de heterociclos calcogenados devido à propriedades biológicas benéficas contidas nesses compostos, como atividades antioxidante, anti-inflamatória, anticancerígena e anti-Alzheimer^[1]. Com isso em mente, o trabalho elaborado discorre sobre um novo método e condições reacionais para a síntese de 3-fenil-4-(fenilcalselenil)-1*H*-isocromen-1-onas por vias foto-catalisadas. A fim de determinar a condição de reação ideal para a ciclização, foram realizadas investigações detalhadas sobre a eficácia de diferentes funcionalizações em diversas classes de moléculas. Esse processo envolveu a variação de diversos parâmetros, incluindo quantidades de reagentes, tipos e volumes de solventes, atmosferas de reação e temperaturas. Através da análise sistemática desses fatores, buscou-se entender como cada um deles afeta o rendimento das reações. Essas otimizações permitiram ajustar as condições experimentais para maximizar a eficiência do método, garantindo resultados mais consistentes e elevados (Figura 1).

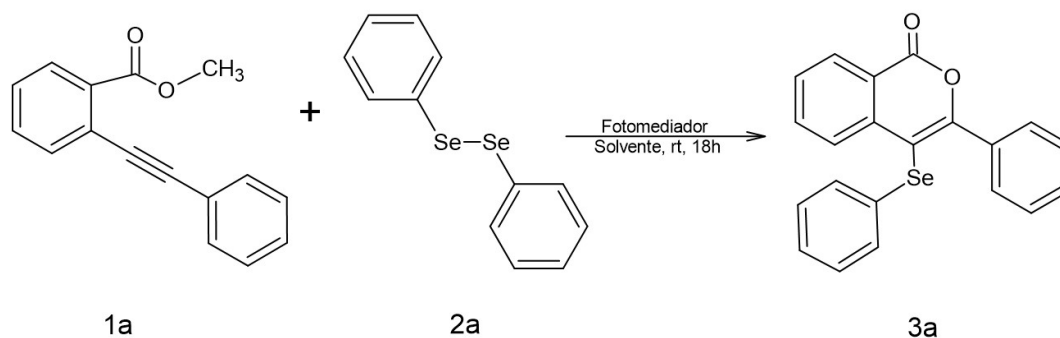


Figura 1. Esquema geral para a síntese de 3-fenil-4-(fenilcalselenil)-1*H*-isocromen-1-onas.

1Chen, Z., Lai, H., Hou, L. & Chen, T. Rational design and action mechanisms of chemically innovative organoselenium in cancer therapy. *Chem. Commun.* 56, 179 (2020). [b] Sonawane, A. D., Sonawane, R. A., Ninomiya, M. & Koketsu, M. Diorganyl diselenides: A powerful tool for the construction of selenium containing scaffolds. *Dalton Trans.* 50, 12764 (2021).

Agradecimentos: CNPq, Funape-UFG, IQ- UFG.



ANÁLISE DE DOCKING MOLECULAR DO COMPOSTO MCX13 COMO POTENCIAL TERAPÊUTICO PARA O TRATAMENTO DA ISQUEMIA: UMA ABORDAGEM EM QUIMIOINFORMÁTICA

João Elias Pinheiro Sousa De Paula^{a*} (PG), Gustavo Almeida de Carvalho^b (PG), Kamilla Moraes Alves^c (PG), Wemenes José Lima Silva^c (PG), Mauro Cunha Xavier Pinto^b (PQ).

^a PPGCF, Farmacologia e Fisiologia/ICB, Goiânia, Goiás, Brasil, 74690900

^b PPGCB, Farmacologia e Fisiologia/ICB, Goiânia, Goiás, Brasil, 74690900

^c PPGCF, Ciências Farmacêuticas/FF, Goiânia, Goiás, Brasil, 74690900

*joao_elias@discente.ufg.br

Palavras-Chave: Isquemia cerebral; Neuroproteção; Transportadores de prolina; Docking molecular.

A isquemia cerebral, caracterizada pela interrupção parcial ou total do fluxo sanguíneo em áreas específicas do cérebro, permanece uma condição de grande desafio terapêutico. Os tratamentos atuais focam na dissolução de coágulos, mas há uma crescente necessidade de novas abordagens farmacológicas, especialmente aquelas que ativam mecanismos de neuroproteção. Nesse contexto, investigam-se os efeitos da inibição dos transportadores de prolina em patologias neurodegenerativas. Utilizando técnicas de docking molecular, este estudo visa elucidar os descritores de ligações moleculares de compostos promissores e avaliar seu potencial de ligação a alvos específicos¹. O composto MCX13, um análogo do LQFM215 — que demonstrou eficácia em modelos de isquemia — foi selecionado para avaliação. Em análises de docking, o MCX13 apresentou um score de -8 para o alvo PROT, juntamente com uma energia de Van der Waals de -23,543, destacando seu potencial como agente terapêutico em condições neurodegenerativas, incluindo a isquemia cerebral².

1Alves, Vinicius & Braga, Rodolpho & Muratov, Eugene & Andrade, Carolina. (2018). Quimioinformática: uma introdução. Química Nova. 41. 202-212. 10.21577/0100-4042.20170145.

2Carvalho GA, Chiareli RA, Marques BL, Parreira RC, de Souza Gil E, de Carvalho FS, da Rocha ALB, Silva RR, Noël F, Vaz BG, Lião LM, Ahmad S, Verli H, Menegatti R, Pinto MCX. L-proline transporter inhibitor (LQFM215) promotes neuroprotection in ischemic stroke. Pharmacol Rep. 2023 Apr;75(2):276-292. doi: 10.1007/s43440-023-00451-x. Epub 2023 Jan 31. PMID: 36719635.

Agradecimentos: Agradeço ao meu orientador Mauro, e aos meus colegas de laboratório que se empenharam para alavancar a prática da bio e quimioinformática no Neurolab. Em especial ao queridíssimo Gustavo pelo companheirismo e grande ajuda.

COMPÓSITOS BASEADOS EM ZIF-67/HIDRÓXIDO DE NÍQUEL COMO MATERIAIS DE ELETRODO PARA O ARMAZENAMENTO DE ENERGIA

Iara Schlag Durães Campos^{a*} (PG), Paulo Roberto Martins^b (PQ).

^a Instituto de Química, Universidade Federal de Goiás, Goiânia, Goiás, Brasil, 74001-970

^b Instituto de Química, Universidade Federal de Goiás, Goiânia, Goiás, Brasil, 74001-970

*iaraschlagc@gmail.com

Palavras-Chave: Hidróxido de níquel, ZIF-67, armazenamento de energia.

Neste trabalho foram desenvolvidos eletrodos modificados de óxido de estanho dopado com flúor (FTO) através da deposição de Ni(OH)₂ sobre o ZIF-67 seguido de um tratamento térmico de 240°C durante 30 minutos. Assim, o comportamento eletroquímico desses eletrodos foi verificado através de técnicas eletroquímicas como a voltametria cíclica e ciclos de carga e descarga.

Através dos voltamogramas cíclicos de cada material foi possível observar um deslocamento de potenciais em função do aumento da velocidade de varredura. Ainda, o material baseado no compósito de ZIF-67/Ni(OH)₂ apresentou as maiores correntes de pico anódico e catódico, quando comparado aos materiais isolados. Ao analisar as curvas de carga e descarga dos materiais, o perfil capacitivo do ZIF-67 e difusional do Ni(OH)₂ e do compósito são evidenciados, além de um aumento na capacitância específica do material – para a densidade de corrente de 1 A.g⁻¹ – obtemos valores em F.g⁻¹ de 82,97 F.g⁻¹, 305,11 F.g⁻¹ e 895,81 F.g⁻¹ respectivamente para o ZIF-67, Ni(OH)₂ e ZIF-67/Ni(OH)₂, [1–3]. Por meio dos resultados, a performance eletroquímica do compósito de ZIF-67/Ni(OH)₂ é evidenciada, sendo um material de interesse na área de armazenamento de energia.

REFERÊNCIAS

- [1] Chodankar NR, Pham HD, Nanjundan AK, et al. True Meaning of Pseudocapacitors and Their Performance Metrics: Asymmetric versus Hybrid Supercapacitors. *Small* 2020; 16: 1–35.
- [2] Mathis TS, Kurra N, Wang X, et al. Energy Storage Data Reporting in Perspective—Guidelines for Interpreting the Performance of Electrochemical Energy Storage Systems. *Adv Energy Mater*; 9. Epub ahead of print 2019. DOI: 10.1002/aenm.201902007.
- [3] Silva CG. *Desenvolvimento de materiais nanoestruturados baseados em hidróxidos mistos de cobalto/mangânês para aplicação em dispositivos eletroquímicos de armazenamento de energia*. Tese de Mestrado, Universidade Federal de Goiás, <http://www.ufrgs.br/actavet/31-1/artigo552.pdf> (2021).

Agradecimentos: Agradeço ao CNPq pela bolsa concedida (131590/2022-7) e ao meu orientador, professor doutor Paulo Roberto Martins, por todo o apoio e ensinamentos.

A emissão de luz azul em polímeros-metais-orgânicos de ampyz influenciada pela esfera de coordenação

Manuela Zoppei Flores (IC), ^{a*} João Humberto Dias Campos (PG), ^a Meiry Edvirges Alvarenga (PQ), ^a Maykon Alves Lemes (PQ), ^a José Antônio do Nascimento Neto (PQ), ^a Freddy Fernandes Guimarães (PQ), ^a Lauro June Queiroz Maia (PQ), ^b Ricardo Costa de Santana (PQ), ^b Felipe Terra Martins (PQ). ^a

^a Instituto de Química -Universidade Federal de Goiás, Goiânia, Goiás, Brasil, 74.001-970

^b Instituto de Física – Universidade Federal de Goiás, Goiânia, Goiás, Brasil, 74.690-900

*e-mail: manuela_flores@discente.ufg.br

Palavras-chave: *Compostos inorgânicos, propriedades ópticas, Difração de raio-X, Teoria do Funcional da Densidade (TD-DFT).*

Novos materiais orgânicos luminescentes de base sólida têm sido extensivamente OLDEs pesquisados hoje em dia para a aplicação prática em dispositivos eletrônicos como os diodos emissores de luz orgânica (OLDEs). Embora, as cores finas sempre terem obtido o progresso com vários componentes emissores de luz, ao atingir a máxima eficiência em dispositivos comercializáveis continua sendo um desafio. Nesse sentido, o conhecimento de quantum yields fotoluminescentes (PLQYs) de candidato para ser os emissores de camadas é o primeiro passo para essa proporção e é difícil prever. PLQY é comumente conhecido apenas pelos internacionais PLQY (iPLQY), definido como a razão de número de fótons emitidos pelo número de fótons absorvidos pelo material, os quais já são pesquisados 100% em importantes exemplos literários. ¹

Este estudo explora a substituição do cádmio por zinco em polímeros de coordenação luminescentes baseados em aminopirazina (ampyz) e acetato, visando aplicações em diodos emissores de luz orgânicos (OLEDs). O polímero original à base de cádmio apresentou alta eficiência na conversão de radiação UV em luz azul, alcançando rendimentos quânticos de fotoluminescência internos e externos (iPLQY e ePLQY) de 77,7% e 75,4%, respectivamente. ¹

Na metodologia, ampyz (0,10 mmol, 9,5mg) e Zn(AcO)₂.2H₂O (0,10 mmol, 22mg) foram dissolvidos em 5mL de etanol e colocados em agitação magnética durante 2 horas, diretamente em frasco de penicilina de 10mL. Os cristais foram formados por evaporação lenta de solvente à temperatura ambiente (cerca de 2 a 3 semanas), posteriormente, eles foram caracterizados pela medida de difração de raio-X de monocristal. ²

O acetato de zinco Zn(AcO)₂ e aminopirazina foram transformados em um cristal de forma isoestrutural, na qual ocorreu a substituição do íon Cd²⁺ por Zn²⁺. O [Zn(ampyz)(AcO)₂(H₂O)] monômero são compostos de assimetria, assim como o [Cd(ampyz)(AcO)₂(H₂O)]. ²

Em resumo, uma nova coordenação de polímeros com alta ePLQY acima de 10% foi obtido das bases da alta eficiência através da estrutura polimérica. O zinco análogo foi eficiente, com o ePLQY de 14,4% da estrutura [Zn(ampyz)(AcO)₂(H₂O)] como um bom candidato de emissor de OLED. ²

Referências:

- 1 Do Nascimento Neto J A, Valdo A K S M, Da Silva C C, Guimarães F F, Queiroz Júnior L H K, Maia L J Q, Santana R C D, Martins F. T. A Blue Light Emitting Cadmium Coordination Polymer With 75.4% External Quantum Efficiency. *Journal Of The American Chemical Society*, V. 141, 2019, P. 3400-3403.
- 2 Campos J. H. D., Alvarenga M A, Lemes M A, Nascimento Neto J A, Guimaraes F F, Maia L J Q, Santana R C, Martins F T. The critical role of the coordination sphere in the high-efficiency blue-light emission from aminopyrazine metal-organic polymers. *Dyes and Pigments*, 186, 2021, 109025.

Agradecimentos: Nós agradecemos o Conselho Nacional de Pesquisa CNPq e CAPES

EFEITO DO TEMPO DE INJEÇÃO PARA O ESTUDO DE COCAÍNA USANDO MICROSSISTEMAS ELETROFORÉTICOS

Joyce M. Araújo^{a*} (IC), Hellen I. Santos^a (PG), Gerson F. Duarte Junior^a (PQ), Wendell K. T. Coltro (PQ)^{a, b}

^aUniversidade Federal de Goiás, Instituto de Química, Goiânia, GO, Brazil, 74690-900

^bInstituto Nacional de Ciência e Tecnologia de Bioanálítica, Campinas, SP, Brazil, 13084-971

*e-mail: joycearaujof@gmail.com

Palavras-Chave: Química forense; microchip de eletroforese; detecção condutométrica sem contato.

A cocaína (COC) é um alcaloide extraído das folhas de coca, planta nativa da América do Sul, México e Indonésia. Atualmente, a COC é uma das drogas de abusos mais consumidas em todo o mundo, tornando-se a base de um mercado multibilionário. As amostras de cocaína de rua podem conter vários adulterantes ou diluentes com o objetivo principal de maximizar a comercialização ilegal nas ruas¹. Assim, diferentes técnicas analíticas são empregadas para separar e detectar adulterantes de drogas. Microsistemas eletroforéticos (MSE) acoplados com detecção condutométrica sem contato (C⁴D) são vantajosos devido à sua miniaturização, portabilidade, análise rápida². Nesse contexto, este estudo avalia o tempo de injeção no modo gated usando MSE-C⁴D, com o objetivo de separar e quantificar a cocaína e alguns de seus adulterantes, como a PROC e a LID. Inicialmente, foi avaliado um tampão composto de 20 mmol L⁻¹ de 2-amino-hidroximetil-propano-1,3-diol (TRIS) e 10 mmol L⁻¹ de ácido 3,4-dimetoxicinâmico (DMX). Esse tampão foi escolhido porque seu pH está próximo dos valores de pKa dos medicamentos, permitindo que o COC e seus adulterantes adquiram uma carga positiva. Um dos parâmetros analisados foi a otimização do tampão de análise para obter as melhores condições de separação de uma mistura contendo PRO, COC e LID. Portanto, como pode ser observado na figura 1A, a melhor detecção e separação foram obtidas usando um tampão TRIS/DMX 20/10 mmol L⁻¹, ajustado com NaOH 0,1 mol L⁻¹ para um pH de 8,4. A injeção eletrocínética foi realizada no modo gated usando uma mistura modelo contendo COC, PRO e LID (500 μmol L⁻¹ cada), variando o tempo de injeção de 1 a 5. Como pode ser visto na Figura 1B, quanto maior o tempo de injeção, maior a intensidade dos picos. De certa forma, isso era esperado, uma vez que o volume da amostra no modo de injeção fechada é controlado por difusão. Considerando os resultados relatados, a estratégia proposta será testada para detectar COC e seus adulterantes na faixa de μmol L⁻¹, permitindo assim seu uso para triagem rápida de drogas de rua apreendidas.

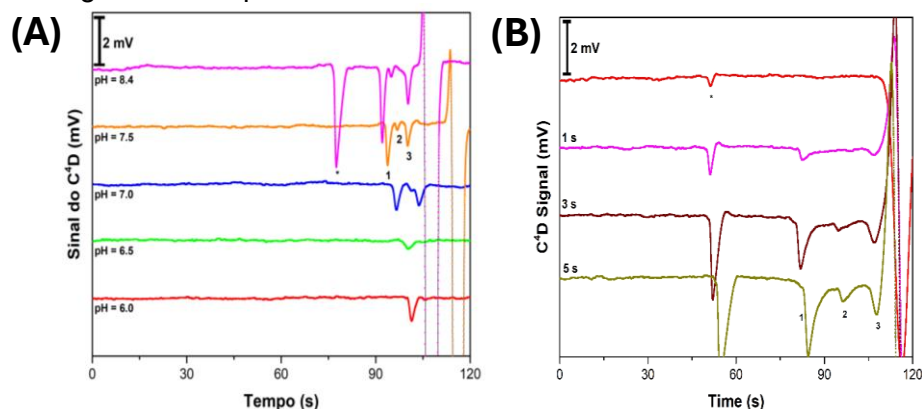


Figure 1. (A) Eletroferograma mostrando a otimização do tampão de 20 mmol L⁻¹ de TRIS e 10 mmol L⁻¹ de DMX na separação da PRO (1), COC (2) e LID (3) ajustando-se o pH com HCl ou NaOH. (B) Variação do tempo de injeção de 1, 3 e 5s. * Na⁺. As condições de detecção foram: Frequência de 1100 kHz e tensão de excitação de 20 V_{peak-to-peak}.

¹Marra MC, Costa BMC, Munoz RAA, Santana MHP, Maldaner AO, Botelho ÉD, Coltro WKT, Richter EM. *Analytical Methods*, v. 10, n. 24, 2018, p. 2875-2880.

²Santos HI, Pinheiro KMP, Richter EM, Coltro WKT. *Talanta*, v.266, p.124960, 2024.

MONITORING LACTOSE HYDROLYSIS WITH CAPILLARY ELECTROPHORESIS AND DIODE ARRAY DETECTION (CE-DAD)

Mauricio M. L. Pereira (PG)^{a*}, Hellen I. Santos (PG)^a, Gerson F. Duarte Junior (PQ)^a, Wendell K. T. Coltro (PQ)^{a,b}

^aUniversidade Federal de Goiás, Instituto de Química, Goiânia, Goiás, Brazil, 74690-900

^bInstituto Nacional de Ciência e Tecnologia de Bioanálítica, Campinas, SP, Brazil, 13084971

*e-mail: mauricio.matheus@discente.ufg.br

Palavras-Chave: Lactose Intolerance; Enzymatic Hydrolysis and Capillary Electrophoresis (CE).

Lactose intolerance affects between 57% and 65% of the global population, driving the demand for lactose-free dairy products. The enzyme lactase, also known as lactase-phlorizin hydrolase (LPH) or β -galactosidase, hydrolyzes lactose into glucose (GLU) and galactose (GLA)¹. People with this intolerance do not produce enough lactase, resulting in symptoms such as abdominal pain, diarrhea, and flatulence. This condition has generated significant interest in laboratories and the food industry, highlighting the importance of monitoring enzymatic lactose hydrolysis in the production of milk and dairy products, impacting consumer health^{1,2}. In this context, the study describes the development of an analytical methodology using a conventional capillary electrophoresis system (CE), model Agilent 7100, equipped with a diode array detector (DAD). The objective is to monitor the lactose hydrolysis time by the enzyme LPH into GLU and GLA and to evaluate lactose-free dairy products. A fused silica capillary with an internal diameter of 25 μm , a total length of 85 cm, and an effective length of 77 cm was used. The injection was hydrodynamic, performed at 100 mbar for 5 seconds. The background electrolyte, with a pH of 12.5, consisted of 35 mmol L⁻¹ of sodium hydroxide (NaOH) and 15 mmol L⁻¹ of sorbic acid, with varying concentrations of sodium phosphate (Na₂HPO₄) to adjust ionic strength. A concentration of 15 mmol L⁻¹ showed the best results (Figure 1-A). Voltage optimizations ranged from -20 to -30 kV, with increments of -5 kV (Figure 1-B), and a potential of -25 kV was selected for subsequent tests. The cartridge temperature was maintained at 25°C. Detection was indirect, using the chromophore sorbate, which absorbs in the UV region at 254 nm. Once developed and validated, the methodology will be applied to evaluate lactose hydrolysis time and analyze different dairy products aiming to contribute significantly to the quality control of these products and consumer health.

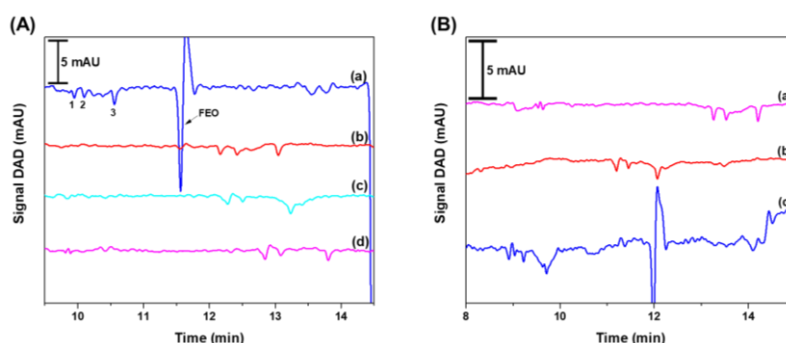


Figure 1 - Electropherograms for the separation of (1) GLU; (2) GAL; and (3) LAC varying (A) the concentration of Na₂HPO₄ added to the buffer: (a) 0, (b) 15, (c) 25, and (d) 30 mmol L⁻¹. (B) the voltage applied to separation: (a) -20, (b) -25, and (c) -30 kV. Buffer: 35 mmol L⁻¹ NaOH, 15 mmol L⁻¹ sorbic acid, and 0.8 mmol L⁻¹ CTAB. Hydrodynamic injection: 100 mbar for 5 s. Temperature: 25 °C. Fused silica capillary with 25 μm internal diameter, 85 cm total length, and 77 cm effective length. Detection at $\lambda=254$ nm.

1Catanzaro R, Sciuto M, Marotta, F. *Nutrition Research*, v. 89, 2021, p.23.

2De Oliveira Neves LN, De Oliveira MAL. *LWT*, v. 138, 2021, p.110585.



Curry com Cianeto: um documentário para Alfabetização Científica e o Ensino de Toxicologia

Filipe de Souza Cardoso^{a*}, Carlos César da Silva^b

^a Instituto Federal de Goiás, PPGECM, Jataí, Goiás, Brasil, 75804-020

^b Instituto Federal de Goiás, PPGECM, Jataí, Goiás, Brasil, 75804-020

*e-mail: filipe200291@gmail.com

Palavras-Chave: *Ensino de Química, Produções Cinematográficas, Pedagogia Histórico-Crítica*

A presente pesquisa tem caráter qualitativo, do tipo intervenção pedagógica e se fundamenta nos princípios da Pedagogia Histórico-Crítica desenvolvida pelo educador Demerval Saviani¹, que visa a transformação do saber sistematizado à realidade da prática social. Aplicando tais fundamentos ao Ensino de Ciências, temos como objetivo o aprendizado de Ciências da Natureza na Educação Básica a Alfabetização Científica², quando há intenção de formar o indivíduo para resolver problemas do seu dia a dia, levando em conta saberes e metodologias do campo científico, e em decorrência disso, tomar decisões em situações que estão ao seu redor e que irão influenciar sua vida e seu futuro. A crescente presença de substâncias químicas em produtos de uso cotidiano, como alimentos, cosméticos e produtos de limpeza, levanta uma questão crucial: como a falta de conhecimento sobre os potenciais riscos associados à exposição a essas substâncias podem resultar em consequências graves para a saúde e o bem-estar das pessoas? A ausência de informações claras e acessíveis sobre a natureza e os efeitos dessas químicas contribui para uma compreensão insuficiente de seus riscos. Essa lacuna de conhecimento não apenas compromete a capacidade dos indivíduos de tomar decisões informadas, mas também perpetua práticas que podem ser prejudiciais a longo prazo. Buscando uma estratégia eficaz para conscientização dos alunos sobre a toxicidade de substâncias químicas e promoção da alfabetização científica, foi realizada a aplicação de uma sequência didática³ com alunos do primeiro ano do Ensino Médio de uma escola da rede estadual de educação no município de Senador Canedo. A sequência didática foi aplicada em 6 aulas de química de 50 minutos, dividida em 5 etapas: A) Aula expositiva para compreensão de princípios da toxicologia e sistemas de classificação de risco de substâncias químicas; B) A exibição do documentário *Curry com Cianeto*⁴; C) Debate sobre o filme e apresentação de seminário em grupos com os temas 1. Descoberta do cianeto; 2. A presença do cianeto nos alimentos; 3. Utilização industrial; 4. Efeitos no corpo humano; D) Aula prática com reconhecimento de substâncias do cotidiano e do laboratório de ciências da unidade escolar, identificando sua toxicidade; E) Aula prática para observação de reações com formação de produtos voláteis. Para análise da intervenção foi utilizado um questionário inicial fechado com 8 perguntas sobre os hábitos e experiências dos alunos na análise de toxicidade de substâncias químicas de seu cotidiano e o hábito de assistir filmes com tema científico. Ao final da sequência didática um novo questionário foi aplicado para investigar se a pesquisa cumpriu com o objetivo de promover o pensamento crítico relacionado a toxicidade química e a importância social e política do conhecimento químico. Foram realizados registros fotográficos e anotações em diário de bordo em todas as etapas. Os resultados e análises de dados da pesquisa encontra-se em andamento.

1 Saviani, D. Escola e Democracia. 44 ed. Campinas, SP: Autores Associados, 2021.

2 Sasseron, L. H.; Carvalho, A. M. P. Alfabetização Científica na Prática: inovando a forma de ensinar física. São Paulo: Editora Livraria da Física, 2017.

3 Zabala, A. A Prática educativa: como ensinar. Porto Alegre: Artmed, 1998.

4 Curry com Cianeto. Dir.: Christo Tomy. Gên.: Documentário. Clas.: 12 anos. Dur.: 95 min. Netflix, 2023.

Agradecimentos à FAPEG pelo auxílio financeiro com a bolsa de mestrado como incentivo ao desenvolvimento da presente pesquisa.

MÉTODO ECOLÓGICO POR *ECO-SCALE ASSESSMENT* PARA QUANTIFICAÇÃO DE TINIDAZOL EM COMPRIMIDOS

Natália Sabina dos Santos Galvão^{a*} (Mestranda), Ana Carolina Kogawa^b
(Orientadora)

^a Universidade Federal de Goiás - UFG, Laboratório de Controle de Qualidade/Faculdade de Farmácia, Goiânia, Goiás, Brasil, 74605-170.

^b Universidade Federal de Goiás - UFG, Laboratório de Controle de Qualidade/Faculdade de Farmácia, Goiânia, Goiás, Brasil, 74605-170.

*e-mail: nsabina@discente.ufg.br

RESUMO

O tinidazol (TIN), um antimicrobiano, é comumente prescrito para o tratamento de giardíase, tricomoníase e infecções por amebas. Apresenta uma monografia em compêndios oficiais por titulação e a literatura apresenta diferentes métodos analíticos para avaliação de TIN, que utilizam principalmente metanol e acetonitrila, opções opostas aos princípios da Química Analítica Verde (QAV) e à tendência atual em análises químico-farmacêuticas. Entre os princípios da QAV, estão incluídos a geração de menos resíduos, a escolha de reagentes e solventes menos tóxicos, o uso de menos materiais, a avaliação de custos envolvidos, etapas e processos mais rápidos. Neste contexto, o objetivo foi desenvolver e validar um método ecologicamente correto por espectrofotometria na região do ultravioleta (UV) para avaliação quantitativa de TIN em comprimidos. Adicionalmente, o método proposto foi avaliado quanto à veredura pela *Eco-Scale Assessment* (ESA). Foram utilizados água purificada e etanol (90:10, v/v) como diluente, cubeta de quartzo a 318 nm. O método proposto foi linear na faixa de 7-22 µg/mL (0,9999), preciso com um desvio padrão relativo (DPR) intradia de 0,57%; interdia de 0,49% e interanalista de 2,42%; seletivo por meio de adjuvantes de amostra e pela degradação forçada, limite de detecção (LD) de 0,33 µg/mL e limite de quantificação (LQ) de 0,99 µg/mL, exato com uma recuperação média de 100,25 % e robusto contra mudanças no comprimento de onda de leitura. Além disso, revelou um teor de 99,81% (DPR de 4,31 %) para comprimidos de TIN. Quanto a veredura do método, ele provou ser uma alternativa verde para quantificar TIN em comprimidos de acordo com a ESA, com uma pontuação de 93, que corresponde a uma análise verde excelente. Portanto, o estudo em questão corrobora para a QAV, uma vez que, traz um método com princípios sustentáveis para a análise farmacêutica de TIN em comprimidos devidamente validado, cumprindo com parâmetros estabelecidos de linearidade, precisão, seletividade, limite de detecção, limite de quantificação, exatidão e robustez.

Palavras-Chave: tinidazol; comprimidos; UV; química analítica verde, *Eco-Scale Assessment*.

Agradecimentos



Enhancing Color Gradient Resolution in Colorimetric Enzymatic Assays Through Ionic Liquids in Paper-Based Microfluidic Devices

**Daniel S. de Paula^{1*} (IC), Larissa G. Velasco¹ (PG), Thiago M. G. Cardoso¹ (PQ),
Muhammad I. Qadir¹ (PQ), Wendell K. T. Coltro (PQ)¹**

¹ Universidade Federal de Goiás, Instituto de Química, Goiânia, Goiás, Brazil, 74001-970

*e-mail: danielsantosdepaula01@gmail.com

Palavras-Chave: Ionic Liquids, Glucose, Color Uniformity.

This study describes for the first time the incorporation of ionic liquids (IL) on microfluidic paper-based analytical devices (μ PADs) as a novel and green strategy to enhance the color homogeneity inside detection zones for glucose colorimetric detection. Different IL were tested and the best results were obtained using 1-n-butyl-3-methylimidazolium trifluoromethylsulfonfylimide (BF), which promoted an improvement in the paper wettability² and, thus being selected to investigate the effects of the electrostatic interactions with the chromogen agent on the colorimetric performance. For the procedure, initially, a 0.2- μ L aliquot of BF was added into the detection zone. After 1h, 0.3- μ L aliquots of a mixture of glucose oxidase and horseradish peroxidase, potassium iodide (KI) and trehalose dihydrate were successively added into detection zone with 5 min intervals between application steps for drying. The sample volume was 30 μ L. After traveling through microchannels towards detection zones, it reacted with enzymes and indicator, promoting a color change from colorless to brownish yellow. This procedure was performed in the absence (Fig. 1A) and presence (Fig. 1B) of IL. The intensity and uniformity of color response were evaluated in the Corel Photo Paint® software. As displayed in Figure 1C, the color gradient was noticeably reduced when IL was incorporated on μ PADs. The gradient represents the color distribution inside the microzone. For all tested glucose concentrations (0.5 - 4 mmol L⁻¹), the incorporation of IL decreased the color gradient from 59 \pm 5 to 20 \pm 3%. This hypothesis was somehow expected once the use of IL creates a bio-ionic container with a stronger electrostatic interaction with chromogenic agent, which justifies the better color uniformity inside the entire zone due to anchoring of KI during the microfluidic transport. The use of IL has also ensured a slightly better response in terms of color intensity recorded for the entire zone when compared with μ PADs without IL. The proposed approach will be tested for measuring glucose in biological fluids.

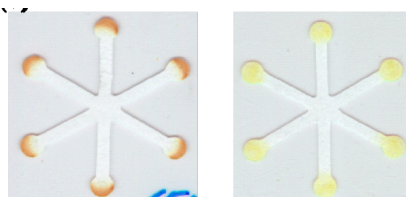


Figure 1 - Optical images showing the resulting device after glucose assay (A) without and (B) with incorporated IL

1de Freitas, S.V. et al., Analytical Chemistry, 90, 2018, 11949.

2 Hofmann, C. et al., Angew. Chem. Int. Ed., 58 (37), 2019, 12719-13160

Agradecimentos

CNPq, FAPEG, CAPES, INCTBio e UFG

EFICIÊNCIA DA ELETRÓLISE COMO MÉTODO ALTERNATIVO PARA A DEGRADAÇÃO DE FÁRMACOS

Luiz Felipe C. Lino 1^{a*} (IC), Ludmila L. M. Silva 2^a (IC), Guilhermina F. Teixeira 3^b (PQ), Flavio Colmati 4^c (PQ)

^a Universidade Federal de Goiás, Faculdade de Farmácia, Goiânia, GO, Brasil, 74605-170

^b Universidade Federal de Goiás, Instituto de Química, Goiânia, GO, Brasil, 74690-900

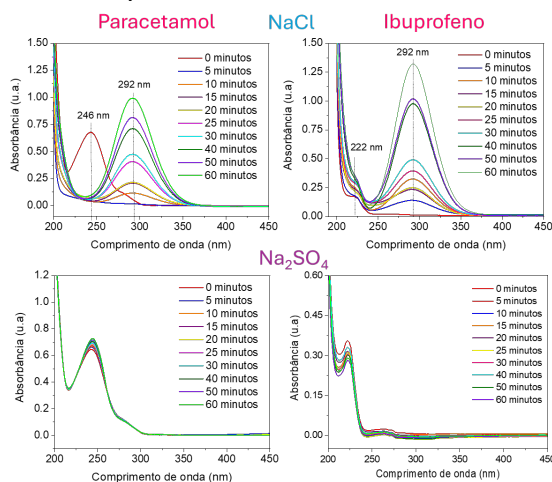
^c Centro de Excelência em Hidrogênio e Tecnologias Sustentáveis, Goiânia, GO, Brasil, 74690-031

*e-mail:luiz_cabral@discente.ufg.br

Palavras-Chave: descontaminação ambiental, degradação, paracetamol, ibuprofeno.

Pesquisas que visam desenvolver métodos alternativos para a recuperação de águas contaminadas por fármacos vêm ganhando destaque científico. Entre essas substâncias podemos citar o paracetamol e o ibuprofeno¹, pois eles não são totalmente eliminados das águas apenas com os métodos convencionais de tratamento. Neste trabalho, exploramos a eletrólise como método alternativo para a recuperação de águas contaminadas, utilizando um eletrodo constituído de $Ti/Ru_{0.3}Ti_{0.7}O_2$ e partimos de soluções contendo $10\text{ mg}\cdot\text{L}^{-1}$ de paracetamol e ibuprofeno, em meio de diferentes eletrólitos (NaCl e Na_2SO_4), com força iônica igual a $0,05\text{ mol}\cdot\text{L}^{-1}$, aplicando densidade de corrente $j\sim 7,5\text{ mA}\cdot\text{cm}^{-2}$. Analisando os espectros de absorção na região do UV-visível, em $\approx 245\text{ nm}^2$ para o paracetamol e $\approx 222\text{ nm}^3$ para o ibuprofeno² (Figura 1), notamos que em meio de NaCl , aproximadamente 95 % do paracetamol foi degradado após 5 minutos de teste, enquanto nas mesmas condições, o ibuprofeno começa a se degradar a partir de 40 minutos. Além disso, as bandas de absorção em $\approx 292\text{ nm}$ indicam a formação de NaOCl^4 . Já, em meio de Na_2SO_4 , não observamos a degradação do paracetamol, porém a eficiência de degradação para o ibuprofeno é de 31%.

Figura 1- Espectros de absorção na região do UV-visível dos produtos obtidos após a eletrólise do paracetamol e ibuprofeno em meio de diferentes eletrólitos.



Fonte: Próprio autor, 2024.

1Zurl J, Pinski A, Marchlewicz A, et al. Environmental Science and Pollution Research, 25, 2018, 21498

2Jallouli N, Elghniji K, Trabelsi H, Ksibi M. Photocatalytic degradation of paracetamol on TiO_2 nanoparticles and TiO_2 /cellulosic fiber under UV and sunlight irradiation. Arabian Journal of Chemistry, v. 10, p. S3640–S3645, 2017.

3Du L, Liu X, Huang W, Wang E. A study on the interaction between ibuprofen and bilayer lipid membrane. Electrochimica Acta, 51, 2006, 5754-5760

4EVANS K. Quantification of Sodium Hypochlorite in Disinfectants. PerkinElmer, 2020.

Agradecimentos: FAPEG n° 201201270750433, CNPq (Projeto n° 405793/2022-7 e Processo n° 384589/2023-5)



SÍNTESE DE MOF INÉDITO POR MÉTODO SOLVOTERMAL

Jackson Junior Santos de Souza [✉] (IC) , Danielle Cangussu de Castro Gomes ^a (PQ) e Renato Rabelo de Souza Filho ^a (PG)

^a UNIVERSIDADE FEDERAL DE GOIAS , Instituto de química , Goiânia, Goiás, Brasil , 74.690-900
*jackson.souza@discente.ufg.br

Palavras-Chave: *Redes Metal-orgânicas Porosas, Síntese Solvotermal, Materiais Moleculares Multifuncionais*

A Ciência, em especial a química, surge a partir de observações dos fenômenos da natureza. As zeólitas, que são formadas naturalmente, afluem um grande interesse por parte dos químicos, especialmente por suas propriedades derivadas da porosidade¹. Na busca de criar estruturas que sejam controladas, moduláveis e de alta porosidade, as Redes Metal-orgânicas Porosas (MOFs) surgem como Materiais Moleculares Multifuncionais (MMMs) que chamam a atenção dos pesquisadores por possibilitar diversos usos e aplicações². Sendo assim, neste trabalho buscou-se sintetizar MOFs que apresentassem propriedades luminescentes, eletroluminescentes, spin crossover e relaxação lenta de magnetização, as quais oferecem possibilidades diversas para o desenvolvimento da Nanociência e Nanotecnologia.

Para a síntese dos MOFs selecionados, foi utilizado o método de síntese solvotermal. A ideia central se baseia em construir MOFs do tipo Yaghi com blocos construtores (ligantes) com sítios de coordenação livre, nos quais poderão ser ancorados outros metais para conferir propriedades específicas ao MMM.³ A síntese do MOF escolhido foi feita a partir do ligante Ácido 2,2'-bipiridina-5,5'-dicarboxílico e do íon metálico zinco(II) em dimetilformamida (DMF), na presença de um agente modulador, o Ácido Trifluoroacético (TFA). O controle das condições de aquecimento e resfriamento, bem como da quantidade de agente modulador resultou em monocristais transparentes octaédricos. O produto foi caracterizado por espectroscopia de absorção na região do Infravermelho (FTIR), análise termogravimétrica (TG) e análise elementar de C, N e H. Análise elementar (%Calculado/experimental): C 42,8/33,97, H 2,39/3,28, N 8,31/8,51 FT-IR: $\nu(\text{OH})$ 3200 cm^{-1} , $\nu(\text{C}=\text{O})$ 1625 cm^{-1} , $\nu(\text{C}-\text{O})$ 1377 cm^{-1} . Os resultados quando comparados com o MOF modelo indicam que o MOF sintetizado possui a estrutura esperada com diferentes quantidades de moléculas de solvente contidas nos poros.

1. Design of Organic Solids. vol. 198 (Springer Berlin Heidelberg, Berlin, Heidelberg, 1998).
2. Gangu, K. K., Maddila, S. & Jonnalagadda, S. B. The pioneering role of metal-organic framework-5 in ever-growing contemporary applications – a review. RSC Adv 12, 14282–14298 (2022).
3. Rowsell, J. L. C. & Yaghi, O. M. Effects of Functionalization, Catenation, and Variation of the Metal Oxide and Organic Linking Units on the Low-Pressure Hydrogen Adsorption Properties of Metal-Organic Frameworks. J. Am. Chem. Soc. 128, 1304–1315 (2006).

Agradecimentos: FAPEG, CNPq e IQ-UFG

Simultaneous detection of cocaine and its metabolites in urine samples by direct analysis using Cellulose Fiber and Paper Spray Ionization Mass Spectrometry

Nathália S. Conceição^{a,b,*} (PG), Nayara A. dos Santos^{a,b} (PQ), Emmily T. Alves^a (IC), Sara J. I. Dionísio^a (IC), Bruna C. Pires^b (PQ), Wanderson Romão^{a,b,c} (PQ)

^a Federal University of Espírito Santo, Department of Chemistry, Vitória, Espírito Santo, Brazil, 29.075-910

^b National Institute of Forensic Science and Technology, INCT, Porto Alegre, Rio Grande do Sul, Brazil, 90.619-900

^c Federal Institute of Espírito Santo, Department of Chemistry, Vila-Velha, Espírito Santo, Brazil, 29.106-010

*e-mail: nathalia.vieira1995@gmail.com.br

Palavras-Chave: Ambient Mass Spectrometry; PSI-MS; CFSI-MS; Forensic Toxicology.

The detection of drugs of abuse and their metabolites in biological samples from users is a major concern in the field of forensic toxicology and public safety.¹ In this regard, ambient ionization methods have been developed and have demonstrated efficiency in direct analysis by mass spectrometry due to chemical modifications to the substrate and the introduction of novel materials that function as probes/substrates to collect, store, and ionize compounds. This allows for greater operational efficiency and selectivity in analyses.² This work presents a fast and sensitive technique for analyzing and detecting drugs and their metabolites in urine samples obtained from suspected users, analyzed using cellulose fiber spray ionization mass spectrometry (CFSI-MS) and paper spray ionization mass spectrometry (PSI-MS). The substrate used for CFSI-MS analysis was prepared from cellulose filters (King Filter[®]) molded into conical and triangular shapes using polypropylene tips. Each substrate, weighing 13 mg, was activated with 200 μ L of methanol (Vetec[®] Química Fina Ltda, Brazil), followed by the addition of 300 μ L of individual urine samples (labeled U1-U13). For PSI-MS analysis, the substrate was prepared from qualitative filter papers, specifically Whatman[®] Grade 1 (GE Healthcare, USA), with a pore size of 11 μ m and a thickness of 180 μ m. These papers were cut into triangular shapes, each measuring 12 mm in height and 7 mm in width, and 10 μ L of sample was subsequently added. The CFSI-MS analyses were performed with the parameters obtained from the central composite design, whose substrate mass (~13 mg), voltage (5 kV), and distance between the substrate and MS inlet (3.367 mm) were standardized. These same parameters were applied in the PSI-MS method. From the mass spectra obtained during the analysis of 13 urine samples by CFSI(+)-MS and PSI(+)-MS, six different compounds were detected, corresponding to seven distinct signals: benzoylecgonine (BZE), $C_{16}H_{19}NO_4$, m/z 312 ($[M+Na]^+$); ecgonine (ECG), $C_9H_{15}NO_3$, m/z 224 ($[M+K]^+$); ecgonine methyl ester (EME), $C_{10}H_{17}NO_3$, m/z 222 ($[M+Na]^+$) and m/z 238 ($[M+K]^+$); oxycodone (OXI), $C_{18}H_{21}NO_4$, m/z 354 ($[M+K]^+$); hydroxycocaine (OH-COC), $C_{17}H_{21}NO_5$, m/z 358 ($[M+K]^+$); and 11-Nor-9-carboxy- Δ^9 -tetrahydrocannabinol, $C_{21}H_{28}O_4$, m/z 345 ($[M+H]^+$). The prevalence of signals with sodium or potassium adducts may be attributed to the high concentration of sodium and potassium ions (Na^+ , K^+) in urine. The results obtained by the proposed methods were sequentially compared with the chromatograms from the analysis of the same urine samples using GC-MS. Although not all metabolites were identified in every sample, correlations between the techniques were established based on the analytes and parent drugs, enabling the determination of whether the sample was from a suspected cocaine/crack user or a marijuana/hashish user. This study confirms the applicability of ambient mass spectrometry with the new substrate (CFSI) for toxicological analysis in urine, while also highlighting advantages such as reduced cost and analysis without sample pretreatment, thereby preserving the critical chemical characteristics necessary for toxicological analysis in both PSI-MS and CFSI-MS.

¹UNODC. World Drug Report, 2022.

²Allochio Filho, J. F. *et al.*, *Química Nova*, 2023. [DOI: <https://doi.org/10.21577/0100-4042.20230074>]

Acknowledgments to CAPES, FAPES, INCT and NCQP – Ufes.

SELENILAÇÃO DE LIGAÇÕES C(SP₂) –H SEM UTILIZAÇÃO DE CATALISADORES DE METAL DE (N-HETERO) -ARENOS USANDO DISSELENETOS E ÁCIDO TRICLOROISOCIANÚRICO À TEMPERATURA AMBIENTE

Isis Juliane A. Granja^a (Me), Sumbal Saba^a (Dra), Jamal Rafique^b (Dr), Muhammad Adil Ali^c (Ms)

^a UFG, Departamento Química/instituto de Química, Goiânia, GO, Brasil, CEP 74690900

^b UFMS, Departamento Química/instituto de Química, Campo Grande, MS, Brasil, CEP 79074460

^c USP, Departamento Química/instituto de Química, São Paulo, SP, Brasil, CEP 05508060

*e-mail: isisgranja@discente.ufg.br

Palavras-Chave: Métodos da química sintética, Química verde, Selenilação, Tricloroisocianúrico.

Relatamos uma abordagem ecologicamente correta para a selenilação da ligação C (sp₂) –H de imidazopiridinas e outros N-heteroarenos, bem como arenos simples à temperatura ambiente. A construção da ligação C–Se está ganhando cada vez mais interesse na síntese orgânica, pois esses compostos apresentam características biológicas fascinantes¹. Nesse sentido, os diorganil-selenetos são bem conhecidos por suas diversas propriedades biológicas, principalmente por suas atividades antioxidante, antiinflamatória, anti-Alzheimer e anticancerígena². Em vista as reações de acoplamento cruzado, a formação de organoslenetos contendo N-heteroareno através da funcionalização da ligação C (sp₂) –H fornece uma rota direta de formação de ligação em uma etapa³. Esta abordagem permanece pouco explorada, embora a funcionalização direta do C–H seja uma alternativa econômica e mais verde. Para este tipo de selenilação direta da ligação C (sp₂)–H de (N-hetero) arenos com disselenetos de diorganila, existem duas vias possíveis: (a) espécies nucleofílicas de arenos, geradas in situ⁴ e (b) espécies eletrofílicas de disselenetos, gerados in-situ⁵. Em termos de praticidade, a primeira via é limitada devido ao escopo estreito do substrato, enquanto o desenvolvimento de um novo método envolvendo a ativação de disselenetos através da via posterior é altamente desejável. Este novo protocolo consiste na reação entre (N-hetero)-arenos e o sistema reagente de diorganil-diselenetos e ácido tricloroisocianúrico (TCCA)-etanol. Em um curto tempo de reação, os produtos selenilados desejados foram obtidos regioselectivamente com bons rendimentos, com tolerância a uma ampla gama de grupos funcionais.

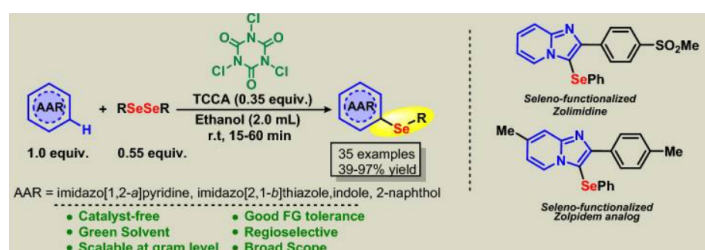


Figura 1 - Selenilação da ligação C (sp₂) –H mediada por TCCA de (N-hetero) -arenos usando disselenetos.
Fonte: Autores, 2023

- Chen Z, Lai H, Hou L, Chen T. Rational design and action mechanisms of chemically innovative organoselenium in cancer therapy. *Chem. Commun.* 2020;**56**:179.
- Sonawane AD, Sonawane RA, Ninomiya M, Koketsu M. Diorganyl diselenides: A powerful tool for the construction of selenium containing scaffolds. *Dalton Trans.* 2021;**50**:12764.
- Rafique J, Rampon DS, Azeredo JB, Coelho FL, Scheneider PH, Braga AL. Light-mediated seleno-functionalization of organic molecules: Recent advances. *Chem. Rec.* 2021;**21**:2739.
- Penteadó F, Peglow TJ, Silva MS, Perin G, Lenardao EJ. Greening the synthesis of selenium-containing heterocycles: Recent efforts and advances. *Curr. Opin. Green Sustain. Chem.* 2020;**26**:100372.
- Santo DC, Rafique J, Saba S, Grinevicius VMAS, Filho DW, Zamoner A, et al. IP-Se-06, a selenylated imidazo[1,2-a]pyridine, modulates intracellular redox state and causes Akt/mTOR/HIF-1 α and MAPK signaling inhibition, promoting antiproliferative effect and apoptosis in glioblastoma cells. *Oxid. Med. Cell.*

PRODUÇÃO DE QUEROSENE DE AVIAÇÃO A PARTIR DO CRAQUEAMENTO DE MISTURAS DE RESÍDUOS PLÁSTICOS DE POLIETILENO, POLIPROPILENO E POLIESTIRENO

Lucas Ferrão Marinho Ferrão^{a*}(IC), Maríthiza Gonçalves Vieira^a(PG), Ana Luiza Reis Rodrigues da Cunha^a(PG), Dayane Cristina da Costa^a(PG), Nelson Roberto Antoniosi Filho^a(PQ)

^a LAMES – Laboratório de Métodos de Extração e Separação, Instituto de Química UFG, Goiânia, GO, Brasil, 74690-900

*lucasferrao@discente.ufg.br

Palavras-Chave: Craqueamento; Plásticos; Jet Fuel; Planejamento experimental

A aviação é um dos setores de transporte que mais cresce no mundo, e com o aumento do número de voos, cresce também a demanda por combustível de aviação, conhecido como "jet fuel". O *jet fuel* é obtido principalmente de fontes fósseis e consiste em uma complexa mistura de hidrocarbonetos lineares, ramificados, cíclicos e aromáticos com uma cadeia variando entre 8 e 16 carbonos^{1,2}. A aviação é uma das principais indústrias responsáveis pela emissão de carbono e outros gases que contribuem para o efeito estufa. Em resposta a essa realidade, organizações e empresas têm intensificado esforços para promover estudos e iniciativas voltadas à redução do uso de combustíveis fósseis, buscando alternativas mais sustentáveis para o setor. Uma dessas formas são aqueles gerados a partir de matérias primas não convencionais como matéria orgânica ou a partir de plásticos^{1,2}. Técnicas como o craqueamento catalítico são utilizados para a produção desses combustíveis alternativos. Ela consiste na quebra de cadeias poliméricas em outras menores por meio do calor geralmente com o auxílio de um catalisador¹. Dessa forma, o objetivo desse trabalho é, a partir de um planejamento de misturas promover o craqueamento de polietileno, polipropileno e poliestireno a fim de determinar qual a melhor mistura para a produção de *jet fuel* alternativo. O planejamento de misturas foi feito a partir de um modelo *simplex-lattice*, em que foram misturadas quantidades iguais em massa de dois plásticos diferentes e 10% de catalisador a partir do total de polímero da reação. O catalisador utilizado foi rejeito de mineração de ferro de Brumadinho-MG. As reações ocorreram sob temperatura de 300°C a uma agitação de 600 rpm e durante o tempo de 90 minutos. Os óleos obtidos foram analisados por meio de cromatografia gasosa acoplada a espectrometria de massa (GC-MS). Os resultados obtidos do craqueamento das misturas de plásticos indicam que cada mistura gera uma composição distinta de hidrocarbonetos de diferentes tipos e tamanhos de cadeia carbônica. Desse modo, foram gerados gráficos de contorno a partir dos resultados, em que foi possível destacar qual composição da mistura otimiza cada resposta para a formação do *jet fuel*, sendo elas o rendimento do óleo, o rendimento relativo para a obtenção de hidrocarbonetos aromáticos, cíclicos, lineares, ramificados e hidrocarbonetos com cadeia carbônica entre 8 e 16 carbonos. Dessa forma, as próximas etapas desse estudo envolvem a determinação de uma faixa de mistura ideal de plásticos que leve a uma composição ideal de hidrocarbonetos encontrados no *jet fuel* comercial. Por fim, espera-se que a metodologia empregada aqui através do uso de planejamentos de misturas permita a criação de um produto alternativo com composição similar ao *jet fuel*, utilizando poucas etapas de craqueamento.

Referências:

- 1 YANG, Jie; XIN, Zhong; HE, Quan (Sophia); CORSCADDEN, Kenneth; NIU, Haibo. An overview on performance characteristics of bio-jet fuels. *Fuel*, v. 237, p. 916-936, 2019.
- 2 VALIZADEH, Soheil; VALIZADEH, Behzad; SEO, Myung Won; CHOI, Yong Jun; LEE, Jechan; CHEN, Wei-Hsin; LIN, Kun-Yi Andrew; PARK, Young-Kwon. Recent advances in liquid fuel production from plastic waste via pyrolysis: Emphasis on polyolefins and polystyrene. *Environmental Research*, v. 228, 2024.



Avaliação do tamanho hidrodinâmico e da carga elétrica de nanoemulsão contendo ftalocianina de cloroalumínio

Borges, I.R.^{*1}; Rocha, V.L.²; Rocha, T.L.²; Chen-Chen, L.¹; Tedesco, A.C.³; Franchi, L.P.⁴

¹ *Laboratório de Radiobiologia e Mutagênese, Departamento de Genética do Instituto de Ciências Biológicas, Universidade Federal de Goiás, Goiânia-GO, Brasil, 74690-900.*

² *Laboratório de Biotecnologia Ambiental e Ecotoxicologia, Instituto de Patologia e Saúde Tropical, Universidade Federal de Goiás, Goiânia-GO, Brasil, 74605-050.*

³ *Departamento de Química, Laboratório de Fotobiologia e Fotomedicina, Centro de Nanotecnologia e Engenharia Tecidual, Faculdade de Filosofia, Ciências e Letras de Ribeirão Preto, Universidade de São Paulo, Ribeirão Preto-SP, Brasil, 14040-901.*

⁴ *Departamento de Bioquímica e Biologia Molecular do Instituto de Ciências Biológicas, Universidade Federal de Goiás, Goiânia-GO, Brasil, 74690-900.*

*e-mail:izadorarodrigues@discente.ufg.br

Palavras-Chave: *Fotossensibilizador; Ftalocianina; DLS; Potencial Zeta;*

A ftalocianina (Pc), representa cerca de 25% dos pigmentos orgânicos artificiais, alguns dos derivados como a ftalocianina de cloroalumínio (CIAIPc), apresentam propriedades físico-químicas que permitem funcionar como fotossensibilizador. Dessa maneira, a CIAIPc também tem sido pesquisada como um protótipo para uso em terapias biomédicas, como a terapia fotodinâmica, uma modalidade alternativa de tratamento anticâncer. No entanto, ainda são necessários mais estudos e testes com a CIAIPc a fim de caracterizar este composto e entender a estabilidade de formulações antes do seu uso. Uma técnica importante sobre a caracterização físico-química de um composto é o Espalhamento Dinâmico da Luz (DLS; do inglês, *Dynamic Light Scattering*). O DLS permite a caracterização de partículas em suspensão, fornecendo informações precisas sobre o tamanho médio e carga das partículas em suspensão. Assim, realizou-se uma análise por DLS (Zetasizer Advance; Malvern Panalytical®) da CIAIPc formulada em uma nanoemulsão (CIAIPc/Ne) do tipo óleo-em-água obtida por emulsificação espontânea¹. Dessa maneira, foram realizadas duas diluições (1:10 e 1:100) da solução de CIAIPc/Ne para as análises do tamanho hidrodinâmico e do potencial eletrocinético (zeta) dessas partículas, com as medidas realizadas em triplicatas. O índice de refração da usada nas leituras foi de 1,38 (as amostras foram diluídas em água ultrapura). Os resultados obtidos demonstram que a CIAIPc/Ne apresentou tamanho hidrodinâmico médio entre 210 nm (diluição 1:10) e 216 nm (diluição 1:100), indicando estabilidade das partículas em relação ao tamanho em solução aquosa. Em relação ao potencial Zeta, foram detectados os valores de -53,72 (1:10) e -40,22 mV (1:100). Assim, nota-se que o potencial foi negativo acima do valor modular de 30 mV, indicando estabilidade físico-química para as amostras. Esses resultados demonstram que a formulação é promissora para uso em Terapia Fotodinâmica.

1 F.L. Primo, M.B.D. Reis, M.A. Porcionatto, A.C. Tedesco. In vitro evaluation of chloroaluminum phthalocyanine nanoemulsion and low-level laser therapy on human skin dermal equivalents and bone marrow mesenchymal stem cells *Curr. Med. Chem.*, 18 (22) (2011), pp. 3376-338

Agradecimentos:

A Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de Goiás (FAPEG **202310267000673**) pelo apoio financeiro concedido.

SPIN CROSSOVER COBALT(II) AND IRON(II) MOLECULAR NANOMAGNETS WITH PH-SWITCHABLE PROPERTIES

Gabriel (IC)^{1*} Francielly F. Faria (PG),¹ Renato Rabelo (PQ),¹ Meiry Edvirges Alvarenga (PQ),¹ Felipe T. Martins (PQ),¹ Danielle Cangussu (PQ).¹

¹ Instituto de Química, UFG;

*e-mail: Gabriel.carneiro@discente.ufg.br

Palavras-Chave: Coordination Chemistry, Spin Crossover, Single-Molecule Magnet.

A Química de coordenação é uma ferramenta que possibilita a síntese de novas moléculas com propriedades de interesse para aplicações em Nanociência e Nanotecnologia. Nesse sentido, moléculas spin crossover (SCO) e single-molecule magnet (SMM) são as menores unidades que possuem potencial para serem empregadas em dispositivos eletrônicos e spintrônicos devido a suas propriedades finamente moduláveis através de fatores internos (estrutura eletrônica) ou externos (estímulos físicos ou químicos). Neste trabalho, apresentamos a síntese de dois complexos do tipo SCO/SMM de cobalto(II) e ferro(II), respectivamente **1** e **2**, com ligante do tipo Base de Schiff substituído com grupos ácido benzoico. A elucidação de suas estruturas cristalinas através da técnica de difração de raios X em monocristal (Figura 1) revelou que **1** e **2** são isoestruturais e que os grupos ácido carboxílico se encontram parcialmente desprotonados, denotando a sensibilidade destes complexos ao pH do meio. Portanto, **1** e **2** constituem exemplos de complexos multiestáveis em que suas propriedades magnéticas SCO e SMM podem ser moduláveis pelo grau de protonação do ligante, oferecendo possibilidades fascinantes como dispositivos magnéticos multifuncionais e de resposta múltipla para a spintrônica molecular.

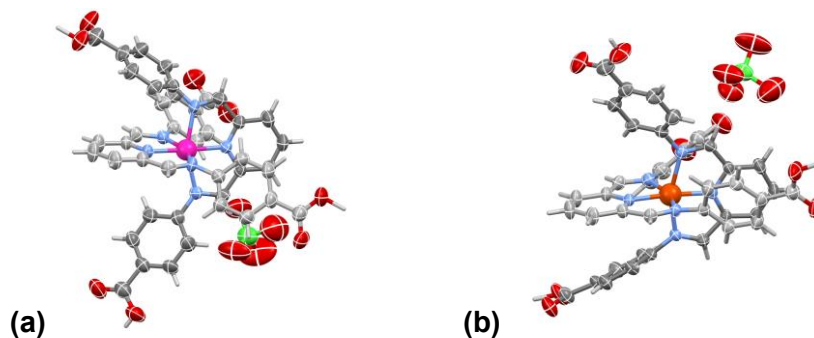


Figure 1. Vista perspectiva da estrutura molecular de **1** (a) e **2** (b) juntamente com seus respectivos contraíons perclorato. Os esqueletos dos ligantes foram representados em diferentes tons de cinza enquanto moléculas de dimetilformamida foram ocultadas para maior clareza. Átomos de não-hidrogênio e hidrogênio foram representados como elipsóides com 50% de probabilidade e bastões de tamanho arbitrário, respectivamente.

Agradecimentos: CNPq, CAPES, UFG.



Innovative Paper-Based Acidity Detection via Cobalt Complex and Smartphone Technology

Larissa Garcia Velasco (PG)^{a,*}, Nikaele Sousa Moreira (PG)^a, Wendell K. T. Coltro (PQ)^{a,b}

^aUniversidade Federal de Goiás, Instituto de Química, Goiânia, Goiás, Brazil, 74001-970

^bInstituto Nacional de Ciência e Tecnologia de Bioanalítica, Campinas, São Paulo, Brazil, 13083-970

*e-mail: larissa.garcia.velasco@discente.ufg.br

Acidity content assessment is widely used in various science fields, including food, pharmaceutical, and agriculture. However, conventional titration methods require specific glassware, sample preparation, and a particular reaction time for analysis. These requirements pose obstacles to implementation at the point-of-care (POC). Paper-based analytical devices (PADs) are a promising alternative for POC use due to their practicality, simplicity, and portability.¹ Additionally, when combined with colorimetric detection using a smartphone application, like Photometrix, PADs become even more convenient for field applications. The present work aims to determine acidity colorimetrically in PADs using a cobalt coordination system and a smartphone. The device was designed using Corel Draw software, creating 8 spot test zones with 4 mm diameters. After designing, the device was cut out of polyester film using a cutting plotter (silhouette cameo). Next, a rectangular strip of chromatographic paper (Watman) was placed between two polyester films and heated to 180 °C in a thermal press to create hydrophobic barriers. Following device fabrication, the necessary reagent volume was optimized to fill the circular zone of the device. The volumes evaluated were 0.4 to 1.4 µL (Fig. 1A), with the optimal volume being 1 µL. The acidity sensor was based on the color change of the tetraaquadihydroxycobalt(II) complex (Co(H₂O)₄(OH)₂) from greenish to Co(H₂O)₆²⁺ from pink, upon acid addition, indicating the neutralization of the cobalt complex.² To obtain the greenish complex Co(H₂O)₄(OH)₂, NH₄OH. The reagent proportions for optimal cobalt sensor response to acidity were investigated using a central composite design (CCD). Smartphone cameras captured the results via the Photometrix application. Based on the desirability contour plot (Fig. 1B), the ideal condition was achieved using 350 mmol L⁻¹ CoCl₂·6H₂O and 700 mmol L⁻¹ NH₄OH, which were kept for the following experiments. The analytical curve (Fig 1C) exhibited linear behavior from 0 mM to 100 mmol L⁻¹, with a coefficient of determination (R²) of 0.984. These preliminary results suggest that the proposed method holds promise for colorimetric acidity detection without requiring sophisticated equipment. For future perspectives, we plan to assess the repeatability across devices, compare the proposed method with the reference approach, and apply it to real samples.

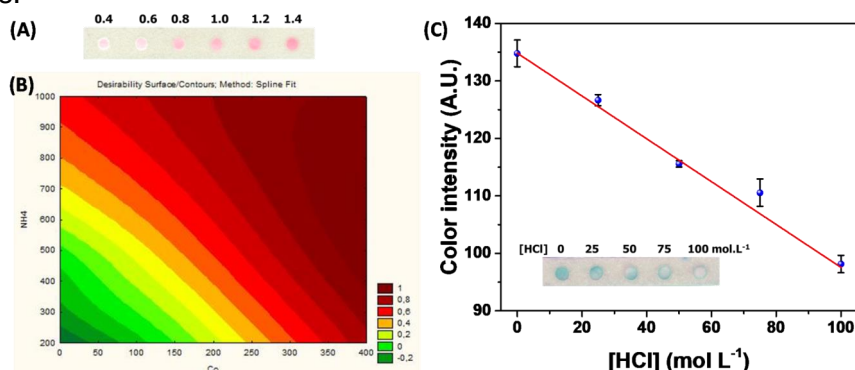


Figure 1. Volume optimization fills the device test zone; (B) the CCD obtains a desirability contour graph; and (C) an analytical curve is used for acidity detection.

¹Nishat S et al. Sensors & Actuators: B. Chemical 336 (2021) 129681.

²Cho HH et al. Analyst, 2016, 141, 3890.

Quantificação do teor de vitamina C em mangaba (*Hancornia speciosa* Gomes) oriunda de comunidades extrativistas de Goiás visando aplicações dermocosméticas

Cleysla Mendes da Silva^a (PG), Maria Eduarda Cândido Aguiar^a (IC), Beatriz Haruka Hamawaki Suzuki^a (IC), Gabriel Luis Castiglioni^b (PQ), Vanessa Gisele Pasqualotto Severino^a (PQ)

^aUniversidade Federal de Goiás, Instituto de Química, Goiânia, Goiás, Brasil, 74045-155

^bUniversidade Federal de Goiás, Escola de Agronomia, Goiânia, Goiás, Brasil, 74.690-900

*e-mail: cleysla.silva@discente.ufg.br

Palavras-Chave: *Hancornia speciosa*. Vitamina C. Comunidades extrativistas. Citotoxicidade.

Com o interesse crescente por produtos naturais e sustentáveis¹, há um potencial ainda inexplorado em diversas plantas do Cerrado, como a mangaba (*Hancornia speciosa* Gomes, Apocynaceae), uma espécie endêmica desse bioma brasileiro. Este fruto, além de possuir propriedades terapêuticas², destaca-se pelo aroma e sabor atrativos, sendo fonte de renda para comunidades extrativistas em Goiás. Entretanto, poucos produtos de valor agregado têm sido desenvolvidos a partir deste fruto, limitando-se principalmente a insumos da polpa minimamente processados³. Assim, neste estudo extratos etanólicos de partes da mangaba [cascas (HSEEC), polpa sobrenadante (HSEEPS), precipitado da polpa (HSEEP), sementes liofilizadas (HSEESL) e sementes tratadas termicamente (HSEESTT)] foram avaliados quanto à citotoxicidade, via MTT [brometo de 3-(4,5-dimetil-2-tiazolil)-2,5-difenil-2H-tetrazólio]⁵. Em seguida, frações hidrometanólicas desses extratos foram analisadas quanto ao teor de vitamina C, com vistas à aplicação dermocosmética. A quantificação desta vitamina foi realizada por CLAE [coluna Shim-pack VP-ODS (150 x 4,6mm); modo gradiente de eluição com tampão fosfato 25 mM (pH 5,7) e metanol; fluxo de 0,8 mL.min⁻¹ e detecção a 245 nm], empregando-se ácido ascórbico como padrão. Os resultados de citotoxicidade mostraram que HSEEPS, HSEEP, HSEESL e HSEESTT apresentaram viabilidade celular superior a 100% nas concentrações testadas (0,39 a 50 mg.mL⁻¹), sendo considerados seguros para uso tópico. Já o extrato HSEEC apresentou redução da viabilidade celular, atingindo 0% nas concentrações de 40 e 50 mg/mL, evidenciando toxicidade em concentrações mais elevadas. Além da ausência de citotoxicidade, a fração de HSEESTT se destacou por apresentar o maior teor de vitamina C (66,6 mg/100g), superior às frações de HSEEPS (29,8 mg/100g), HSEESL (16,87 mg/100g), HSEEC (11,5 mg/100g) e HSEEP (0,0 mg/100g). Portanto, sugere-se que o teor de vitamina C observado nas sementes tratadas termicamente possa trazer benefícios à saúde da pele, prevenindo o estresse oxidativo, e abrindo caminhos para estudos de estabilização de formulações cosméticas⁵.

¹Brandão GFG, et al., *Ciências da Saúde*, 27, Ed. 128, 2023; ²Almeida FLC, et al., *International Journal of Gastronomy and Food Science*, 29, 2022; ³Assumpção CF, et al., *Ciência Rural*, 44(7), 2014, 1297-1303; ⁵Sylvester PW, *Drug Design and Discovery: Methods and Protocols*, 2011, 157-168; ⁶ANVISA, *Parecer Técnico nº 3, de 29 de junho de 2001* (atualizado em 28/6/2004), Agência Nacional de Vigilância Sanitária. Disponível em: <https://www.gov.br/anvisa/pt-br>

Agradecimentos:







AValiação de Diferenças Metabólicas entre Humanos e Bovinos por Análise dos Compostos Orgânicos Voláteis Presentes no Cerúmen

Rhyan César S. Dias^{a*} (IC), Ana Luiza R. R. da Cunha^a (PG), João Marcos G. Barbosa^a (PG), Nelson Roberto Antoniosi Filho^a (PQ)

^aLaboratório de Métodos de Extração e Separação (LAMES), Instituto de Química (IQ), Universidade Federal de Goiás (UFG), Goiânia, Goiás, Brasil, 74690-900

*e-mail: rhyancesarjb2018@outlook.com

Palavras-Chave: *Metabolômica, Cerúmen, Cromatografia Gasosa, Espectrometria de Massas*

A metabolômica é uma ciência ômica que objetiva entender tanto o funcionamento quanto as alterações das vias metabólicas de um organismo que estão associadas a diversos eventos biológicos¹. Para isso, diferentes matrizes biológicas podem ser utilizadas em estudos metabolômicos, dentre elas a cera de ouvido ou cerúmen. O cerúmen é uma biomatriz não-convencional que pode ser coletada de forma minimamente invasiva, e que possui grande potencial na investigação de biomarcadores associados a várias patologias em humanos e em outros animais. O presente trabalho teve como objetivo demonstrar que a partir da análise de compostos orgânicos voláteis (*volatile organic compounds* - VOCs) presentes no cerúmen é possível avaliar as diferenças no perfil metabólico de dois organismos distintos (bovinos e humanos), assim como identificar as principais assinaturas voláteis que os distinguem. Para isso, foram coletadas amostras de cerúmen de 10 bovinos e 10 humanos e realizada a análise dos VOCs via *Headspace/Gas Chromatography-Mass Spectrometry* (HS/GC-MS) em uma abordagem de metabolômica global. Os cromatogramas gerados foram deconvoluídos no software MZmine (v2.53, mzmine.github.io/) e os dados processados utilizando a plataforma *MetaboAnalyst* (v6.0, metaboanalyst.ca/). A análise das rotas bioquímicas associadas aos compostos encontrados para cada organismo investigado apontou 5 rotas bioquímicas com maior impacto para humanos e para bovinos, sendo 4 em comum (biossíntese de ácidos graxos, biossíntese de esteroides, glicólise/gliconeogêneses e metabolismo de piruvato) e 2 distintas (metabolismo de nicotinato e nicotinamida para bovinos e metabolismo de glicerolipídeos para humanos). Em seguida, com a realização de um teste-t, foram selecionados 9 VOCs com maior diferença estatisticamente significativa ($p < 0,05$) entre humanos e bovinos. Os VOCs que apresentaram maiores intensidades nas amostras de humanos (2-metil-2-proprenal, butanal, 2-butanona, undecano, 1-etenil-aziridina, 1-dodecanol, e hexanamina) são majoritariamente associados às rotas de oxidação de ácidos graxos no estresse oxidativo mitocondrial, o que implica uma provável maior atividade dessas rotas em humanos quando comparadas com bovinos. Por outro lado, os compostos com maior intensidade nas amostras de bovinos (*p*-cresol e 4-etil-fenol) são provenientes do metabolismo mamífero-microbiano, representando um perfil bioquímico característico em animais ruminantes. Assim, conclui-se que, a partir do perfil volátil acessado através da cera de ouvido de diferentes organismos, é possível acessar assinaturas bioquímicas que mostram vias metabólicas específicas que podem ser exploradas para investigações clínicas e na compreensão dos processos evolutivos pelos quais humanos e bovinos passaram.

¹Gisele A. B. Canuto et al. Metabolômica: definições, estado-da-arte e aplicações representativas, *Quim. Nova*, Vol. 41, No. 1, 75-91, 2018. <https://doi.org/10.21577/0100-4042.20170134>

Agradecimentos: UFG, FUNAPE, ANP, LAMES.