



VI Congresso de Ensino, Pesquisa e Extensão da UEG

Ciência e Inovação como perspectivas para o  
Desenvolvimento Social e Sustentável

de 16 a 18/10/2019  
Anápolis



## A eficiência do processo de adsorção passa pelo estudo do ponto de Carga Zero e do pH no sistema

FERNANDO CARLOS GONÇALVES MURGA <sup>1\*</sup> (PG), ROBERTA SIGNINI <sup>2</sup> (PQ), JOSÉ DANIEL RIBEIRO DE CAMPOS <sup>2</sup> (PQ)

\*murgameteoro45@gmail.com

**UNIVERSIDADE ESTADUAL DE GOIÁS, CAMPUS ANÁPOLIS DE CIÊNCIAS EXATAS E TECNOLÓGICAS HENRIQUE SANTILLO** – Endereço: Br 153, nº 3105 - Campus Henrique Santillo-Anápolis, CEP: 75132-400, Cidade: Anápolis-GO, telefone: (62) 3328-1139.

### RESUMO

A efetividade do processo de adsorção está relacionada ao conjunto adsorvente, adsorvato e meio. Este processo pode empregar uma larga escala de adsorventes, utilizando-os isolados, agrupados ou associados. Neste trabalho, o aluminossilicato, resíduo cerâmico de isoladores elétricos de Furnas/Eletrobrás/Celg, foi utilizado como adsorvente. Suas propriedades texturais foram estudadas, buscando-se parâmetros que proporcionem a melhor relação adsorvente/adsorvato e meio no processo de adsorção. A análise do ponto de carga zero da superfície, e o comportamento do sistema em diferentes valores de pH foram estudos fundamentais realizados. Pois, estão diretamente ligados à capacidade de adsorção do material. A adsorção foi utilizada para minimizar a presença de cargas orgânicas tóxicas em solução, proporcionando uma destinação nobre aos resíduos cerâmicos dos isoladores elétricos.

**Palavras-chave:** aluminossilicato, propriedades texturais, minimizar, cargas orgânicas, destinação nobre.

## INTRODUÇÃO

As indústrias são as maiores responsáveis pelo consumo de insumos durante as etapas de produção. Uma gestão ambiental adequada permeia pelo controle, monitoramento e tratamento dos resíduos e efluentes no processo industrial. Alterações ambientais e perdas significativas nas dinâmicas naturais das comunidades biológicas são consequências do descarte, sem o devido tratamento, em corpos hídricos. Resíduos e efluentes com pequenas quantidades de carga orgânica tóxica são desfavoráveis ao meio ambiente; e proporcionam impactos negativos que influenciam os parâmetros físico-químicos, como: o pH, a turbidez, a demanda química e biológica de oxigênio (DQO e DBO), a temperatura, e a quantidade total de sólidos em suspensão (GOULART et al., 2002; SRINIVASAN; VIRARAGHAVAN, 2010; VARQUES et al., 2011).

. O emprego de técnicas como a oxidação avançada, a degradação catalítica e a filtração por osmose reversa, utilizadas no tratamento de efluentes, apresentam

REALIZAÇÃO

PRG  
Pró-Reitoria de  
Graduação

PRP  
Pró-Reitoria de  
Pesquisa e  
Pós-Graduação

PRE  
Pró-Reitoria de  
Extensão, Cultura e  
Assuntos Estudantis



Universidade  
Estadual de Goiás

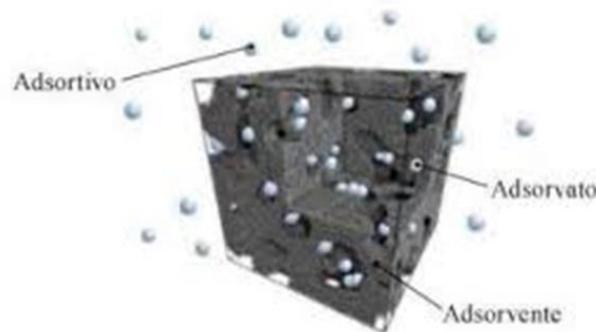


algumas desvantagens, como: o alto custo dos seus métodos e a pequena eficácia em soluções muito diluídas. A adsorção apresenta um método de operação simples, mostrando-se promissora na remoção e polimento de solutos; quando, estes estão em baixa concentração na solução (ALMEIDA et al., 2009; GUPTA e SUHAS, 2009).

A adsorção é definida como um fenômeno físico-químico reversível no qual o componente em uma fase gasosa, líquida ou diluído nestas é transferido para a superfície do material (sólido), favorecendo a remoção da espécie química desejada (KAUSAR et al, 2018). Os componentes que se unem à superfície são chamados adsorvatos, a fase sólida que retém o adsorvato é chamada adsorvente, e o meio em que esta adsorção acontece é o adsortivo. A remoção das substâncias retidas a partir desta superfície é chamada dessorção (NÓBREGA, 2001). A Figura 1 representa um modelo ilustrativo do fenômeno da adsorção, na qual o adsorvato está representado pelas esferas maiores de cor acinzentada que se aderem ao adsorvente, representado pela parte escura. A migração destes componentes de uma fase para a outra tem como força motriz a diferença de concentrações entre o seio do fluido e a superfície do adsorvente, acontecendo uma transferência de massa para o leito fixo do adsorvente por onde passa a fase fluída do sistema (NÓBREGA, 2001). A adsorção pode empregar uma larga escala de adsorventes, e até mesmo fazer o uso em conjunto destes (ABBASI; HABIBI, 2016; YANG et al., 2018) A concentração do adsorvato na superfície do adsorvente tem relação direta com a estrutura morfológica e o tamanho desta. Assim, quanto maior e mais rugosa a superfície do adsorvente, maior será a eficiência da adsorção. Os compostos permanecem adsorvidos na superfície do adsorvente pela ação de diversas forças eletroquímicas, citam-se as ligações de hidrogênio e Van der Waals presentes no sistema (BRUCH et al.; 1997). Neste trabalho, o resíduo utilizado na adsorção tem sua composição básica a cerâmica. Quimicamente é composta por silicatos hidratados de alumínio ( $x.SiO_2/ y.Al_2O_3, nH_2O$ ) e ferro, contendo certo teor de elementos alcalinos e alcalinos terrosos ( $K^+, Na^{1+}, Mg^{2+}, Ca^{2+}$ ) denominados aluminossilicatos (KAUSAR et al., 2018).



Figura 1 - Esquema representativo do fenômeno de adsorção.



Fonte: Nóbrega, 2001

## MATERIAIS E MÉTODOS

### **2.1 Preparo e Seleção do Material**

O resíduo de porcelana, proveniente de material cerâmico isolante de transformadores da Enel Distribuição Goiás, foi limpo de resíduos visíveis, através de lixamento manual da camada de proteção externa. Foi triturado em moinhos manuais até tamanho granulométrico adequado, e separado manualmente por peneiras; entre 80 e 150 mesh; sendo acondicionado em frascos de polietileno hermeticamente fechados, em diferentes granulometrias, em ambiente seco e limpo.

### **2.2 Ponto de Carga Zero - $pH_{PCZ}$**

Para este estudo foi preparado uma suspensão de 20 mg do aluminossilicato (adsorvente), granulometria da partícula de 100-115 mesh, em 20 mL de solução aquosa de NaCl 0,1 mol L<sup>-1</sup>. Variou-se o pH da solução de 1 a 11, utilizando soluções de HCl (0,01 mol L<sup>-1</sup>) e NaOH (0,01 mol L<sup>-1</sup>), sendo que o pH (pH inicial) foi medido com pHmetro digital Microprocessado PG1800, marca Gehaka. As amostras ficaram durante 24 horas em banho termostático, sob agitação de 100 rpm, a 25 °C, após este tempo as soluções foram filtradas e o pH foi novamente medido (pH final). Para encontrar o  $pH_{PCZ}$  foi confeccionado um gráfico de pH final em função do pH inicial, sendo que o  $pH_{PCZ}$  corresponde à faixa na qual o pH final se mantém constante, independentemente do pH inicial, ou seja, a superfície comporta-se como um tampão. Neste trabalho os testes foram realizados em triplicata.



### **2.3 Estudo do efeito do pH no Sistema de Adsorção**

Avaliou-se o efeito do pH no processo de adsorção do corante azul de metileno em aluminossilicato. Foram feitos os testes do branco, e posteriormente utilizados 1100 mg do adsorvente, na granulometria de 115 mesh, em 25 mL de solução do corante de interesse, com concentração de  $10 \text{ mg L}^{-1}$ . Em seguida ajustou-se o pH das amostras ( $4,0 \leq \text{pH} \leq 10$ ), levou-se ao banho termostático, sob agitação de 100 rpm, temperatura de  $25 \text{ }^\circ\text{C} \pm 2,0 \text{ }^\circ\text{C}$ , por 24 horas. As soluções foram centrifugadas por 3 a 5 minutos, em 2500/3000 rpm, e uma alíquota de 2 mL dos sobrenadantes foi retirada para ser analisada no espectrofotômetro de UV-Vis – Lambda 25 da Perkim Elmer. A faixa de pH estudada para o corante foi de  $4,0 \leq \text{pH} \leq 10$ . O comprimento de onda utilizado no espectrofotômetro de UV-Vis foi de 665,00 nm, para o corante azul de metileno. O experimento foi realizado em triplicata.

## **RESULTADOS E DISCUSSÃO**

### **3.1 Obtenção do Ponto de Carga Zero - $\text{pH}_{\text{PCZ}}$**

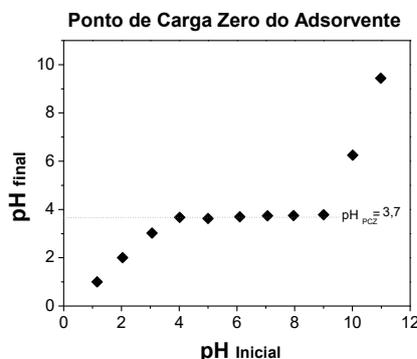
A estrutura química e a composição da superfície de um adsorvente estão ligadas, intrinsecamente, à sua capacidade de adsorção (YOUSSEF et al., 2004). O parâmetro de análise do ponto de carga zero ( $\text{pH}_{\text{PCZ}}$ ) indica o valor de pH no qual um sólido apresenta carga eletricamente nula em sua superfície. Isto é, o número de cargas positivas é igual ao número de cargas negativas. Então, se o pH da solução for menor que o  $\text{pH}_{\text{PCZ}}$  do material, esta superfície ficará carregada positivamente. Por outro lado, se o pH da solução for maior que o  $\text{pH}_{\text{PCZ}}$  do material, a superfície deste ficará carregada negativamente (SILVA et al., 2010). A determinação do  $\text{pH}_{\text{PCZ}}$  de um material está baseada no método Keng e Uehara (1974), utilizando-se de um eletrólito forte como meio de contato e transferência de massa para a superfície do adsorvente.

Assim, a adsorção ocorrerá de maneira mais eficiente quando o pH da solução favorecer o contato e a transferência de massa do adsorvato (fase fluida) para a superfície do adsorvente (fase sólida) (KOSMULSKI, 2009; McCABE et al., 2001). A Figura 2 apresenta a relação entre o pH inicial e o pH final da solução, sendo o  $\text{pH}_{\text{PCZ}}$  calculado a partir da média aritmética dos pontos de pH estudados, em



triplicata, que se apresentaram constantes para o pH final. Neste estudo utilizaram-se os valores de pH de 1 a 11.

Figura 2 - Ponto de Carga Zero –  $pH_{PCZ}$  do Aluminossilicato.



O valor encontrado para o parâmetro do  $pH_{PCZ}$  neste estudo foi  $3,7 \pm 0,03$ . No Quadro 1 é apresentado o  $pH_{PCZ}$  de diferentes silicatos encontrados na literatura. Ao comparar o valor de  $pH_{PCZ}$  encontrado para as amostras de aluminossilicato, observa-se que está em conformidade com a literatura (GIANNETTO et al., 2000; KOSMULSKI, 2009).

Quadro 1 –  $pH_{PCZ}$  de diferentes silicatos encontrados na literatura.

MATERIAL	REFERÊNCIA	PCZ / IEP	PZC <sub>MIN</sub>
Sílicas precipitadas / Alemanha	KOSMULSKI, 2009	4,1	4,1
SiO <sub>2</sub> / Shokubai	KOSMULSKI, 2009	< 4,0	-
SiO <sub>2</sub>	KOSMULSKI, 2009	< 3,0	-
SiO <sub>2</sub> , SBA-15	JIAO et al., 2008	4,2	4,0
kaolinita da Nigéria	UNUABONAH et al. , 2008	4,4	-
Bentonita de Almeria/ Espanha	JIMENEZ et al., 2008	< 4,0	-
ZSM-5 zeolita / Lanzhou	SHAL et al., 2009	3,6	3,2
H-MFI-90 / Sudão	BORAH et al., 2009	3,6	-
SiO <sub>2</sub> -Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub> compostos aq.	JANUSZ et al., 2007	4,6	4,0
Sílicas pirogênicas	KOSMULSKI, 2009	4,3	4,2
Aluminossilicato (ALMS)	Neste trabalho	3,7	-

### 3.2 Estudo do efeito do pH no Sistema de Adsorção

O estudo do pH no sistema é um fator fundamental na adsorção. Pois, relaciona a capacidade competitiva dos íons hidrogênicos com os íons do adsorvente durante a troca iônica no sistema (SENTHILKUMAR et al., 2011). Alguns pontos a considerar



são: a descaracterização do adsorvente e/ou adsorvato, e a relação adsorvente /adsorvato no preenchimento dos sítios ativos durante o processo.

As Figuras 3a / 3b, e, a Tabela 1 - trazem os resultados obtidos com o estudo do efeito do pH no processo de adsorção do corante azul de metileno em aluminossilicato. Valores de pH muito baixos da solução, abaixo do valor de  $pH_{PCZ}$ , podem provocar uma desaluminação ( $Al^{3+}$ ) na camada octaédrica do material adsorvente (KAUSAR et al., 2018), permitindo que grupos  $SiO_4$  (tetraédricos) fiquem intactos; mas, causando uma desorganização na estrutura cristalina. A desordem estrutural promove a formação de mesoporos, reduzindo a capacidade de troca iônica; pois, ocorre a substituição do íon ( $Al^{3+}$ ) por íons ou espécies de silício menos estáveis. Estas espécies buscam reorganizar-se, migrando dentro da estrutura cristalina do adsorvente (MARÇAL et al., 2015).

O aumento do pH promove um decréscimo nessa competição, promovendo uma maior percentagem de remoção. Isto ocorre; porque existe uma maior disponibilidade de sítios ativos, associados ao aumento de grupos carregados negativamente na matriz do adsorvente permitindo uma maior percentagem de remoção (RAHMAN; ISLAM, 2009).

Figura 3a - Remoção do adsorvato.

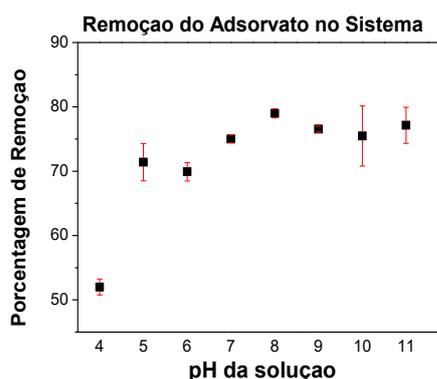


Figura 3b - Quociente  $q_e$  no sistema.

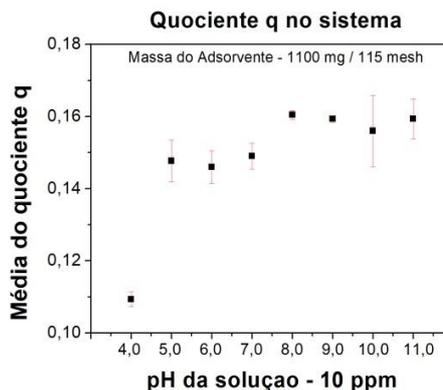


Tabela 1 – Porcentagem de remoção do corante Azul de Metileno no sistema.

AMOSTRAS	pH 4,0	pH 5,0	pH 6,0	pH 7,0	pH 8,0	pH 9,0	pH 10,0	pH 11,0
AMOSTRA 1	51,00%	74,60%	70,30%	76,00%	79,00%	76,88%	79,30%	74,40%
AMOSTRA 2	52,00%	72,00%	71,40%	74,80%	77,80%	75,89%	68,90%	81,00%
AMOSTRA 3	54,00%	67,60%	68,00%	71,40%	79,50%	76,88%	78,20%	76,00%
<b>MÉDIA</b>	<b>52,00%</b>	<b>71,40%</b>	<b>69,90%</b>	<b>75,00%</b>	<b>79,00%</b>	<b>76,55%</b>	<b>75,47%</b>	<b>77,13%</b>



O quociente  $q_e$ , e, a porcentagem de remoção do corante no processo de adsorção ficaram bem ajustados aos valores de pH 8,0 / 9,0 e 11,0 (Figura 3a / 3b e Tabela 1). Os dados obtidos indicam uma maior porcentagem de remoção do adsorvato em valores de pH mais altos; ocorrendo uma maior disponibilidade de sítios ativos associada ao aumento de grupos carregados negativamente na matriz do adsorvente.

Dentre os valores de pH bem ajustados, o pH 8,0 e 9,0 encontram-se dentro da faixa permitida para o descarte de efluentes, seus produtos e subprodutos, conforme a Lei nº 357/2005; e, Lei nº 430/2011 do CONAMA. Porém, o pH 8,0 apresentou o melhor ajuste aos parâmetros (quociente  $q_e$  / porcentagem de remoção / relação adsorvente - adsorvato / integridade na estrutura do material) durante o processo de adsorção.

## CONSIDERAÇÕES FINAIS

O adsorvente tem afinidade por solutos catiônicos caracterizado por meio do índice do pH<sub>PCZ</sub> obtido neste estudo.

O pH ótimo obtido para o sistema foi 8,0; favorecendo o melhor ajuste na relação adsorvente/adsorvato durante o processo de adsorção; permanecendo dentro da faixa permitida para o descarte de efluentes, seus produtos e subprodutos, conforme a Lei nº 357/2005; e, Lei nº 430/2011 do CONAMA.

Uma maior porcentagem de remoção do adsorvato ocorreu em valores de pH mais altos, proporcionando uma maior disponibilidade de sítios ativos associada ao aumento dos grupos carregados negativamente na matriz do material.

## AGRADECIMENTOS

Agradeço à Fundação de Amparo à Pesquisa do estado de Goiás – FAPEG que investiu neste projeto. Agradeço aos professores, técnicos, amigos; e, colaboradores da UEG. Agradeço à empresa CELG S.A. pelo resíduo disponibilizado, e, FURNAS S.A. pela caracterização do resíduo. Agradeço aos meus orientadores.



## REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

ABBASI, M.; HABIBI, M.M. Optimization and characterization of direct Blue71 removal using nanocomposite of chitosan-WCNTs: Central composite design modeling. **Journal Taiwan Institute Chemical Engineers**, v. 62, p. 112-121, 2016.

ALMEIDA, C.A.P.; DEBACHER, N. A.; DOWNS, A.J.; COTTET, L.; MELO, C.A.D.; Removal of methylene blue from colored effluents by absorption on montmorillonite clay. **Journal Colloid Interface Sci**, 332, p. 46-53, 2009.

BORAH, D. ; S. KATO; T. KOJIMA; S. SATOKAWA. Sorption of as (V) from Aqueous Solution Using Acid Modified Carbon Black. **Journal of Hazardous Materials**, n.162, p. 440, 2009.

BRUCH, L.; COLE, M.; ZAREMBA, E.; Physical adsorption: Forces and Fenomena, **International series of monographs on chemistry**, v.33, Press Oxford, 1997.

BRASIL. CONSELHO NACIONAL DE MEIO AMBIENTE. Dispõe sobre as condições, parâmetros, padrões e diretrizes para gestão do lançamento de efluentes em corpos de água receptores **Resolução nº 357 de 17 de março de 2005. CONAMA. Alterada pela Resolução nº 410 de 2009 e pela Resolução nº 430 de 2011**. Disponível em: < <http://www.mma.gov.br/port/conama/res/res05/res35705.pdf>>. Acessado em: 27 de março de 2018.

GIANNETO, G. P. Zeolitas, características, propiedades y aplicaciones industriales, Editora - **Editorial Innovación Tecnológica**, v. 2, 351 p., Caracas, 2000.

GOULART, M.; MELO, A. L.; CALLISTO, M. Qual a relação entre as variáveis ambientais e a diversidade de heteropteros aquáticos em nascentes de altitudes? **Bios Review**, v. 10, n.10, p. 63–76, 2002.

GUPTA, V.K. ; SUHAS. Application of low-cost adsorbents for dye removal. A review. **Journal Eviron Manage.** , v.90, p. 2313-2343, 2009.

JANUSZ, W.; SEDLAK, A. Specific Adsorption of Carbonate Ions at the Zinc Oxide/Electrolyte Solution Interface. **Physicochemical Problems of Mineral Processing**, v. 42, p. 57-66, 2008.

JIMENEZ, M.L.; DELGADO, A.V.; KAATZE, U. Surface characterization of clay particles via dielectric spectroscopy. **Journal Annales, UMCS, Chemistry**, v.63, p.73, 2008.

JIAO, L.; REGALBUTO, J.R. The synthesis of highly dispersed noble and base metals on silica via strong electrostatic adsorption: II. Mesoporous silica SBA-15. **Journal of Catalysis**, v. 260, p.342-350, 2008.



KAUSAR, A.; IQBAL, M.; JAVED, A.; AFTAB, K.; NAZLI, Z.H.; BHATTI, H. N.; NOUREN, S.; Dyes adsorption using clay and modified clay: A review. **Journal of Molecular Liquids**. MOLLIQ 8676, S0167-7322 (17) 34636-6, v.1, 2018.

KENG, J.C.W. E UEHARA, G. Chemistry - Mineralogy and taxonomy of Oxisols and Ultisols. **Proceedings of Soil Crop Science Society of Florida**, Belle Glade, v. 33, p. 119-126, 1974.

KOMULSKI, M.; pH-dependent surface charging and points of zero charge. IV Update and new approach. **Journal of Colloid and Interface Science**, v. 337, p. 439-448, 2009.

KSHIRASAGAR, A.S.; GAUTAM, A.; KHANNA, P.K. Efficient photo-catalytic oxidative degradation of organic dyes using CuInSe<sub>2</sub>/TiO<sub>2</sub> hybrid hetero nanostructures. **Journal of Photochemistry and Photobiology**. The Chemistry, v.349, p. 73-90, 2017.

KUMAR, J. V. ; HAYASHI, S. Modification on natural clinoptilolite zeolite for its NH<sub>4</sub><sup>+</sup> retention capacity. **Journal of Hazardous Materials**, v.169, p. 29-35, 2009.

MARÇAL, M. S.; DIAS, A.P.V.S.P.; PUNA, J.F.B.; Valorização da Glicerina , Produção de Solketal. Dissertação para obtenção de grau de mestre em Engenharia Química, **Instituto Superior Técnico**, Universidade de Lisboa, v. único, p. 31-41, 2015.

MCCABE, W. L., SMITH, J. C., HARRIOT, P.; Unit Operations of Chemical Engineering. NewYork. **McGraw Hill International Ed.**; 6th ed., 2001;

NÓBREGA, G. A. S. **Determinação do teor de umidade do gás natural usando um dispositivo com adsorção**. Monografia, UFRN, Departamento de Engenharia Química, Programa de Recursos Humanos – PRH 14/ANP. Áreas de Concentração: Engenharia de Processos e Processo de Separação, Natal/RN, Brasil, 2001.

RAHMAN, M. S.; ISLAM, M. R. Effects of pH on isotherms modeling for Cu(II) ions adsorption using maple wood sawdust. **Chemical Engineering Journal**, v. 149, n. 1-3, p. 273-280, 1 jul. 2009.

SENTHILKUMAR, P.; RAMALING, S.; SATHYASELVABALA, V.; DINESH KIRUPHA, S.; SIVANESEAN, S. Removal of copper(II) ions from aqueous solution by adsorption using cashew nut shell. **Elsevier Journal**. Desalination, v. 266, issue 1-3, p. 63-71, 2011.

SILVA, F. M.; SANTANA, S. A. A.; BEZERRA, C. W. B; SILVA, H. A. S.; Adsorção do Corante Têxtil Azul de Remazol R por Pseudocaulis da Bananeira (**Musa sp**) **Cad. Pesq.**, São Luís, v. 17 n. 3, p. 71-77, 2010;

SILVA, R. P. da. **Remoção de metais pesados em efluentes sintéticos utilizando vermiculita como adsorvente**. [s.l.] UFRN, 2010.

SRINIVASAN, A.; VIRARAGHAVAN, T. Decolorization of dye wastewaters by biosorbents. A review, **Journal of Environmental Management**, v.91, p. 1915-1929, 2010.



VI Congresso de Ensino, Pesquisa e Extensão da UEG

Ciência e Inovação como perspectivas para o  
Desenvolvimento Social e Sustentável

de 16 a 18/10/2019  
Anápolis



VARQUEZ, A.R.; DE SOUZA, S. M. A. G. U.; WEISSENBERG, L.; DE SOUZA, A. A. U.; VALE, J.A.B. Adsorção dos corantes R016, RR2 e RR141 utilizando lodo residual da indústria têxtil. **Engenharia Sanitária Ambiental**, v.16, n.3, p. 245-252, 2011.

YANG, R. DAWEI, L.; LI, A.; YANG, H. Adsorption properties and mechanisms of palygorskite for removal of various ionic dyes from water. **Elsevier Journal**, Applied Clay Science, v.151, p.20-28, 2018.

YANG, Y.; YU, W.; HE, S.; YU, S.; CHEN, Y.; LU, L.; SHU, Z.; CUI, H.; ZHANG, Y.; JIN, H.; Rapid adsorption of cationic dye-methylene blue on the modified montmorillonite/graphene oxide composites. **Elsevier Journal**. Applied Clay Science 168, p. 304-311, 2019.

YOUSSEF, A. M., EI-NABARAWY Th. SAMRA, S. E. Sorption properties of chemically-activated carbons 1. Sorption of cadmium(II) ions. **Colloids and Surfaces A: Physicochemical Engineering Aspects** 235, p. 153. 2004.

REALIZAÇÃO

PRG  
Pró-Reitoria de  
Graduação

PRP  
Pró-Reitoria de  
Pesquisa e  
Pós-Graduação

PRE  
Pró-Reitoria de  
Extensão, Cultura e  
Assuntos Estudantis



Universidade  
Estadual de Goiás

## DESENVOLVIMENTO DE MÉTODO PARA DETERMINAÇÃO DE DESLORATADINA E SEUS PRODUTOS DE DEGRADAÇÃO POR CLAE.

Gabriela R.D. Nascimento<sup>1</sup>(PG)\*, Viviane G. Bonifácio<sup>1</sup>(PQ), Marilene S. Oliveira<sup>3</sup>(PQ)

1-Universidade Estadual de Goiás, e-mail: nascimento.gr@outlook.com. 2 - Instituto Federal Goiano, Campus – Rio Verde.

Resumo: *O desenvolvimento de novos medicamentos é um processo trabalhoso que necessita cuidado, diante disto o perfil de degradação consiste em uma parte extremamente importante do registro de um medicamento, ele faz parte dos testes de estabilidade, no qual é possível prever possíveis problemas de estabilidade do princípio ativo. Produtos de degradação são impurezas orgânicas que podem ser provenientes da interação do insumo farmacêutico com excipientes da formulação ou a degradação do princípio ativo quando expostos a condições estressantes, previamente pensadas durante o estudo de degradação forçada. O perfil de degradação forçada consiste de experimentos em uma série de condições, que vão desde hidrólise ácida e básica, exposição ao calor e a umidade, exposição fotolítica e a íons metálicos (Fe e Cu). Para o estudo dos produtos de degradação a técnica de cromatografia líquida de alta eficiência (CLAE) tem sido bastante utilizada pois é possível identificar os componentes por meio de padrões e quantificar esses componentes. Após a realização do estudo por CLAE é feita a análise dos resultados obtidos para que possa ser feita a devida notificação, identificação e qualificação das substâncias encontradas.*

Palavras-chave: Estabilidade, Desloratadina, Fármacos, CLAE

### Introdução

O desenvolvimento de novos medicamentos é um processo trabalhoso que necessita cuidado, diante disto para se realizar o registro de um medicamento é necessário que o mesmo passe por uma série de análises, para que seja comprovada a sua estabilidade e segurança durante seu período de validade. Todo medicamento deve ser analisado para que ao ser ingerido ele não cause nenhum dano àqueles que o consumirem. Parte importante destes testes a serem realizados são os perfis de degradação. (ALCÂNTARA et al., 2013).

Para se determinar o perfil de degradação, ensaios de estresse são realizados com o intuito de expor o fármaco de interesse a condições acima do

normal, situações que levam a amostra ao seu limite. Os resultados destes testes, que resultam no perfil de degradação, são um conjunto de substâncias obtidas como resultado da exposição do insumo farmacêutico (ou do produto acabado) à condições específicas, que podem ser definidas como: perfil de degradação real ou perfil de degradação potencial (Guia 04/2015, LEITE,2015)

O perfil de degradação real é obtido através do estudo de estabilidade acelerada, que pode, ou não, apresentar produtos de degradação, e que é realizado no tempo de vida útil do medicamento. O perfil potencial consiste em expor o medicamento a uma serie de condições que possam ser capazes de promover uma degradação a um nível em que seja possível realizar a notificação, identificação e qualificação desses produtos de degradação (Guia 04/2015).

Os produtos de degradação são impurezas orgânicas que podem ser originários do princípio ativo, como também dos demais constituintes da formulação do fármaco, quando submetidos a algum tipo de estresse, por isso o estudo é realizado tanto na matéria prima quanto no produto acabado. (MELO, 2012). As condições de estresse a que são submetidos os medicamentos, são realizadas para promover uma mudança química no material de interesse, essas condições compreendem hidrólise ácida e básica, umidade, exposição ao calor, degradação oxidativa, fotolítica e exposição a íons metálicos. (RDC nº53)

O estudo de degradação forçada é realizado em condições extremas, em que o fármaco pode ou não ser submetido durante a sua vida útil, e através deste estudo é possível analisar os produtos formados e observar o seu comportamento, e se essas substâncias são nocivas. Desta maneira o perfil de degradação forçada consiste em uma barreira para garantir de forma ainda mais eficaz a segurança na utilização do fármaco. (W.BAERTSCHI, 2005; MELO, 2012; SINGH et al., 2013)

Portanto a realização do estudo de perfil de degradação é de suma importância para garantir a segurança dos medicamentos registrados e para evitar possíveis problemas de estabilidade que possam vir a ocorrer futuramente. Diante disto, a técnica de cromatografia líquida de alta eficiência (CLAE) com detecção por UV/Vis tem sido bastante utilizada, por permitir a identificação e quantificação dos componentes por meio da análise de padrões.

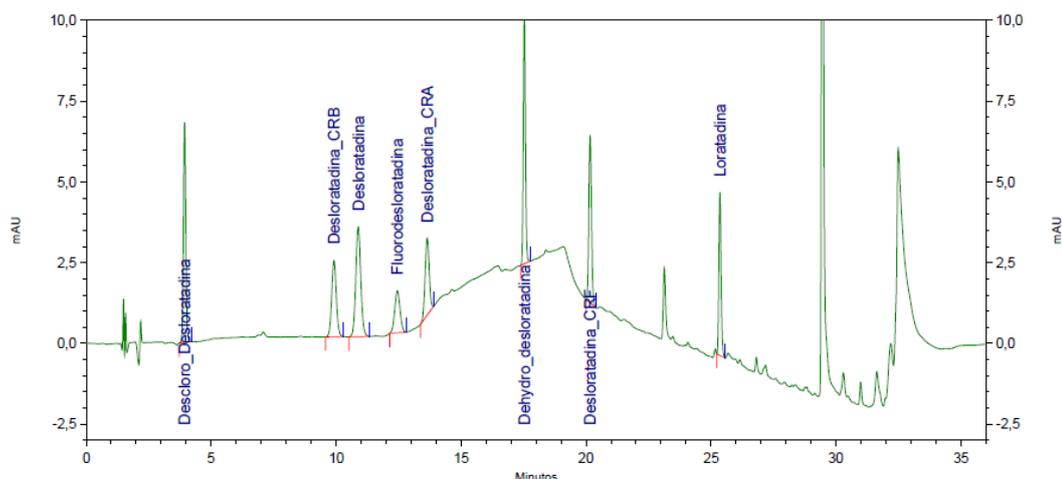
## Material e Métodos

Para a identificação dos produtos foram utilizados os seguintes padrões: desloratadina (USP), composto relacionado A (USP), composto relacionado B (USP), impureza Dehydro desloratadina (PGS), impureza Desclorodesloratadina (PGS), composto relacionado F(USP), 11-fluorodesloratadina (PGS) e loratadina (USP). Os reagentes utilizados foram: Acetonitrila grau HPLC (Biograde), Metanol grau HPLC ( Biograde ) , Fosfato de Potássio Monobásico PA ( labsynth), Trietilamina PA ( JT Baker), Acido Fosfórico PA (JT Baker). O cromatógrafo utilizado para desenvolvimento do método foi um cromatografo Agilent 1260, equipado com um compartimento de bomba quaternária modelo G1311B, Amostrador modelo G1329B, forno para a coluna modelo G1316A, Detector DAD modelo G4212B e termostato modelo G1330B. A coluna utilizada foi uma coluna Zorbax SB C8 (150 mm x 4,6 mm e 3,5  $\mu$ m, S.N.USEI 023404). O método desenvolvido usou como fase móvel uma mistura de solventes A, B e C, sendo solução A: tampão fosfato de potássio monobásico 1,36 g/L + 14,5 mL/L de trietilamina com o pH ajustado para 2,1; solução B: Acetonitrila; solução C: Metanol. A programação do gradiente (T/%B/%C) foi definida como: 0,0,7.5,7.5/ 10,0,7.5,7.5/ 30,0,45.0,45.0/ 30,1,7.5,7.5/ 36,0,7.5,7.5, com o fluxo de 1,0 mL/min, a temperatura da coluna foi mantida a 40°C ,o volume de injeção foi de 5  $\mu$ L e o comprimento de onda utilizado foi de 280 nm.

## Resultados e Discussão

O presente trabalho inicialmente desenvolveu um método parcial, por CLAE para obter um cromatograma das impurezas conhecidas, utilizando padrões, e para avaliar o comportamento das amostras que serão expostas ao teste de estresse. Após o desenvolvimento do método foi preparada uma amostra contendo todas as impurezas conhecidas da desloratadina em uma concentração de 0,005 mg mL<sup>-1</sup>, utilizando metanol como solvente. Essa amostra permitiu determinar o tempo de retenção de cada impureza juntamente com o princípio ativo e mostrou que o método possui especificidade e seletividade para a desloratadina, o cromatograma referente ao mix de impurezas é apresentado na Figura 1.

Figura 1- Cromatograma do mix de padrões das impurezas da desloratadina no Limite de identificação (LI) estipulado de acordo com a RDC 53 de 0,5%.



Os picos apresentados no cromatograma são referentes as impurezas conhecidas da desloratadina presentes no mix .

Tabela 1- Resultados obtidos com o mix de impurezas da Desloratadina.

Resultados DAD: Sinal A, 280,0  
nm/Lb:4,0 nm

Name	N	Time	Area	Pratos (USP)	As	Res (USP)	k'	S/N
Descloro_Desloratadina	1	3,94	6064032	8307	1,06	0,00	2,16	553,61
Desloratadina_CRB	2	9,91	4071761	13599	1,06	23,29	6,96	191,53
Desloratadina	3	10,89	6398735	13854	1,07	2,74	7,74	276,44
Fluorodesloratadina	4	12,45	2583602	15941	1,01	4,10	8,99	105,82
Desloratadina_CRA	5	13,65	3664672	31669	1,01	3,40	9,95	193,94
Dehydro_desloratadina	6	17,53	6191726	199253	1,10	16,76	13,07	628,78
Desloratadina_CRF	7	20,16	5193408	165541	1,14	14,79	15,18	419,32
Loratadina	8	25,36	4212134	382211	1,13	28,71	19,35	409,59

A Tabela 1 mostra os resultados obtidos com o mix de impureza, onde observa-se as sete impurezas da desloratadina com seus respectivos tempos de retenção, também é mostrado na tabela a assimetria, resolução e a eficiência da coluna (pratos teóricos) para cada pico identificado, de acordo com o Guia 4 para realização do perfil de produtos de degradação esses parâmetros são importantes para determinação dos picos e sua identificação e posteriormente são usados na validação do método desenvolvido, para indicação de sua estabilidade. (Guia 04/2015)

Os resultados foram satisfatórios pois o método apresentou seletividade para a Desloratadina, com pureza de pico igual a 1,0, o sinal/ruído dos picos identificados

foram superiores a 10, com eficiência de coluna acima de 2000 pratos teóricos, e fator de assimetria menor 2,0. Dessa maneira os resultados comprovaram a eficácia do método para a identificação e quantificação da desloratadina e suas impurezas, podendo assim ser empregado para a análise dos produtos de degradação.

### Considerações Finais

No trabalho realizado foi possível obter um método preciso e capaz de identificar impurezas presentes no IFA (Insumo Farmacêutico Ativo) por CLAE, sem interferir no pico principal, e o mesmo será usado para a realização do perfil de degradação da Desloratadina, a próxima etapa do projeto consiste na identificação das impurezas desconhecidas obtidas durante o teste de degradação.

### Agradecimentos

A Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior (CAPES) pelo apoio financeiro a essa pesquisa e a Universidade Estadual de Goiás (UEG), bolsista M.S.O. PNPD/CAPES, IF Goiano -Campus Rio Verde.

### Referências

- ALCÂNTARA, F. C. *et al.*, Teste de Degradação Forçada Para Fármacos e Medicamentos. *Revista de Pesquisa e Inovação Farmacêutica*, São Paulo, v. 1, n. 5, p.38-48, maio 2013.
- BRASIL. Resolução nº 53, de 04 de dezembro de 2015. Resolução para regulamentação da notificação, identificação e qualificação de produtos de degradação em medicamentos. Agência Nacional de Vigilância Sanitária. Poder Executivo, Brasília, DF, Diário Oficial da União, 04 dez. 2015.
- BRASIL. Guia nº 04/ versão 01, de 24 de julho de 2017. Resolução para estabelecimentos de critérios para a validação de métodos analíticos. Agência Nacional de Vigilância Sanitária. Poder Executivo, Brasília, DF, Diário Oficial da União, 24 jul. 2017.
- MELO, S. R. de O. Produtos de Degradação: regulamentação sanitária e proposta de monografia para qualificação. 2012. 114 f. Dissertação (Mestrado) - Curso de Ciências da Saúde, Universidade de Brasília, Brasília, 2012.
- Seguir as normas vigentes da ABNT.
- BAERTSCHI, W., Steven (Ed.). **Pharmaceuticals Stress Testing**. Indiana: Taylor & Francis Group, 2005. 469 p.
- LEITE, F., Impurezas de Degradação: **Farmacêutica e Química**, São Paulo, Àtomo, 2015, 21-25p.



## ESTUDO TEÓRICO DA INTERAÇÃO DE ÁCIDOS MONO E DICARBOXÍLICO COM A BASE ESMERALDINA

Adão Machado Lima (PG)<sup>1\*</sup>  
José Divino dos Santos (PQ)<sup>2</sup>  
Olacir Alves Araújo (PQ)<sup>3</sup>  
[adaoqui@gmail.com](mailto:adaoqui@gmail.com)  
Universidade Estadual de Goiás

**Resumo:** Este artigo nasce com o principal objetivo de analisar teoricamente a formação do Sal Esmeraldina (SE) a partir da Base Esmeraldina (BE), quando esta é dopada com ácidos mono e dicarboxílico. Derivada da Polianilina, polímero intrinsecamente condutor, a Base Esmeraldina é um composto orgânico que, após dopada com ácidos orgânicos, apresenta potencial de eletricidade extremamente alto. Após os estudos teóricos realizados, pôde-se perceber que, numa interação realizada através do método em mecânica quântica PM6-D3 com o funcional de base B3LYP, a BE, em meio aquoso e ao ser dopada com um diácido, torna-se capaz de formar o SE, além de ser receptora de elétrons.

**Palavras-Chave:** Polianilina. Esmeraldina. Ácidos. Dopagem.

### Introdução

A Base Esmeraldina (BE) é derivada da Polianilina, um polímero intrinsecamente condutor e composto orgânico, que pode ser constituído tanto na forma de base, quanto na forma de sal. Sendo que na última condição, este oligômero é altamente condutor de eletricidade. Durante a protonação da BE, quando dopada com ácidos orgânicos em meio aquoso, ocorre a formação do Sal Esmeraldina (SE), especificamente nas regiões imina (-N=). De acordo Casanovas *et al.* (2012, p. 7.325), a Base Esmeraldina apresenta um estado de oxidação intermediário.

### Material e Métodos

Na síntese direta da Base Esmeraldina (BE) foram utilizados os ácidos orgânicos: butírico, succínico, caproico e adípico. Para se observar as interações moleculares das estruturas de Esmeraldinas (BE), ao ser dopada com ácidos orgânicos mono e dicarboxílicos, criou-se linguagens computacionais executadas com auxílios de programas de computadores, a saber: bash, awk e python, MOPAC-PMx e GAUSSIAN.

<sup>1</sup> Mestrando pelo Programa Pós-Graduação em Ciências Moleculares (PPGCM), da Universidade Estadual de Goiás (UEG).

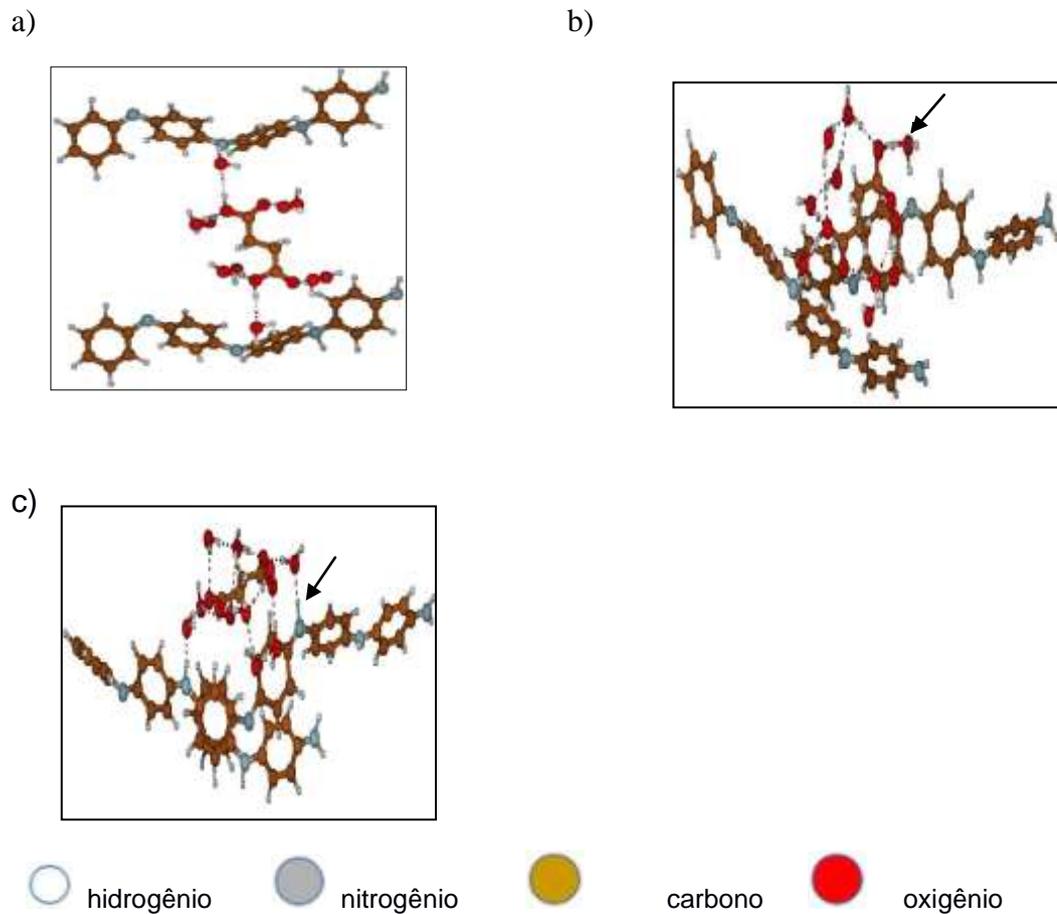
<sup>2</sup> Pós-doutor pela Universidade Federal de São Carlos e docente Programa Pós-Graduação em Ciências Moleculares da UEG.

<sup>3</sup> Pós-doutor pela Universidade Federal de Goiás e docente Programa Pós-Graduação em Ciências Moleculares da UEG.



Para formar a esmeraldina (SE), foram utilizados métodos em mecânicas quânticas *ab initio* (6-311G) e semiempírico (PM6D3). As simulações para se observar a formação de sal esmeraldina, dividiu-se em três criteriosas etapas, observando-se as geometrias de otimização de cada composto, conforme a figura 1.

Figura 1: Representação da otimização geométrica da formação do sal de esmeraldina. (a) Primeira geometria de otimização; (b) segunda geometria de otimização; e, (c) terceira geometria de otimização/formação do sal de esmeraldina.



Na primeira geometria de otimização (a) observou-se que ocorreu interação molecular entre ácido e moléculas de água. Nesta situação, foram expostas duas moléculas de água entres as bases e o ácido.

Na segunda geometria de otimização (b) observou-se que, nas estruturas moleculares, a base esmeraldina se interage tanto com a água, quanto com o ácido.

Nesta análise, observou-se também que as estruturas moleculares tendem a



se posicionar nas regiões de maior estabilidade. Em tal situação, ocorrem as mudanças conformacionais nas geometrias moleculares de todos os compostos envolvidos no sistema. À medida que as interações ocorriam, observou-se a formação do íon hidrônio ( $H_3O^+$ ), conforme seta.

Na terceira e última energia de otimização (c), as moléculas de água formaram pontes de hidrogênio entre a Base Esmeraldina e o ácido. Assim, as Esmeraldinas (BE) exercem grandes forças de atração entre as moléculas de água, até que ocorra transferência do hidrogênio das águas para esmeraldina (BE), formando-se o Sal de Esmeraldina (SE).

A variação de energia calculada entre a interação molecular de todos compostos foi de -0,073 eV.

## Resultados e Discussão

Os resultados obtidos foram que a base esmeraldina desprotonada, quando dopada com ácido succínico, ocorreu a formação do sal esmeraldina. Portanto este resultado foi possível usando o método em mecânica quântica semiempírico PM6-D3 e o método *ab initio* 6-311G.

## Considerações Finais

Conclui-se que a formação do sal esmeraldina ocorre somente quando a base esmeraldina e dopada com ácido mono e dicarboxílico em meio aquoso.

## Agradecimentos

À Universidade Estadual de Goiás.

## Referências

CASANOVAS, J. C. CANALES, M. FABREGAT, G. MENEGUZZI, A. ALEMÁ. C. Water Absorbed by Polyaniline Emeraldine Tends to Organize, Forming Nanodrops. **The Journal of Physical Chemistry** V. 89, p. 7342-7350, 2012.

CARRAHER, C. S. R. **Polymer Chemistry**: New York: Editora M. Dekker, 2003.

## Fitocomplexo presente nas flores de *Tabebuia impetiginosa* e *T. serratifolia* coletadas em Goiás.

Marcos M. de Sousa<sup>1</sup> (PG)\*, Jakeline de O. Ramos<sup>1</sup> (PG), Gilberto L. B. Aquino<sup>1</sup>, Giuliana M. Vila Verde<sup>1</sup> (PQ) \*marcosmds6@gmail.com

<sup>1</sup> Laboratório de Pesquisa em Bioprodutos e Síntese – LPbioS – CCET, UEG.

As espécies *Tabebuia impetiginosa* e *T. serratifolia* são conhecidas popularmente como ipê roxo e ipê amarelo, respectivamente. São encontradas principalmente nas Américas Central e Sul, nas quais são muito utilizadas na arborização urbana. Devido à ampla variedade de metabólitos secundários existentes nas plantas, as espécies de *Tabebuia* apresentam atividades antialérgicas, antitumoral, antifúngica e antibacteriana, dentre outras. Para um melhor entendimento das espécies de *Tabebuia*, o objetivo desta pesquisa foi detectar os metabólitos presentes em florações de ipê, através da prospecção fitoquímica, para que se possa ter um maior entendimento sobre os compostos das florações de espécies do ipê. Os metabólitos detectados com os testes qualitativos realizados em ambas as espécies foram antraquinonas, cumarinas, chalconas, terpenos e taninos. Entre os metabólitos, os compostos fenólicos são bastante empregados no setor alimentício, como corantes e possuem atividade antioxidante e antibacteriana, demonstrando a importância do conhecimento a respeito da planta estudada para se ter um maior aproveitamento de suas potencialidades.

Palavras-chave: Fitoquímica. Ipê. Fitocomplexo.

### Introdução

A biodiversidade é a responsável por tudo que se tem disponível no meio ambiente, desde o que forma pessoas até o que se precisa de fato para sobreviver, mantendo o equilíbrio e a estabilidade dos ecossistemas. Além disso, ainda é fonte para atividades de todos os setores sociais, como: pesqueira, alimentícia, cosmética, farmacológica, entre outras (BRASIL, 2019).

As plantas apresentam importante potencial para o desenvolvimento de pesquisas na busca de produtos naturais biologicamente ativos, que podem se tornar possíveis sínteses de novos fármacos, podendo apresentar atividades antibactericida, antitumoral e antifúngica, por exemplo. Essas possibilidades só são possíveis devido à diversidade estrutural, físico-química e biológica presentes nas plantas (GUERRA; NODARI, 2003; HOSTETTMANN; QUEIROZ; VIEIRA, 2003).

Além da descoberta de novos fármacos, o estudo das plantas que apresentem substâncias que possam atuar em mecanismos biológicos torna-se de grande importância para a saúde humana, para que se garanta que não tenha nenhum outro potencial desconhecido e que possa manifestar reações indesejadas a curto ou longo prazo (FIRMO et al., 2011).

Na busca por novos potenciais presentes nas plantas, a família Bignoniaceae apresenta vários gêneros, como o gênero pertencente aos ipês, conhecido como *Tabebuia*. As espécies desse gênero são muito utilizadas na medicina popular para tratamento de diversas situações biológicas, como tumores. Tais empregos são garantidos pelos metabólicos secundários existentes nas plantas, como é o caso dos compostos fenólicos, os quais são muito utilizados na indústria de corantes e também apresentam atividades biológicas importantes (FISCHER; THEISEN; LOHMANN, 2004; LEMOS et al., 2012; BHANDARI; KAWABATA, 2004).

Dessa forma, o presente trabalho tem como objetivo compreender melhor os metabolitos secundários pertencentes as espécies *Tabebuia serratifolia* e *Tabebuia impetiginosa* de ocorrência no Cerrado goiano.

## Material e Métodos

A floração das espécies de *Tabebuia impetiginosa* e *Tabebuia serratifolia* foram coletadas em locais distintos. A *Tabebuia impetiginosa* foi coletada no município de Abadiânia, Goiás, Brasil georreferenciada a 16°11'02.1"S 48°41'18.8"W. Já as florações de *Tabebuia serratifolia* foram obtidas em distintas localidades, como: Ouro Verde de Goiás, Campo Limpo de Goiás, Anápolis e Abadiânia. Os ramos do ipê roxo foram destinados à confecção de exsicata e depositada no Herbário da UEG sob o número de tombo 11.955 e 11.956 respectivamente. Após coletado, o material vegetal foi seco em estufa de circulação de ar (40°C) durante três dias. Em seguida, pulverizado em moinho de facas do tipo Willey, obtendo uma granulometria média.

Os testes de prospecção fitoquímica foram realizados em duplicata, seguindo a metodologia descrita por Matos e Matos (1989) para detecção dos seguintes metabolitos: alcalóides, flavonoides, taninos, cumarinas, triterpenos e esteroides,

saponinas e antraquinonas.

## Resultados e Discussão

Na análise de detecção dos metabólitos secundários nas flores de *Tabebuia serratifolia* (FTS) e *Tabebuia impetiginosa* (FTI) foi possível visualizar a presença de alguns metabólitos em foco, como pode-se observar na **Tabela 1**, abaixo:

**Tabela 1** - Metabólitos secundários presentes nas flores de ipês amarelo e roxo.

	FTS	FTI
Antraquinona	+	+
Taninos	+	+
Cumarinas	+	+
Triterpenos e/ou Esteroides	+	+
Chalconas	+	+
Alcaloides	-	-
Saponinas	-	-

Legenda: "+" para presente e "-" para ausente.

Fonte: Próprio autor, (2019).

As análises feitas demonstram que FTS apresentam resultados positivos para antraquinona (SANTOS, 2014); Triterpenos e compostos fenólicos, como flavonoides (BARCELOS *et al*, 2017); Cumarinas e chalconas também foram detectadas nos testes, os quais já foram identificados em outros trabalhos sobre a casca e folhas da planta. Enquanto que demonstraram-se negativos para as flores: alcaloides (SANTOS, 2014) e saponinas (PÓVOAS, 2015).

Os testes feitos com FTI foram positivos para antraquinona, compostos fenólicos (CORDEIRO *et al*, 2006), cumarinas, triterpenos e chalconas. Alcaloides e saponinas não foram detectadas no teste analítico realizado.

## Considerações Finais

Os testes analíticos realizados neste trabalho fazem parte do primeiro passo quando se trabalha sobre alguma espécie de planta. A identificação desses metabólitos aqui apresentados são de extrema importância para se compreender

melhor as propriedades dos ipês amarelo e roxo, por exemplo, os compostos fenólicos que podem estar ligados à atividade antibacteriana e antioxidante.

## Agradecimentos

À Universidade Estadual de Goiás. Ao Programa de Mestrado em Ciências Moleculares. À Fapeg e à Capes pelo auxílio concedido na forma de bolsa de mestrado.

## Referências

BARCELOS I.B.; BULIAN, A. L.; CALAZANS, R. da S. P.; DEGEN, A. N.; ALVES, L. de O.; SOBRAL, F. de O. S.; SALVI, F. de O. Análise fitoquímica e das atividades citotóxica, antioxidante, e antibacteriana das flores de *Tabebuia serratifolia* (Vahl) Nicholson. **Revista fitos**, v. 11, n. 1, p. 1-118, 2017.

BHANDARI, M. R.; KAWABATA, J. Organic acid, phenolic content and antioxidant activity of wild yam (*Dioscorea* spp.) tubers of Nepal. **Food Chemistry**, v. 88, p. 163-168, 2004.

BRASIL. Ministério do Meio Ambiente. **Biodiversidade brasileira**. Disponível em: <<http://www.mma.gov.br/biodiversidade/biodiversidade-brasileira>>. Acesso em: 16 de setembro de 2019.

CORDEIRO, C. H. G.; SACRAMENTO, L. V. S. do; CORRÊA, M. A.; PIZZOLITTO, A. C.; BAUAB, T. M. Análise farmacognóstica e atividade antibacteriana de extratos vegetais empregados em formulação para a higiene bucal. **Revista Brasileira de Ciências Farmacêuticas**, v. 42, n. 3, p. 395- 404, 2006.

FIRMO, W. C. A.; MENEZES, V. J. M.; PASSOS, C. E. C.; DIAS, C. N.; ALVES, L. P. L.; DIAS, L. C. L.; NETO, M. S.; VARGA, I. D .V. Contexto histórico, uso popular e concepção científica sobre plantas medicinais. **Cad. Pesq.**, São Luís, v. 18, n. especial, dez. 2011.



FISCHER, E.; THEISEN, I.; LOHMANN, L.G. Bignoniaceae. *In*: KUBITZKI, K.; KADEREIT, J. W. **The families and genera of vascular plants**. Heidelberg, v. 7, p. 9-98. 2004.

GUERRA, M. P.; NODARI, R. O. Biodiversidade: aspectos biológicos, geográficos, legais e éticos *In*: SIMÕES, C. M. O.; SCHENKEL, E. P.; GOSMAN, G.; MELLO, J. C. P.; MENTZ, L. A.; PETROVICK, P. R. **Farmacognosia: da planta ao medicamento**. 5.ed. Porto Alegre: UFRGS, 2003.

HOSTETTMANN, K.; QUEIROZ, E. F.; VIEIRA, P. C. **Princípios ativos de plantas superiores**, EdUFSCar: São Carlos, 2003.

LEMONS, O. A.; SANCHES, J. C. M.; SILVA, Í. E.F.; SILVA, M. L.A.; VINHÓLIS, A. H.C.; FELIX, M. A.P.; SANTOS, R. A.; CECCHI, A. O. Genotoxic effects of *Tabebuia impetiginosa* (Mart. Ex DC.) Standl. (Lamiales, Bignoniaceae) extract in Wistar rats. **Genet. Mol. Biol.**, São Paulo, v. 35, n. 2, p. 498-502, 2012.

MATOS, J. M.D.; MATOS, M. E. **Farmacognosia**. Fortaleza: UFC, 1989.

PÓVOAS, F. T. X. **Estudo da atividade antimicrobiana e cicatrizante de feridas em ratos utilizando o extrato etanólico de folhas de *Tabebuia aurea* (ipê roxo)**, 100 f. Dissertação (Mestrado em Enfermagem) Universidade Federal de Alagoas, Escola de Enfermagem e Farmácia. Maceió, 2015.

SANTOS, R. F. E. P. dos. **Avaliação do potencial biológico de *Tabebuia aurea* (Silva Manso) Benth e Hook f. ex. S. Moore**. 77f. Dissertação (Mestrado em Enfermagem) – Universidade Federal de Alagoas, Escola de Enfermagem e Farmácia. Maceió, 2014.



## O USO DO POLY PRO NO ENSINO DA GEOMETRIA ESPACIAL

Ana Paula Gonçalves\*<sup>1</sup>. Prof. Dr. José Divino dos Santos<sup>2</sup>

Universidade Estadual de Goiás.

**Resumo** O trabalho aborda concepções gerais sobre a matemática, em específico a geometria espacial no contexto educacional, abordando técnicas como o uso da tecnologia para amenizar o retraimento dos alunos perante a disciplina de exatas. O trabalho ressalta a importância do uso de softwares no processo de ensino aprendizagem da geometria dando ênfase ao shareware Poly Pro, como um recurso metodológico que pode facilitar a compreensão da geometria espacial. Como metodologia será realizada uma pesquisa de campo com aplicação de questionário na Escola Estadual Oscar Campos de Rubiataba; como instrumentos serão elaborados questionários sobre o uso das TICs e a análise dos dados será feita com construção de gráficos no Programa Excel e percentuais simples. Dentre os resultados esperados deseja-se contribuir para uma melhor aprendizagem em geometria espacial e produzir um “cardápio” de softwares, em outras palavras, um manual sobre o uso de softwares para o ensino de matemática para que assim professores e alunos possam ter em mãos mais um recurso didático afim de que a disciplina de matemática não seja tão assustadora para grande número de estudantes e a responsável pelo grande número de reprovação e evasão escolar.

Palavras-chave: Matemática. Softwares. Geometria espacial.

### Introdução

Sabendo que o interesse de grande parte dos alunos pela matemática é insignificante e que esta disciplina gera muita reprovação, torna-se necessário aplicar novas metodologias de ensino e o uso das tecnologias da informática é um recurso que pode trazer bons resultados para amenizar essa situação.

O projeto tem como tema: O uso da TICS no ensino Geometria Espacial. No que diz respeito a metodologias aplicadas na escola Grandó (2000, p. 26) aponta uma questão importante: “A escola necessita estar atenta às necessidades que a sociedade atual coloca. Ela não pode se isolar de todo um processo evolutivo tecnológico que transforma, a cada instante, a realidade sociocultural em que o aluno vive”. Com as inovações tecnológicas existentes cada dia com mais frequência, simultâneo com as dificuldades de transmitir o ensino, a escola precisa

<sup>1</sup> (PG) Mestrado Profissional no Ensino de Ciências, UEG – profmat.anapaula@gmail.com

<sup>2</sup> Professor Orientador Mestrado Profissional Ensino de Ciências.

se adequar ao que a sociedade está impondo, entre eles é a tecnologia, considerada uma tendência educacional.

A aplicação da tecnologia em qualquer área exige capacitação e compreensão de quem manusear, causando dificuldades de interpretação, exigindo uma atenção especial para os métodos a serem empregados na sala de aula, observando o processo utilizado nos dias atuais.

Na tecnologia há uma vasta abordagem, relevância imposta pela sociedade de acordo com a necessidade do dia-a-dia, e se torna cada vez maior o número de pessoas que utilizam. Seu uso pode interferir e ser um auxílio na transferência de conhecimentos matemáticos, possibilitando ao aluno buscar informações facilitando a aquisição de conhecimentos. Exerce a autonomia do educando através dos softwares caracterizando atos de reflexão, pensamento, e resolução de atividades impostas; os alunos adquirem noções do uso dos principais programas e processadores de texto ou gráficos (BRASIL, 1998).

Especificamente analisando as vantagens do computador no contexto educacional, para ser bem sucedida a ação é necessário que o educador saiba utilizar esse recurso, e um dos critérios é a seleção de um bom software educacional.

A definição de *software* está associada a um programa de computador que abrange conteúdos informativos. Os *softwares* não são sólidos, são apenas dados inseridos no computador (FERREIRA, 1988). Poly é um programa shareware para exploração e construção de poliedros.

Por ser considerado um mecanismo de ensino da matemática, pode ser aplicado no estudo da geometria, sendo uma alternativa de compreensão dos alunos na perspectiva sobre o assunto. O computador utilizando os *softwares* educacionais satisfaz aos atributos mencionados nos Parâmetros Curriculares Nacionais (PCNs) (BRASIL, 1998), como sendo um instrumento óptico; pois a geometria está relacionada com desenhos e tal artifício pode ser usado pelos alunos para expandir a compreensão geométrica, fugindo de uma aula tradicional (BRASIL, 1998).

Diante do cenário onde tudo está voltado para as tecnologias e sabendo que



os alunos usam o computador e celular diariamente e ao mesmo tempo, nota-se um desinteresse nas aulas de matemática, principalmente a geometria, torna-se necessário encontrar novas metodologias. Para direcionamento da pesquisa questiona-se: Quais as vantagens em termos de aprendizagem que o software Poly Pro pode trazer para o estudo dos sólidos geométricos?

Com isso, a pesquisa se justifica no fato de que o uso das tecnologias pode ser uma ferramenta que pode ajudar o aluno a assimilar o conteúdo. Dessa maneira, faz-se uma aproximação entre o que é de interesse do aluno (computador) e o conteúdo que será trabalhado.

O objetivo da pesquisa é perceber as tecnologias como um recurso metodológico que facilita a compreensão da geometria; entender esse cenário dicotômico onde aparentemente se tem grandes recursos metodológicos e ao mesmo tempo um baixo rendimento dos alunos; Produzir de um guia sobre o uso de software para o estudo de geometria espacial.

## Material e Métodos

Pesquisa de campo, descritiva e qualitativa que será desenvolvida na Escola Oscar Campos Rubiataba, GO, com alunos do 7º ano do ensino fundamental.

Como instrumentos serão elaborados questionários sobre o uso das TICs e a análise dos dados será feita com construção de gráficos no Programa Excel e percentuais simples. Os resultados serão analisados de forma descritiva e discutidos com os autores usados como referenciais teóricos.

Será elaborado um Guia ou Manual sobre o softwares que contribuem para um melhor desempenho dos alunos no aprendizado de geometria espacial.

## Resultados e Discussão

A pesquisa está em andamento. Já foram aplicados os questionários aos professores e coordenadores e responsáveis pelo laboratório de Informática.

## Considerações Finais

REALIZAÇÃO

PRG  
Pró-Reitoria de  
Graduação

PRP  
Pró-Reitoria de  
Pesquisa e  
Pós-Graduação

PRE  
Pró-Reitoria de  
Extensão, Cultura e  
Assuntos Estudantis





Espera-se ao final deste projeto contribuir para uma melhor aprendizagem em geometria espacial e elaborar um manual sobre softwares, para que professores e alunos possam ter mais um material pedagógico em mãos e assim tentar diminuir o grande número de reprovação e evasão escolar

## Agradecimentos

A todos os professores do Mestrado Profissional no Ensino de Ciências o mais profundo agradecimento. A todos alunos e funcionários da Escola Estadual Oscar Campos minha gratidão.

## Referências

ARAÚJO, W. A.; GOMES, A. M. F. **V Colóquio Internacional “Educação e Contemporaneidade”**. São Cristóvão, SE, set. 2011.

BORBA, Marcelo de Carvalho. O ensino da Matemática e as Mídias Digitais. **Pátio: Revista Pedagógica**. Porto Alegre, ano XV, n. 57, fev./abr. 2011.

BRASIL. Secretaria de Educação Fundamental. **Parâmetros curriculares nacionais (5º a 8º séries): matemática** / Secretaria de Educação Fundamental. – Brasília: MEC/SEF, 1998.

COX, Kenia Kodel. **Informática na Educação Escolar: Polêmicas do nosso tempo**. 2 ed. São Paulo: Autores Associados, 2003.

D’AMBROSIO, Ubiratan. Matemática e cultura. **Pátio: Revista Pedagógica**. Porto Alegre, ano XV, n. 57, fev./abr. 2011.

D’AMBROSIO, Ubiratan. **Transdisciplinaridade**. 3 ed. São Paulo: Palas Athena, 2012.

FAINGUELERNT, Estela Kaufman. A desvalorização do ensino de geometria. **Pátio: Revista Pedagógica**. Porto Alegre, ano XV, n. 57, fev./abr. 2011.

FERREIRA, Aurélio Buarque de Holanda. **Novo Dicionário da Língua Portuguesa**. 2 ed. Rio de Janeiro: Nova Fronteira, 1988.

Freire, Paulo. **Pedagogia da autonomia**. São Paulo: Paz e Terra, 42º reimpressão, 2010.

GLADCHEFF, Ana Paula.; ZUFFI, Edna Maura.; SILVA, Dilma Menezes. **Um instrumento para avaliação de Softwares Educacionais de Matemática para o ensino fundamental**. Revistas. pucsp.br

GRANDO, Regina Célia. **O conhecimento matemático e o uso de Jogos na sala de aula**.

VI Congresso de Ensino, Pesquisa e Extensão da UEG

Ciência e Inovação como perspectivas para o  
Desenvolvimento Social e Sustentável

de 16 a 18/10/2019  
Anápolis



São Paulo: Ed. UNICAMP, 2000.

KAWASAKI, Terezinha Fumi. **Tecnologias na sala de aula de matemática: resistência e mudanças na formação continuada de professores.** UF-MG Belo Horizonte, 2008.

PAIS, Luiz Carlos. **Educação Escolar e as Tecnologias da Informática.** Belo Horizonte: Autêntica, 3ª reimpressão, 2010.

---

REALIZAÇÃO

PRG  
Pró-Reitoria de  
Graduação

PRP  
Pró-Reitoria de  
Pesquisa e  
Pós-Graduação

PRE  
Pró-Reitoria de  
Extensão, Cultura e  
Assuntos Estudantis



Universidade  
Estadual de Goiás

## Resistência mecânica de filmes de carboximetilquitosana em água

\*Túlio Natalino de Matos<sup>1</sup> (PG), Roberta Signini<sup>1</sup> (PQ)

tulio\_mattos23@hotmail.com

<sup>1</sup>Câmpus de Ciências Exatas e Tecnológicas, Universidade Estadual de Goiás, 75132-903 Anápolis - GO, Brasil.

Resumo: A obtenção dos filmes de carboximetilquitosana (CMQ) e manitol, em água consiste no método *casting*. Os filmes são provenientes de diferentes concentrações de CMQ, manitol e variando a massa da solução filmogênica. Os ensaios mecânicos foram realizados apresentando boa resistência a tração quando submetidos a uma força resultando em uma deformação. O filme proveniente de uma maior concentração de quitosana, manitol e maior massa da solução filmogênica apresentou melhores resultados quando submetidos a testes de tração. Os resultados indicam características importantes ao sugerir que os filmes apresentam como uma alternativa promissora para aplicação em liberação controlada de drogas.

Palavras-chave: liberação controlada, filmes, carboximetilquitosana.

### Introdução

A quitosana (QT) é um heteropolímero natural, sendo bastante conhecida por possuir propriedades antimicrobianas devido a agrupamentos amina presentes em sua estrutura (MENDES et al., 2016). Modificações químicas na estrutura da quitosana, tais como a carboximetilação tem sido realizada permitindo a obtenção da carboximetilquitosana (CMQ) que apresenta grandes características como atividades antifúngicas, baixa toxicidade, propriedade de membrana, solubilidade e habilidade de interação com outras substâncias que permite sua aplicação para a liberação de drogas (LIU, 2007 e BLANCO et al., 2013).

Visando melhorar a solubilidade da quitosana, diferentes derivados têm sido preparados e estudados. Há vários estudos em desenvolvimentos englobando a produção de filmes poliméricos para uma série de aplicações, tais como, sistema de entrega de drogas, regeneração de tecido, revestimento e biosensores, bioseparação em diálises dentre outros (ITO et al., 2018). Também chamados de polímeros inteligentes, esses materiais possuem propriedades de liberação de

REALIZAÇÃO

drogas através da membrana porosa em contato com a superfície corporal contemplando uma determinada área aderida estimulada por pequenas alterações de pH e temperatura bem como influência de fluidos fisiológicos (STAMANTIALIS et al., 2008). Nesse contexto este trabalho propõe o uso da Carboximetilquitosana na elaboração de filmes para possível aplicação em liberação de drogas.

## Material e Métodos

Os filmes poliméricos foram desenvolvidos a partir da carboximetilquitosana variando a sua concentração para as análises das propriedades dos filmes e da concentração ideal, objetivando as características desejáveis de um material para aplicação tópica na superfície epitelial como veículo de fármacos nele incorporados. Os filmes foram preparados a base de carboximetilquitosana 1% em água (50mL) e manitol pelo método *casting*. As soluções filmogênicas, foram preparadas utilizando um planejamento fatorial. A solução permaneceu em agitação de 24h e posteriormente verteu-se em uma placa de petri onde permaneceu secando em uma estufa de circulação de ar por mais 24h. Para os ensaios de testes mecânicos, todas as amostras foram preparadas com tamanhos iguais 3 x 6cm isentas de defeitos e levadas em uma prensa hidráulica para tração, em que os filmes foram colocados entre duas garras de borracha deixando cerca de 5cm de filme exposto. Os ensaios de tensão e ruptura basearam-se no método padrão ASTM D882-10. Os filmes foram submetidos a uma aplicação extensional devido a capacidade de uma taxa de deslocamento de 0,2 mm/s utilizando uma célula de carga de 50 Kgf até a ruptura da amostra.

## Resultados e Discussão

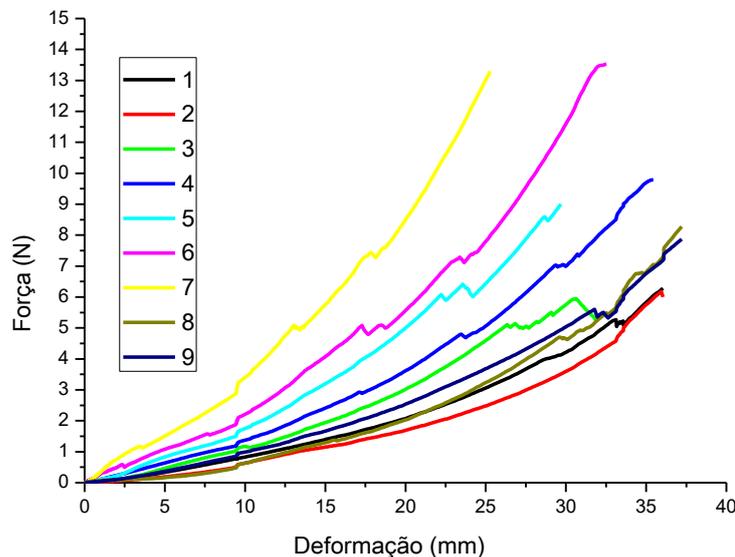
Os filmes foram preparados utilizando um planejamento de acordo com a tabela a seguir:

REALIZAÇÃO

Experimentos	Massa de CMQ (g)	Massa de manitol (g)	Massa do filme (g)
7	1,5	0,1	15
5	1,125	0,15	15
3	0,75	0,2	15
8	1,5	0,15	14
4	1,125	0,1	16
1	0,75	0,1	14
9	1,5	0,2	16
6	1,125	0,2	14
2	0,75	0,15	16

**Tabela 1:** Experimentos e seus respectivos valores de composição do filme.

Ao observar o comportamento das curvas dos filmes obtidos por CMQ (Figura 1) é possível verificar um comportamento semelhante quando submetidos a uma determinada força.



**Figura 1:** Curvas representativas dos filmes obtidos em diferentes concentrações.

Os filmes que possuem uma concentração maior de manitol e uma maior massa, apresentaram maior deformação (filme 2), em contrapartida a deformação foi menor

nos filmes que possuem uma concentração maior de quitosana (filme 7), onde foi observado com relação entre a deformação e a concentração de CMQ a redução da deformação com o aumento do teor de CMQ e menor concentração de manitol. Quanto maior o teor de carboximetilquitosana e manitol na mistura, mais resistente torna o filme, fato também observado por Zivanovic e colaboradores (2007), ao estudar misturas de quitosana com filmes de óxido de polietileno.

A incorporação do manitol nos filmes de CMQ causa alteração na deformação devido ao fato de que o manitol apresenta diversas formas polimórficas ou mistura de polimorfos com materiais sólidos. Isso pode ocasionar mudanças na propriedade do sólido, uma vez que os plastificantes promovem uma redução da friabilidade, melhoram o escoamento e aumentam a tenacidade, tração e resistência ao impacto (COSTA, 2014).

## Considerações Finais

Os filmes compostos à base de CMQ e manitol apresentaram propriedades mecânicas que quando comparadas aos trabalhos disponíveis na literatura indicam sua potencialidade para aplicações em liberação controlada. Assim, foi observado que as propriedades mecânicas dos filmes melhoram quando se adiciona uma maior quantidade de manitol e CMQ em sua composição, isto é, possui uma maior resistência a tração. Tais resultados indicam importantes características e propriedades dos filmes estudados e o uso desses materiais aplicados em liberação controlada uma vez que é necessário a realização de estudos mais avançados

## Agradecimentos

FAPEG, CAPES, CNPQ E UEG

## Referências

BLANCO, A.; GARCIA-ABUÍN, A.; GÓMEZ-DÍAZ, D.; NAVAZA, J. M.

REALIZAÇÃO



**Physicochemical characterization of chitosan derivatives.** Journal of Food, v. 11, p 190-197, 2013.

COSTA, N, B, P. Micropartículas de quitosana estruturadas com aerosil®: estabilidade, adsorção, encapsulação e liberação de substâncias ativas. 2014. 191f. **Tese** (Doutorado Em Engenharia Química) - Centro De Tecnologia, Universidade Federal do Rio Grande do Norte, Natal, 2014.

ITO, T.; TAKAMI.; UCHIDA, Y.; MURAKAMI, Y.; **Chitosan gel sheet containing drug carriers with controllable drug-release properties.** Colloids and Surfaces B: Biointerfaces, v. 163, n. 1, p. 257-265, 2018.

LIU, Y, F.; HUANG, K, L.; PENG D, M.; DING, P.; LI, G, Y. **Preparation and characterization of glutaraldehyde cross-linked O-carboxymethylchitosan microspheres for controlled delivery of pazufloxacin mesilate.** International Journal of Biological Macromolecules, v. 41, n. 1, p. 87-93, 2007.

MENDES, L.D.; BRESOLIN, J.D.; ASSIS, O.B.G.; BRITTO, D. **avaliação in vitro da ação da quitosana e de seu derivado quaternizado na inibição do crescimento do fungo penicillium expansum.** Revista Brasileira de Engenharia de Biosistemas, v.10, n.1, p.116-128, 2016.

STAMATIALIS, D. F.; PAPPENBURG, B. J.; GIRONÉS, M.; SAIFUL, S.; BETTAHALLI, S. N. M.; SCHMITMEIER, S.; WESSLING, M. **Medical applications of membranes: Drug delivery, artificial organs and tissue engineering.** Journal of Membrane Science, v. 308, p 1-34, 2008.

ZIVANOVIC, S.; JI, J.; DAVIDSON, M.; KIT, K.; **Propriedades físicas, mecânicas e antibacterianas de filmes de mistura de quitosana/PEO.** Bio Macromoleculas, v. 8, n. 5, p. 1505-1510, 2007.

## Síntese de novos fosforamidatos: Importantes intermediários reacionais para obtenções de compostos com atividades biológicas.

Thallita S. D. Mascarenhas<sup>1</sup>(PG)\*, William P. de Macedo<sup>1</sup>(PQ).

Laboratório de Química Orgânica, Universidade Estadual de Goiás, Anápolis – Goiás.

\*e-mail: thallitasamantha@hotmail.com

Resumo: Os fosforamidatos representam uma classe de compostos que tem sido bastante estudada nos últimos anos devido sua ampla aplicação no que se diz respeito a atividades biológicas. Os fosforamidatos são derivados do ácido fosforamídico e a literatura traz resultados satisfatórios quanto suas atividades, como antitumoral, antimicrobiana, antiviral, antiurease, entre outras. As bases de schiff pertencem a outro grupo que também se comporta como agentes biológicos, e sua união com outros grupos com atividade biológica pode gerar compostos com alto potencial biológico. Os fosforamidatos deste trabalho foram obtidos a partir da reação de monofosforilação da fenilenodiamina com o fosfito de dibutila em sistema bifásico sólido-líquido, empregando-se hexacloroetano (catalisador), carbonato de potássio (base), brometo de tetrabutilamônio (promotor de transferência de fase) e diclorometano. A metodologia aplicada desenvolveu produtos sólidos com rendimentos que variaram entre 40% e 50%. As análises de espectroscopia no infravermelho e ressonância magnética nuclear de <sup>1</sup>H, <sup>13</sup>C e <sup>31</sup>P confirmaram as obtenções dos derivados monofosforilados da o-, m-, e p-fenilenodiamina. Os fosforamidatos irão passar por testes biológicos para avaliação das suas atividades através de parceria com grupos de pesquisas de interesses em comuns. A metodologia de união entre os fosforamidatos e bases de schiff está em andamento, uma vez em posse, testes biológicos também serão realizados.

Palavras-chave: Fosforamidatos. Agentes Biológicos. Atividades Biológicas. Ácido Fosforamídico.

### Introdução

Importantes descobertas foram feitas em relação à função biológica do elemento fósforo (descoberto em 1669). O advento da metodologia sintética adequada, juntamente com os avanços da ciência analítica, acelerou a pesquisa tanto no isolamento quanto no *design* de compostos orgânicos e organometálicos com aplicações cada vez mais diversificadas (OLIVEIRA, 2014). As propriedades químicas inerentes do elemento fósforo incluem polarizabilidade, eletronegatividade baixa a

REALIZAÇÃO

PRG  
Pró-Reitoria de  
Graduação

PRP  
Pró-Reitoria de  
Pesquisa e  
Pós-Graduação

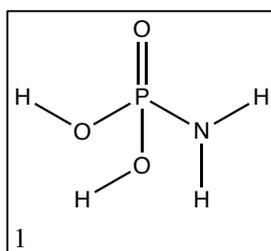
PRE  
Pró-Reitoria de  
Extensão, Cultura e  
Assuntos Estudantis

Universidade  
Estadual de Goiás

média e os derivados exibem baixos números de coordenação, permitindo assim a síntese de uma gama diversificada de compostos. Em consonância com as suas propriedades físico-químicas, os compostos de fósforo têm aplicações industriais generalizadas e também demonstram uma gama diversificada de atividades biológicas (SANTOS *et al.*, 2007).

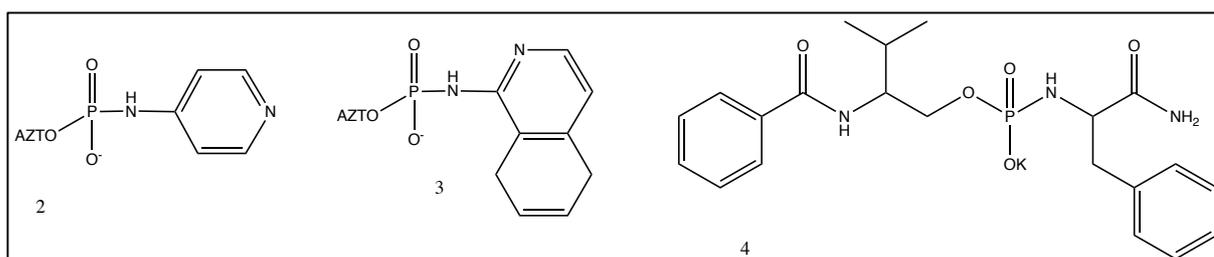
Os fosforamidatos consistem em compostos que possuem pelo menos um grupo amino ligado diretamente ao átomo de fósforo e são, portanto, derivados do ácido fosforamídico (Figura 1) (OLIVEIRA, 2014).

**Figura 1** – Estrutura do ácido fosforamídico



Estudos em relação à atividade biológica dos fosforamidatos comprovam a atividade de tal compostos em várias áreas. Dentre estas incluem atividade antitumoral (KLECZEWSKA *et al.*, 2019), antimicrobiana (REDDY *et al.*, 2018), antiurease (FALLAH *et al.*, 2018), antiviral (SLUSARCZYK *et al.* 2018) e antimalárica (OLIVEIRA, 2014).

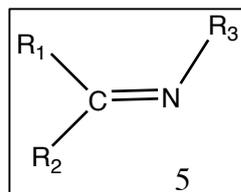
**Figura 2** – Fosforamidatos com atividade antiviral (2 e 3) e antitumoral (4)



Junto a isso, as bases de schiff também têm demonstrado importância terapêutica com uma ampla gama de atividades biológicas, incluindo propriedades antibacteriana (SILVA *et al.*, 2011), antifúngica (WEI *et al.*, 2019), antitumoral (NEELIMA *et al.*, 2015), anti-inflamatória (RAKESH *et al.*, 2015), antioxidante (RAKESH *et al.*, 2015) e antimalárica (JARRAHPOUR *et al.*, 2015). A característica

estrutural comum destes compostos é a presença do grupo azometina com fórmula geral  $R_1R_2C=N-R_3$ , em que  $R_3$  é um grupo alquila, arila ou ainda grupos heterocíclicos (Figura 3).

**Figura 3** – Estrutura geral de bases de schiff

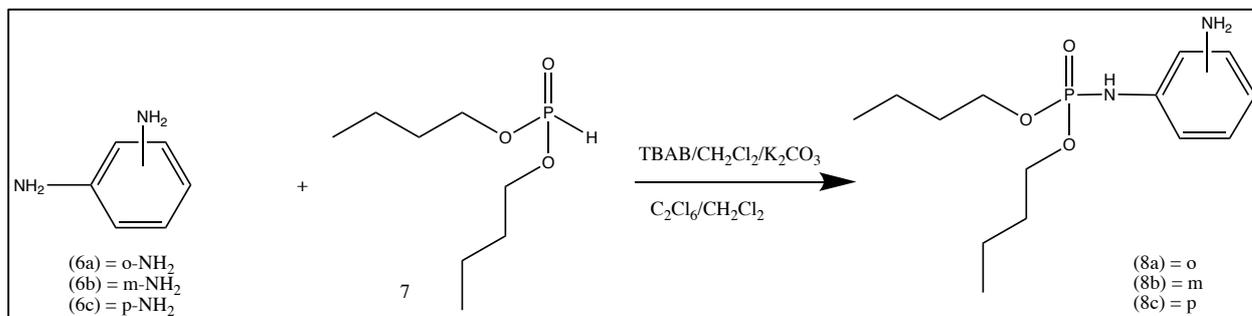


Visto as diversas aplicações dos fosforamidatos e bases de schiff, este trabalho é dedicado à obtenção de uma série de novos fosforamidatos candidatos à atividade biológica como intermediários para a síntese de fosforamidatos derivados de bases de schiff.

## Material e Métodos

A estratégia sintética proposta para a obtenção dos fosforamidatos está representada no esquema 1.

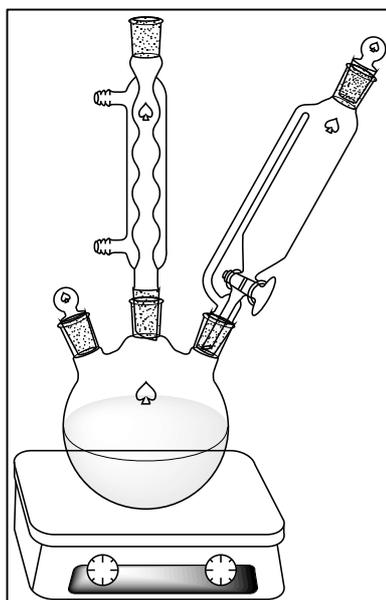
**Esquema 1** – Rota proposta para obtenção dos compostos 7a-c.



Em diferentes balões de fundo redondo contendo separadamente o-, m- e p-phenylenodiamina (**6a-c**) (0,020 mol; 2,16 g), carbonato de potássio (0,022 mol; 3,0 g), brometo de tetrabutilamônio (0,062 mmol; 0,02 g) e diclorometano (5 mL) sob agitação, adicionou-se lentamente, com auxílio de um funil de adição, uma solução contendo fosfito de dibutila (0,010 mol; 1,95 mL) e hexafluoroetano (0,015 mol; 3,55 g) em diclorometano (10 mL) (Esquema 2).

### REALIZAÇÃO

## Esquema 2 – Sistema reacional



O tempo de adição é de cerca de 10 minutos. Após a adição ser concluída a agitação é mantida por 1 hora em banho de gelo e depois por mais 23 horas à temperatura ambiente, até consumo total do fosfito de dibutila. Após isto, a mistura deve ser filtrada em papel de filtro. O filtrado é transferido para um funil de separação e lavado com ácido clorídrico 0,2% (5 x 10 mL) e água (1 x 10 mL). Utiliza-se sulfato de sódio anidro para secar a fase orgânica e logo depois a solução é filtrada. O solvente é removido em evaporador rotatório e adiciona-se cerca de 60 mL de éter de petróleo que deve ser mantido em agitação por 24 horas. Ao final, filtra-se, obtendo desta forma um produto sólido.

## Resultados e Discussão

Cada reagente possui uma contribuição específica para a obtenção dos produtos. O hexacloroetano atua como catalisador, já o carbonato de potássio atua como base, e o brometo de tetrabutilamônio é um promotor de transferência de fase para o carbonato de potássio, visto que o mesmo é um composto inorgânico e deve permanecer na fase orgânica para sua atuação como base.

### REALIZAÇÃO

A mistura deve ser filtrada para a remoção o carbonato de potássio e o cloreto de potássio que são gerados na reação e não são de interesse, desta forma, é possível isolar a fase orgânica.

O processo de lavagem com ácido clorídrico é essencial para remover a diamina que está em excesso. Com a presença do ácido, a diamina é protonada e passa da fase orgânica para a fase aquosa, um processo importante na etapa de isolamento reacional. Por fim, a fase orgânica também deve ser tratada com água, para a remoção de resíduos inorgânicos que não são de interesse. Após isto, deve-se secar a fase orgânica com sulfato de magnésio anidro para a remoção de qualquer resíduo aquoso. O solvente (diclorometano) deve ser totalmente removido com a utilização de evaporador rotatório, pois é importante que não haja vestígios de solvente para a etapa de isolamento ser bem-sucedida.

A utilização de éter de petróleo se faz necessária para a importante etapa final de recristalização dos sólidos. Por fim, produtos sólidos brancos e puros são obtidos com rendimentos razoáveis.

Pelas análises preliminares, a partir dos espectros de absorção no IV do fosfito de dibutila e dos produtos obtidos, não se observou a banda de estiramento em cerca de  $2427\text{ cm}^{-1}$  referente à ligação P-H da forma pentavalente do fosfito de dibutila, o que confirma o consumo deste material de partida. As bandas de estiramento das ligações P=O e bandas de deformação de P-O-C do grupo fosforila, típico do composto organofosforado esperado, puderam ser identificadas entre as regiões de  $500$  e  $4.500\text{ cm}^{-1}$  (Tabela 1).

**Tabela 1** – Absorções no IV entre  $500$  e  $4.500\text{ cm}^{-1}$  e rendimentos.

Composto	$\nu$ NH	$\nu$ P=O	$\delta$ P-O-C	$\nu$ P-N	Rendimento
8 <sup>a</sup>	3378, 3223 $\text{cm}^{-1}$	1206 $\text{cm}^{-1}$	990 $\text{cm}^{-1}$	745 $\text{cm}^{-1}$	44%
8b	3376, 3216 $\text{cm}^{-1}$	1204 $\text{cm}^{-1}$	981 $\text{cm}^{-1}$	756 $\text{cm}^{-1}$	41%
8c	3371, 3211 $\text{cm}^{-1}$	1205 $\text{cm}^{-1}$	991 $\text{cm}^{-1}$	739 $\text{cm}^{-1}$	48%

REALIZAÇÃO



Visto isto, é possível concluir que a metodologia aplicada foi capaz de desenvolver produtos com rendimentos razoáveis.

## Considerações Finais

A aplicação da metodologia proposta foi capaz de gerar os fosforamidatos, intermediários reacionais desejados, que passarão por análise quanto à sua atividade biológica. A metodologia da síntese de fosforamidatos derivados de bases de schiff está em andamento, e futuramente também serão avaliados quanto ao seu potencial biológico, por parceria com grupos de pesquisas afins.

## Agradecimentos

À CAPES, ao CNPq, ao programa de Mestrado em Ciências Moleculares, e à Universidade Estadual de Goiás.

## Referências

FALLAH, N; GHOLIVAND, K.; YOUSEFI, M.; AZAR, P. Synthesis, spectroscopic characterization, anti-urease activities of a novel bisphosphoramidate, a combined experimental and computational study. **Journal of Molecular Structure**, 2018.

JARRAHPOUR, A., SHIRVANI, P., SHARGHI, H., ABERI, M., SINOUE, V., LATOUR, C. AND BRUNEL, J.M. "Synthesis of novel mono-and bis-Schiff bases of morpholine derivatives and the investigation of their antimalarial and antiproliferative activities." **Medicinal Chemistry Research** 24, no. 12, 2015.

KLECZEWSKA, N. RUSZKOWSKI, P.; SINGH, A.; TRZNADEL, R.; CELEWICZ, L. Synthesis and anticancer activity of 3' -[4-fluoroaryl-(1,2,3-triazol-1-yl)]-3' -deoxythymidine analogs and their phosphoramidates. **Journal Nucleosides, Nucleotides and Nucleic Acids**, 2019.

NEELIMA; POONIA, K.; SIDDIQUI, S.; ARSHAD, M.; KUMAR, D. In vitro anticancer activities of Schiff base and its lanthanum complex. **Spectrochimica Acta**, 2015.

REALIZAÇÃO

PRG  
Pró-Reitoria de  
Graduação

PRP  
Pró-Reitoria de  
Pesquisa e  
Pós-Graduação

PRE  
Pró-Reitoria de  
Extensão, Cultura e  
Assuntos Estudantis





OLIVEIRA, F. & BARBOSA, L. C., & ISMAIL, F. V.. The Diverse Pharmacology and Medicinal Chemistry of Phosphoramidates - A Review. **RSC Advances**, 2014.

RAKESH, K.P., MANUKUMAR, H.M. AND GOWDA, D.C. Schiff's bases of quinazolinone derivatives: synthesis and SAR studies of a novel series of potential anti-inflammatory and antioxidants. **Bioorganic & medicinal chemistry letters**, 2015.

REDDY, S.; RAO, D.; MADHU, K.; SUBRAMANYAM, C.; KUMARI, P.; RAJU, C. Microwave assisted synthesis and Anti-microbial activity of new Diethyl ((dialkoxyphosphoryl) (2-hydroxyphenyl) methyl) phosphoramidates. **Journal Phosphorus, Sulfur, and Silicon and the Related Elements**, 2018.

SANTOS, V. M. R., DONNICI, C. L., DACOSTA, J. B. N., AND. CAIXEIRO, J. M. R **Quim. Nova**, 2007.

SILVA, C. M.; DA SILVA, D. L.; MODOLO, L. V.; ALVES, R. B.; DE RESENDE, M. A.; MARTINS, C. V. B.; FÁTIMA, A. Schiff bases: a short review of their antimicrobial activities. **Journal of Advanced Research**. v. 2, n. 1, p. 1-8, 2011.

SLUSARCZYC, M.; SERPI M.; PERTUSATI, F. Phosphoramidates and phosphoramidates (ProTides) with antiviral activity. **Journal Sage Antiviral Chemistry and Chemotherapy**, 2018.

WEI L, TAN W, ZHANG J, MI Y, DONG F, LI Q, GUO Z. Synthesis, Characterization, and Antifungal Activity of Schiff Bases of Inulin Bearing Pyridine ring. **Polymers**. 2019.

REALIZAÇÃO

PRG  
Pró-Reitoria de  
Graduação

PRP  
Pró-Reitoria de  
Pesquisa e  
Pós-Graduação

PRE  
Pró-Reitoria de  
Extensão, Cultura e  
Assuntos Estudantis



Universidade  
Estadual de Goiás

## Síntese do enol éter via $\alpha$ -selenilação de dicetona

Yara Cecilia Monteiro Oliveira (PG)\*, Maísa Borges Costa (PQ), yaracmoqi@gmail.com.

Universidade Estadual de Goiás - Campus de Ciências Exatas e Tecnológicas. BR 153, N°3105  
Fazenda Barreiro do Meio- Campus Henrique Santillo- Anápolis. Caixa Postal 459, CEP 75132400.

Os enóis éteres são derivados reativos de aldeídos e cetonas, vistos como sendo importantes intermediários reacionais. Eles são de ocorrência natural, sendo tanto estes como os sintéticos com amplo espectro de ação antifúngico. Costa e colaboradores (2018) desenvolveram uma provável rota de síntese para a obtenção do intermediário enol éter. Nascimento e colaboradores (2016) produziram tal intermediário via reação de  $\alpha$ -selenilação, reações importantes na geração de intermediários  $\alpha$ -funcionalizados. Sendo assim, o objetivo do presente estudo vislumbra a síntese do intermediário enol éter **1**, por meio da dicetona selenilada **5**. A partir da metodologia de Costa e colaboradores (2018), foi evidenciado a formação da dicetona **4**. A partir da dicetona **4** obtida, foram empregadas três diferentes metodologias para sua  $\alpha$ -selenilação, sendo elas descritas por Miyoshi (1982), Ge e Wei (2012) e Reich e colaboradores (1975), as quais se encontram em processo de análise e caracterização, para em seguida ser possível a aplicação na síntese final do enol éter **1**. Propôs-se a provável formação da dicetona selenilada **5**, a partir da semelhança em um dos spots presentes nas análises em cromatografia em camada delgada (CCD) realizadas, com  $R_f = 0,52$ .

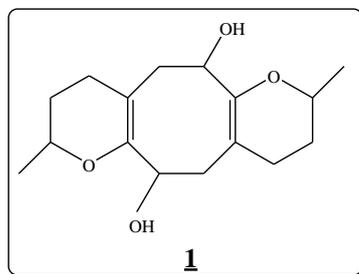
Palavras-chave: Enol éter. Selenilação.  $\alpha$ -funcionalizado. Dicetona. Dicetona selenilada.

### Introdução

Visto como sendo importantes intermediários reacionais, os enóis éteres ou vinil éteres são compostos orgânicos normalmente utilizados para designar derivados O-alkil da forma enolizada de compostos carbonílicos, como aldeídos e cetonas (PARK, et al., 2000).

Costa e colaboradores (2018), desenvolveram uma provável rota de síntese para a obtenção final do macrolídeo pirenoforina, a partir do intermediário enol éter **1** (Figura 1). Nascimento e colaboradores (2016) produziram tal intermediário via reação de  $\alpha$ -selenilação empregando LDA a  $-78^\circ\text{C}$  e micro-ondas com iodo metálico e DMSO.

**Figura 1-** Representação estrutural do intermediário enol éter de acordo com Costa e colaboradores (2018).



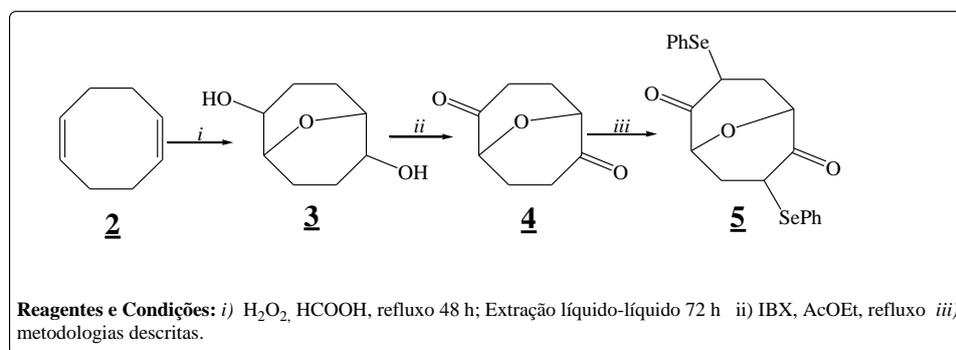
As reações de  $\alpha$ -selenilação são reações importantes na geração de intermediários  $\alpha$ -funcionalizados, que podem vir a serem utilizados posteriormente em outras reações (PIOVAN, 2007).

Portanto, o objetivo do presente estudo é a obtenção final do intermediário enol éter **1** a partir da dicetona selenilada **5**, a qual será obtida via reações de  $\alpha$ -selenilação de três diferentes metodologias sintéticas já descritas na literatura.

## Material e Métodos

A metodologia utilizada se baseou, inicialmente no preparo do diol (9-oxabicyclo-[3.3.1]-2,6-nonadiol) **3**, que foi obtido por meio da oxidação do 1,5-ciclo-octadieno **2**, seguido de recristalização em acetato de etila. Em seguida, o mesmo foi oxidado via a utilização de IBX (ácido 2-iodoxibenzóico) para produzir a dicetona **4** (Esquema 1), a qual foi sintetizada pela metodologia proposta por Costa e colaboradores (2018).

**Esquema 1-** Sequência reacional para formação da dicetona selenilada **5**.



Fonte: NASCIMENTO, et al., 2016.

### REALIZAÇÃO

A dicetona foi submetida a reações de  $\alpha$ -selenilação para a produção da dicetona selenilada **5**. A  $\alpha$ -selenilação de cetonas pode ser realizada por um amplo espectro de metodologias. Para este estudo foram empregadas três diferentes metodologias, sendo elas:

**Procedimento de  $\alpha$ -selenilação com  $\text{SeO}_2$  e  $\text{H}_2\text{SO}_4$ , de acordo com Miyoshi (1982):** A uma suspensão de dicetona **3** (0,31g; 2 mmol) previamente solubilizada em DCM (2 mL), foi adicionada uma suspensão de PhSeSePh (0,38g; 1,2mmol),  $\text{SeO}_2$  (0,072g; 1,2mmol) e  $\text{H}_2\text{SO}_4$  (0,00016mL; 0,96mmol) previamente solubilizados em DCM (12mL). A mistura foi deixada sob agitação por 10hrs, a  $10^\circ\text{C}$ . A reação foi acompanhada por cromatografia em camada delgada (CCD) (Hex: AcOEt 50%). A reação foi então submetida a extração com éter etílico (50mL) e solução saturada de  $\text{NaHCO}_3$  (2x20mL).

**Procedimento de  $\alpha$ -selenilação com  $\text{I}_2$  e DMSO, de acordo com Ge e Wei (2012):** A uma suspensão de dicetona **3** (0,62g; 4 mmol) previamente solubilizada em AcOEt (4 mL), foram adicionados PhSeSePh (1,25g; 4mmol) previamente solubilizado em AcOEt (6mL), DMSO (1,70mL; 24mmol) e  $\text{I}_2$  (0,10g; 5%mol). A mistura foi deixada sob agitação e aquecimento a  $73^\circ\text{C}$ , por 24hrs. A reação foi acompanhada por CCD (Hex: AcOEt 50%). A reação foi então submetida à extração com solução de bissulfito de sódio 10%, até eliminação completa de  $\text{I}_2$ .

**Procedimento de  $\alpha$ -selenilação com LDA e PhSeBr, de acordo com Reich e colaboradores (1975):** A uma suspensão de diisopropilamida de lítio (LDA) (1,66 mmol) em THF (20 mL) a  $-78^\circ\text{C}$  foi adicionada a dicetona **3** (0,154g; 1 mmol) previamente solubilizada em THF (2 mL). A mistura foi deixada sob agitação por 15 minutos. Em seguida, foi adicionado gota a gota e rapidamente PhSeBr (3,33mmol) previamente solubilizado em THF (2 mL). A reação foi deixada sob agitação por 15 minutos e em seguida extraída com  $\text{H}_2\text{O}$  (2x40mL), solução saturada de  $\text{NaHCO}_3$  (2x40mL) e solução saturada de  $\text{NaCl}$  (2x40mL).

## Resultados e Discussão

O diol **2** foi obtido de uma mistura isomérica, por várias recristalizações em acetato de etila, com um rendimento de aproximadamente 78%. Ele foi caracterizado pelo seu ponto de fusão 122-124°C, de acordo com dados na (COSTA, et al., 2018). A dicetona **3** foi obtida via oxidação com IBX. Obteve-se um sólido amarelado, com rendimento de 91%, o qual foi caracterizado pelo seu ponto de fusão 54-55°C, de acordo com dados na literatura (COSTA, et al., 2018).

A dicetona **3** foi submetida a três diferentes tipos de reação de  $\alpha$ -selenilação. Os resultados são descritos na Tabela 1.

**Tabela 1-** Condições e resultados das metodologias utilizadas para obter a dicetona selenilada **4**.

Matéria-prima	Condições	Metodologia	Resultados
Dicetona <b>3</b>	SeO <sub>2</sub> + H <sub>2</sub> SO <sub>4</sub>	Miyoshi	Não ocorrência de reação
Dicetona <b>3</b>	I <sub>2</sub> + DMSO	Ge e Wei	0,90%
Dicetona <b>3</b>	LDA +PhSeBr	Reich e colaboradores	20%

As metodologias de Ge e Wei (2012) e Reich e colaboradores (1975) apresentaram spots semelhantes nas análises feitas em CCD após o término de cada reação, com um  $R_f = 0,52$ , diferenciando da mancha de PhSeSePh ( $R_f = 0,66$ ) e da dicetona ( $R_f = 0,40$ ), o que torna possível julgar a possível formação do produto esperado **5**.

## Considerações Finais e Perspectivas

A semelhança das análises em CCD apresentadas, torna possível julgar a ocorrência da reação e a provável formação da dicetona selenilada **5**, porém as análises espectrométricas do produto em questão ainda estão em andamento, para conseguinte, prosseguir com a síntese do enol éter **1**.

## Agradecimentos

Agradecimentos a UEG-CCET, e a CAPES, pois o presente trabalho foi realizado com apoio da Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior - Brasil (CAPES) - Código de Financiamento 001

## Referências

COSTA, M. B.; MARTINS, M. P.; ARAÚJO, H. C.; RESCKB, I. S. Synthesis and expansion of bicyclic enol ether: A probable precursor for the synthesis of macrolide ( $\pm$ )-Pyrenophorin. **Journal of the Brazilian Chemical Society**, v. 29, n. 1, p. 74-78, 2018.

GE, W.; WEI, Y. Iodine-catalyzed Oxidative System for 3-sulfenylation of Indoles with Disulfides Using DMSO as Oxidant Under Ambient Conditions in Dimethyl Carbonate. **Green Chemistry**, v. 14, n. 7, p. 2066-2070, 2012.

NASCIMANETO, G. R. N.; COSTA, M. B.; SANTOS, G. S. Síntese de Enóis Éteres via Reações de Selenilação. 39ª RASBQ, 2016.

MIYOSHI, N.; YAMAMOTO, T.; KAMBE, N.; MURAI, S.; SONODA, N. A Convenient Method for the Synthesis of  $\alpha$ -phenylselenyl Carbonyl Compounds. **Tetrahedron Letters**, v. 23, n. 46, p. 4816-4816, 1982.

PARK, H.; KIM, D.; YOO, M.; PARK, M.; JEW, S. Practical Regioselective Synthetic Method for (E)-enol ether. **Tetrahedron Letters**, v. 41, p. 4579-4582, 2000.

PIOVAN, L. Biotransformação de compostos funcionalizados por fungos basidiomicetos e desmetilação/desalquilação de amins terciárias por fungos *Aspergillus terreus*. São Paulo: USP, 2007, 143p. Dissertação (Mestrado em química), Universidade de São Paulo, 2007.

REICH, H. J.; RENGA, J. M.; REICH, I. L. Organoselenium Chemistry of Ketones to Enones by Selenoxide Syn Elimination. **Journal of the American Chemical Society**, v. 97, n. 19, p. 5434-5447, 1975.

## UMA NOVA PERSPECTIVA DA CARACTERIZAÇÃO DOS ESTADOS EXCITADOS DO ÁCIDO ASCÓRBICO: ANÁLISE DE *CHARGE-TRANSFERY*.

Yago F. Lopes\* (PG), Allane C. C. Rodrigues (PG)<sup>2,3</sup>, Lillian T. F. de Melo Cardoso (PG)<sup>2,3</sup> e Ademir J. Camargo (PQ)<sup>4\*</sup>.

E-mail: yagolopes-f@hotmail.com

<sup>a</sup>*Grupo de Química Teórica e Estrutural de Anápolis, Ciências Exatas e Tecnológicas. Universidade Estadual de Goiás, CP 459, 75001-970 Anápolis, GO Brasil.*

A vitamina C é um nutriente essencial para o ser humano, sendo fundamental em diversos processos bioquímicos. Entre as suas propriedades, tem-se atividades antioxidantes e fotoquímicas que auxiliam o organismo a neutralizar os radicais livres. Nas últimas décadas, houve aumento significativo nos números de pesquisas sobre as propriedades fotoquímicas da vitamina C. Este aumento se deve a sua importância na atividade protetora contra radiação UV. A partir dessas características tem se desenvolvido vários produtos como fotoestabilizadores, cosméticos e protetores solares. Devido à sua grande relevância fotobioquímica, esse trabalho realizou estudos teóricos sistemáticos dos estados excitados da vitamina C utilizando a Teoria do funcional da densidade dependente do tempo (TD-DFT). A partir dos resultados obtidos observou-se que em 50 % dos estados excitados analisados tem comportamento do Ácido Ascórbico (AA) tem comportamento de *charge-transfery* e 50 % tem comportamento de *local-transfery*, os resultados teóricos obtidos até agora corroboram para que o AA pode ter aplicações tecnológicas.

Palavras-chave: Vitamina C, Fotobioquímica, Radiação UV, TD-DFT.

### Introdução

A palavra vitamina é derivada da combinação das palavras: vital e amina, criada pelo químico polonês Casimir Funk em 1912. As vitaminas são fundamentais para que o organismo possa manter-se saudável, uma vez que a deficiência da mesma pode ocasionar graves transtornos para os seres humanos (BURRESON, LE COUTEUR, 2011).

Um grave problema ocasionado pela carência da vitamina C foi relato no século XV, no qual várias tripulações foram dizimadas por uma doença denominada escorbuto cujo causam exaustões, fraquezas, equimoses, perda dos dentes, afecções do pulmão e do fígado, e em seu estágio agudo leva a morte por infecção

geral, pneumonia e parada cardíaca (BARRITA; SÁNCHEZ, 2013).

Uma das particularidades importantes do Ácido Ascórbico (AA) é a propriedade fotobioquímica, visto que ela possui atividade foto protetora à radiação UV, além de ter grande potencial em aplicações tecnológicas relacionadas a foto estabilizadores, cosméticos, protetores solares e em células solares orgânicas (OPV'S). Entretanto, não está claro pelos quais motivos essas propriedades fotobioquímicas do AA influenciam nestes processos a nível quântico (BARRITA; SÁNCHEZ, 2013).

Algumas dessas particularidades do AA são de suma importância principalmente as de *charge-transfer* para a OPV'S, que a partir dessas propriedades pode-se converter energia elétrica através de energia solar, no entanto um dos problemas das OPV'S tem sido sua eficiência. Os métodos teóricos podem ser de grande importância neste processo de otimização, uma vez que com a caracterização dos estados excitados envolvidos no processo podem fornecer informações valiosas que podem otimizar o processo e assim trazer uma maior eficiência nas OPV'S (MORA; MELENDEZ, 1998).

Até o presente momento, todos os estudos teóricos nesta área se basearam em cálculos de análises conformacionais, distribuição de densidade de spin, dinâmica molecular *Ab initio* em solução aquosa e gasosa, dinâmica molecular Car-Parrinello em solução aquosa e de cálculos de Teoria do funcional da densidade dependente do tempo (TD-DFT) na fase gasosa e líquida apenas para o primeiro estado excitado (BARROSO, 2012) (DABBAGH et al., 2014) (BERG, 2015).

No entanto, não existem trabalhos aos quais exploram uma ampla faixa dos estados excitados do AA, além de não se encontrar trabalhos que caracterizam os respectivos estados excitados do AA. Este trabalho, tem o intuito de fornecer uma análise minuciosa dos estados excitados do AA além de trazer uma abordagem sistemática sobre a caracterização dos seus respectivos estados excitados baseado em métodos já consolidados na literatura que a partir da função de onda podem contribuir para uma melhor compreensão dos processos de excitações.

## Material e Métodos

As energias de excitação vertical dos estados eletrônicos do AA foram calculadas pelo método TD-DFT com o funcional CAM-B3LYP com a função de base cc-pVTZ. Foram considerados os 10 primeiros estados excitados no seu estado singlete e todos os cálculos realizados foram realizados na fase gasosa. Os cálculos de TD-DFT foram realizados pelo programa Gaussian 09. As análises de transferências de cargas e caracterização dos estados excitados foram obtidas com o auxílio do programa Multiwfn Version 3.7. Todas as representações moleculares são produzidas com a versão 1.8.7 do VMD.

## Resultados e Discussão

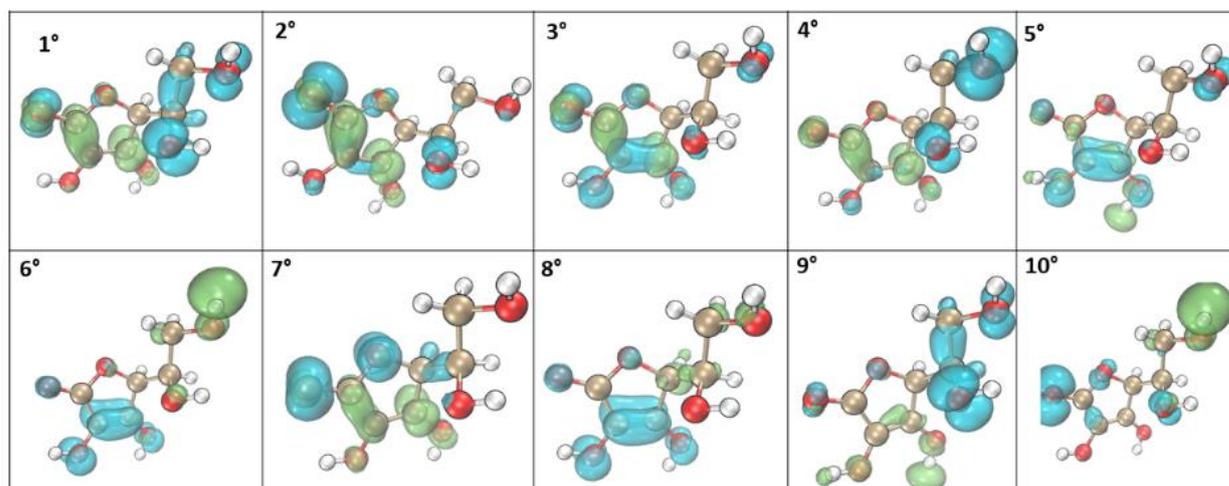
Os estados excitados foram caracterizados a partir do valor de  $\Delta r$ , que nos dá uma predição do deslocamento da densidade eletrônica da molécula no respectivo estado excitado, visto que quanto maior o valor de  $\Delta r$  maior será a transferência de carga.

Tabela 1: Valores de  $\Delta r$  (Å) para os respectivos estados excitados.

Estado excitado	1°	2°	3°	4°	5°	6°	7°	8°	9°	10°
$\Delta r$ (Å)	1,38	1,66	1,34	3,53	1,31	4,57	1,75	3,18	2,72	3,01

Observa-se na Tabela 1 acima que os maiores valores de  $\Delta r$  são observados para os estados 4°, 6°, 8°, 9° e 10°, assim para os respectivos estados excitados podem ser caracterizados com a natureza de *charge-transfer*. Nos estados excitados 1°, 2°, 3°, 8° e 7° podem ser caracterizados como uma natureza de *local-transfer* visto que o  $\Delta r$  foi pequeno, na Figura 1 abaixo será demonstrado uma representação visual que pode corroborar para as análises das naturezas dos estados excitados e assim colaborando de uma forma clara e sucinta para a análise da deslocalização da densidade eletrônica na molécula de AA.

Figura 1: Hole-Electron dos Estados excitados da Vitamina C.



Observa-se que na Figura 1 uma representação visual da deslocalização de carga, em azul está representado de onde o elétron saiu chamado de ( *Hole* ) e em verde para onde o elétron foi chamado de ( *eletron* ), a partir disso pode-se observar que nos 4°,6°,8°,9° e 10° estados excitados são da natureza de *charge-transfer* visto que ocorre uma deslocalização da densidade eletrônica para as extremidades da molécula do AA, já para os 1°,2°,3°,8° e 7° observa-se que a excitação é localizada predominantemente em apenas um local da molécula, assim sendo caracteriza como uma natureza de *local-transfer*.

### Considerações Finais

O trabalho efetuado até o presente momento, demonstra os resultados iniciais, porém os resultados obtidos são promissores e abre um horizonte para estudos dos estados excitados da vitamina C, visto que em 50% dos estados excitados foram de natureza de *charge-transfer* e os outros 50 % foram de natureza de *local-transfer*. A perspectiva deste trabalho é encontrar uma aplicação tecnológica dos estados excitados da Vitamina C baseado nas propriedades encontradas por este presente trabalho.

REALIZAÇÃO

## Agradecimentos

Os autores agradecem o apoio da CAPES. Esta pesquisa é apoiada pelo Centro de Computação de Alto Desempenho da Universidade Estadual de Goiás (UEG).

## Referências

BARROSO, E. D. **Estudo do Efeito da Solvatação Aquosa sobre os parâmetros geométricos do Ácido L-Ascórbico usando a Dinâmica Molecular de CAR-PARRINELLO**. Programa De Pós-graduação Stricto Sensu em Ciências Moleculares, v. 1, p. 68, 2012.

BERG, R. W. **Investigation of L (+)-ascorbic acid with raman spectroscopy in visible and UV light**. Applied Spectroscopy Reviews, v. 50, n. 3, p. 193–239, 2015.

DABBAGH, H. A.; AZAMI, F.; FARROKHPOUR, H.; CHERMAHINI, A. N. **UV-VIS, NMR and FT-IR spectra of tautomers of vitamin C. experimental and DFT calculations**. Journal of the Chilean Chemical Society, v. 59, n. 3, p. 2588–2594, 2014.

FUNK, C. **Dossiê Vitaminas**. Food Ingredients Brasil, v. 29, p. 58–88, 2014.

MORA, M. .; MELENDEZ, F. . **Conformational ab initio study of ascorbic acid**. Journal of Molecular Structure: THEOCHEM, v. 454, n. 2–3, p. 175–185, 1998

LE COUTEUR, Penny; BURRESON, Jay. **Os botões de Napoleão: as 17 moléculas que mudaram a história**. Trad. Maria Luiza X. de A. Borges. Rio de Janeiro: Jorge Zahar Ed., 2006. 343 p. ISBN: 978-85-7110924-7.