
Recebido em: 04/12/2019, Aceito em: 21/12/2019, Publicado em: 21/01/2020.

DOI: <http://dx.doi.org/10.22407/1984-5693.2020.v12.p.1-23>

**RESUMOS DOS TRABALHOS
APRESENTADOS NA V JORNADA DE
QUÍMICA - CURSO DE BACHARELADO
EM QUÍMICA DO IFRJ *CAMPUS*
NILÓPOLIS**

2019

EXTRATOS ALCOÓLICOS DE CÚRCUMA APLICADOS AO DESENVOLVIMENTO DE UMA FORMULAÇÃO COSMÉTICA FOTOPROTETORA.

Maria Emanuelle Damazio Lima; Priscilla Henriques Groetaers De Souza Novelli, Ana Maria Pereira da Silva;

Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia do Rio de Janeiro, *campus* Nilópolis.

A exposição excessiva e desprotegida a radiações solares é a principal causa de diversas mazelas, como queimaduras, fotoenvelhecimento e câncer de pele. Portanto, independentemente de raça e etnia, é recomendado, pela Agência Nacional de Vigilância Sanitária, que se utilize fotoprotetor. Os protetores solares são formulações cosméticas, que visam a proteção da pele contra as radiações UVA e UVB. Para que os fotoprotetores sejam capazes de absorver ou refletir as radiações ultravioletas, a eles são incorporados os filtros solares, os quais podem ser físicos (inorgânicos) ou químicos (orgânicos). Atualmente há vários estudos sobre filtros oriundos de produtos naturais. Vários extratos vegetais e/ou substâncias naturais isoladas têm demonstrado um efeito potencializador quando associados a filtros sintéticos. Neste contexto, os curcuminóides, compostos polifenólicos presentes na *Curcuma longa*, surgem como promissores candidatos a filtros UV naturais e multifuncionais devido a ações antioxidante, antimicrobiana e anti-inflamatória. No presente trabalho foram realizadas extrações alcoólicas dos rizomas de *Curcuma longa* L, através de percolação e maceração. Os extratos resultantes foram analisados em termos quantitativos e qualitativos para curcuminóides totais e quanto ao teor de curcumina, a fim de selecioná-los para posterior incorporação em uma formulação fotoprotetora. O extrato que apresentou melhores resultados foi obtido através de maceração (0,274% p/p de curcuminóides totais e 0,98 mg/mL de curcumina). Após a incorporação do extrato à formulação fotoprotetora, houve aumento da ação fotoprotetora, (FPS: 17,33, Taxa UVA/UVB: 0,545, Comprimento de onda crítico: 340 nm) em comparação a uma formulação fotoprotetora padrão contendo apenas filtros químicos sintéticos (FPS: 15,10, Taxa UVA/UVB: 0,517, Comprimento de onda crítico: 337 nm). Os resultados mostram que o extrato de cúrcuma obtido foi capaz de potencializar a absorção da radiação UVB e ainda acrescentou uma proteção contra o UVA longo, região de difícil alcance por parte dos filtros sintéticos convencionais. Mais estudos devem ser realizados a fim de verificar a estabilidade e segurança das formulações desenvolvidas.

Palavras-chave: fotoprotetor, cúrcuma, extrato.

ESTUDO ESTATÍSTICO DA INFLUÊNCIA DOS ÍONS Na^{1+} E Mg^{2+} NA ESTABILIDADE TÉRMICA DA HPAM

Jonas F. Santos¹, Izabel Cristina V. M. dos Santos², Allan S. da Silva², Priscila F. Oliveira²,
Claudia R. E. Mansur²

¹Laboratório de Macromoléculas e Coloides na Indústria de Petróleo (LMCP)/Instituto de Macromoléculas (IMA)/Universidade Federal do Rio de Janeiro (UFRJ)²; Programa de Engenharia Metalúrgica e de Materiais (PEMM)/COPPE, Universidade Federal do Rio de Janeiro (UFRJ)

Polímeros viscosificantes são usados nos processos químicos de recuperação avançada de petróleo (cEOR). Tendo como expoente e de larga aplicação a poli(acrilamida) parcialmente hidrolisada (HPAM), polímero sintético de massa molar na ordem de 10^6 Da, com grande eficiência de varrido. Este polímero, contudo, apresenta sensibilidade à degradação térmica ($T > 60$ °C) e química (na presença de radicais $\text{O}\cdot$), ocasionando o fechamento de cadeia por ação de cátions divalentes presentes na água de formação do reservatório. Cátions mono e divalentes, como Na^+ , Mg^{2+} e Ca^{2+} , afetam a estabilidade química do polímero por efeito de blindagem das cargas negativas (*shielding*), reduzindo a viscosidade deste fluido de injeção. O objetivo deste trabalho foi avaliar a degradação térmica da HPAM em salmouras contendo cátions Na^+ e Mg^{2+} , em diferentes composições, avaliando seus efeitos sobre a viscosidade das soluções poliméricas. Para tanto, soluções poliméricas de 2500 mg/L de HPAM (M_w de 20×10^6 Da) foram preparadas em salmouras dentro de uma *glove box*, para garantir baixa concentração de O_2 , a fim de reproduzir condições de reservatório. Estes sistemas foram levados à estufa a 70 °C e sua avaliação ocorreu nos tempos 0 e 30 dias, por delineamento composto central rotacional (DCCR), com três fatores e três repetições do ponto central. Para fins comparativos, foram produzidos controles da ação individual de cada cátion na concentração de 500 mg/L e do efeito da ação térmica sobre a HPAM, na ausência de salinidade. A degradação térmica do polímero foi acompanhada por ensaios reológicos em reômetro Mars 60, Haake, onde foram obtidas curvas de fluxo em taxa fixa de cisalhamento fixa de 7 s^{-1} . Observou-se, no tempo 0, que o íon Mg^{2+} apresentou maior influência na redução da viscosidade da solução, em comparação ao íon Na^+ . Porém, após 30 dias, a presença do íon Mg^{2+} foi menos significativa na redução da viscosidade inicial (perda de 18,4%), porém percebe-se o efeito do íon sódio quando combinado em concentrações iguais a este, atenuando o efeito do íon Mg^{2+} sobre a redução da viscosidade inicial do meio (perda de 7,0%), em relação ao controle (13,3%). Assim, indicando que o íon Na^+ tem ação atenuante a ação negativa do divalente, sob a viscosidade do meio.

Palavras-chave: viscosidade; HPAM; DCCR

Agência de fomento: CNPq

COMO AGEM OS REAGENTES UTILIZADOS NOS TESTES HISTOQUÍMICOS DE MATÉRIAS-PRIMAS VEGETAIS: CLORETO FÉRRICO E ÁCIDO TÂNICO

SILVA, T. A. da; MARÇAL, L. L.; MARQUES, C. A.

Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia do Rio de Janeiro, *campus Nilópolis*

A partir de testes histoquímicos, abordados em Microscopia de Alimentos, tornou-se possível a observação da presença de grupos cromóforos, após a adição de determinados reagentes que ao longo das pesquisas foram intitulados: corantes. Sabe-se que a similaridade existente entre metabólitos secundários é de fundamental importância para estudos relacionados à quimiotaxonomia e etnofarmacologia, que determinam os processos evolutivos convergentes e/ou divergentes, além de permitirem a descoberta de novos fármacos e/ou novas rotas para síntese de substâncias bioativas. O conhecimento químico do comportamento de metabólitos em respectivos reagentes (corantes) é de extrema importância uma vez que as informações fornecidas pela literatura muitas vezes são escassas e a grande maioria das pesquisas são direcionadas para determinadas espécies, que em sua família contenha produtos/metabólitos desejados em abundância, sem ponderações quanto à influência de outros compostos minoritários, mas significativamente importantes. Dentre compostos relevantes e de ocorrência restrita, utilizados como marcadores, destacam-se alcalóides, aminoácidos não protéicos, poliacetilenos, iridóides e compostos fenólicos (flavonóides e taninos hidrolisáveis). O objetivo foi avaliar quimicamente a ação dos corantes utilizados em microscopia de alimentos (ácido tânico 5% e cloreto férrico 3%) e propor uma justificativa química para suas respectivas ações sob substâncias específicas. O estudo foi dividido em avaliações histoquímicas e químicas. Histoquimicamente realizou-se testes para identificar metabólitos característicos em determinadas espécies, acompanhados por meio de testes positivos, realizados em microscopia eletrônica nas amostras: *Musa spp.* (banana), utilizando cloreto férrico para a identificação de taninos e *Aloe vera L.* (babosa), utilizando ácido tânico/cloreto férrico para a identificação da mucilagem. Complementarmente, utilizou-se Lugol/ácido sulfúrico para a identificação da celulose, em *Allium cepa* (cebola), visando confirmar hipóteses sugeridas. Quimicamente propuseram-se testes de bancada para uma melhor compreensão de como ocorrem às reações ou interações *corante-metabólito*. Utilizou-se classes de substâncias semelhantes as esperadas nas espécies vegetais estudadas. As substâncias foram submetidas ao mesmo procedimento realizado nos testes histoquímicos (respeitando tempo e concentração dos corantes) e comparou-se o comportamento das respostas químicas *substância-corante* com as histoquímicas *metabólito-corante*. Foram feitas análises de cromatografia em camada fina (CCF), infravermelho (IV) e ponto de fusão (pf) dos sólidos obtidos. Para todos os resultados foi proposto uma teoria de ação. Algumas confrontaram teorias da literatura, como as análises realizadas na *Aloe vera L.*, onde observou-se, frente ao ácido tânico, a possível presença de glicoproteínas, enquanto a literatura descreve apenas a identificação desta em “mucilagem animal”, enquanto em mucilagens de origem vegetal relata-se a composição de uma mistura água/polissacarídeos, este praticamente puro. É importante mencionar que a literatura não apresenta um estudo químico fundamentado, apenas hipóteses a partir de observações histoquímicas. Neste trabalho, outras constatações puderam ser propostas e um estudo interessante sobre a possível química que ocorre entre *corantes-metabólitos* foi desenvolvido. Metodologias simples e resultados inovadores foram obtidos. O estudo realizado é uma grande contribuição para um maior entendimento do uso de corantes em espécies vegetais nos estudos histoquímicos. As perspectivas do projeto são o aprofundamento das investigações para os corantes até então estudados, e ampliar para outros potenciais corantes.

Palavras-chave: corantes, histoquímica, alimentos.

CRANBERRY (*VACCINIUM MACROCARPON* AITON – ERICACEAE): UMA ABORDAGEM FARMACOGNÓSTICA PRELIMINAR

SIMÕES, Thaíse Reis¹; MARQUES, Carlos Alexandre¹.

¹Laboratório de Microscopia. Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia, *campus* Nilópolis.

Vaccinium macrocarpon (Ericaceae) é uma espécie reconhecida pela ação contra bactérias do trato urinário. O fruto se tornou muito conhecido no Brasil, principalmente na culinária, onde se encontram produtos diversos. Devido à escassez de informações sobre caracteres diagnósticos buscou-se, neste trabalho, descrever padrões morfológicos e micromorfológicos, além de detectar os metabólitos secundários característicos desta espécie, a fim de identificar possíveis adulterações em produtos à base de *cranberry*. Para a caracterização anatômica, foi feita montagem de lâminas e identificação morfológica em microscópios estereoscópico, óptico e eletrônico de varredura. Os testes histoquímicos foram realizados após cortes à mão livre ou ao micrótomo de Ranvier, para detectar rapidamente a presença ou ausência de metabólitos em células e tecidos com a utilização de reagentes específicos. O teste colorimétrico foi realizado após a obtenção de extratos hidroalcoólicos, através da utilização de reagentes específicos para taninos condensados, antocianinas e antocianidinas. Também foram analisadas, sob microscópio fotônico, cápsulas de *cranberry*, comercializadas em lojas de produtos naturais, a fim de avaliar sua autenticidade, comparando-as com o padrão anteriormente descrito. O fruto é uma baga tetracarpelar, com mais de uma semente por lóculo. O epicarpo, delgado, possui células isodiamétricas bem pigmentadas, de paredes retas e conteúdo evidenciado por gotículas dispersas nos citoplasmas. O mesocarpo suculento é composto por células globosas que armazenam substâncias fenólicas que reagem positivamente ao teste com FeCl₃, o que também ocorre no epicarpo. Os feixes vasculares colaterais abertos ocorrem em todo o mesocarpo, ramificando-se em direção ao epicarpo e ao endocarpo. O endocarpo possui uma camada de células alongadas de aspecto predominantemente fusiforme, tendendo ao aspecto hexagonal, com paredes retas. Nessas regiões, podem ser encontrados alguns raros estômatos. As pequenas sementes, presentes em número variável, não formam caroços e possuem testa ornamentada, cujas paredes destacam-se pelo seu alto-relevo, com formato que se assemelha ao das braquiesclereídes. O fruto possui a presença de lipídeos que formam sua cutícula. As substâncias fenólicas encontram-se distribuídas pelas células de todo o pericarpo. Os elementos de vaso, no mesocarpo, reagiram positivamente para presença de lignina. O extrato hidroalcoólico obtido reagiu positivamente para a presença de taninos condensados no teste colorimétrico, apresentando um precipitado verde que o caracteriza. Este resultado corrobora com a possível presença de proantocianidinas que são os marcadores químicos dessa espécie. *V. macrocarpon* apresentou um conjunto de características morfológicas que podem ser determinantes em sua diagnose, permitindo a detecção de possíveis adulterações em seus produtos. Os testes histoquímicos proporcionaram rápida detecção (preliminar) de metabólitos presentes no fruto. Através dos testes colorimétricos, foram obtidas informações rápidas acerca da presença dos marcadores químicos. A análise microscópica do produto comercial (cápsulas) apresentou resultado semelhante ao padrão, porém, a fim de que fosse confirmada sua autenticidade, foi necessária a realização do teste colorimétrico, que apresentou resultado positivo para taninos condensados, evidenciado pela formação do precipitado verde, e também para antocianinas e antocianidinas, através da aparição da coloração azul-púrpura em pH básico. Com os resultados obtidos no material-padrão, foi possível realizar a análise de um produto comercial para verificação da sua autenticidade.

Palavras-chave: *Cranberry*; *Vaccinium macrocarpon*; farmacognosia.

INFLUÊNCIA DO DILUENTE NA SÍNTESE DE COPOLÍMEROS MAGNETIZADOS DE ESTIRENO-DIVINILBENZENO

Gabriela Soares Macello Ramos, Ayla Bastos Araujo, Matheus de Souza Lima Mendes, Márcia Angélica F.S. Neves, Marcelo Sierpe Pedrosa.
Instituto Federal do Rio de Janeiro (IFRJ), *campus Nilópolis*

A obtenção de copolímeros de estireno-divinilbenzeno já vem sendo bastante estudada e é confirmado que o diluente afeta diretamente a porosidade do material polimérico. Recentemente, resinas de estireno-divinilbenzeno com propriedades magnéticas vêm despertando um grande interesse nas áreas de pesquisa e desenvolvimento de materiais com grande potencial de aplicação em ciências ambientais para a retirada de impurezas de locais contaminados, sem contar a ampla aplicação em biotecnologia, engenharia biomédica e medicina como no isolamento de células, imobilização de enzimas, diagnóstico e biologia molecular, entre outras aplicações. A incorporação de nanopartículas superparamagnéticas na matriz polimérica confere a este material um grande diferencial em relação às outras aplicações deste copolímero, tendo em vista que devido a sua magnetização podem ser retiradas através da indução de um campo magnético externo, o que facilita a retirada da resina do seu meio de aplicação. Tendo como objetivo o estudo sobre a influência do diluente na incorporação do material magnético, foi realizado neste trabalho a síntese das resinas magnetizadas de estireno-divinilbenzeno pela técnica de polimerização em suspensão. Inicialmente foi preparado o material magnético, maghemita, por hidrólise alcalina e tratamento termo-oxidativo. Em seguida, foi feita a síntese das microesferas poliméricas com a incorporação do material magnético. A fase orgânica constituída pelos monômeros, estireno e divinilbenzeno, pelo iniciador, peróxido de benzoíla a 1% molar em relação aos monômeros, pelo diluente, tolueno ou heptano, e o material magnético, foi previamente preparada e adicionada ao reator Atlas sodium, da marca Syrris e mantida sob agitação mecânica a 50° C por 30 minutos. Em seguida, foi adicionado a fase aquosa, contendo poli(álcool vinílico) a 0,5% m/v, e foi iniciada a polimerização em suspensão a 70 °C por 24 horas a 300 rpm. As resinas obtidas foram purificadas e avaliadas pela análise de degradação térmica por TGA e análise morfológica pelo MEV. O comportamento magnético do material foi avaliado através da construção de curvas de histerese obtidas pela análise de VSM. Analisando os resultados, foi observado que a temperatura de degradação dos copolímeros não foi afetada pelo tipo de diluente. As micrografias obtidas mostram que a resina sintetizada com tolueno apresentou mais material magnético em sua superfície quando comparada com a resina obtida na presença de heptano. Tal resultado é confirmado por VSM que apresenta um maior valor de magnetização de saturação.

Palavras-chave: resinas poliméricas, magnetização, diluente.

TRATAMENTO DE EFLUENTES EM UM REATOR FOTOQUÍMICO (UTILIZANDO O MÉTODO FOTO-FENTON) E DE ADSORÇÃO

Gabriel Magalhães de Alcântara, Thayná Silva de Oliveira,
Ana Paula Santos.

Instituto Federal do Rio de Janeiro *campus* Nilópolis

Recentemente, a contaminação de corpos hídricos (águas superficiais, subterrâneas, mananciais, etc.) por compostos farmacologicamente ativos, pelo lançamento de efluentes e esgoto sem tratamento, apresenta-se como um problema ambiental em todo mundo. Tais compostos quando presentes no ambiente interagem com a biota do meio interferindo significativamente na fisiologia, no metabolismo e no comportamento das espécies, podendo ocasionar severos danos ao organismo humano e aos demais seres vivos. Segundo a EPA (*Environmental Protection Agency*), contaminantes emergentes são substâncias oriundas da atividade antropogênica que podem afetar a saúde humana e ao meio ambiente por mecanismos ainda não conhecidos. Fármacos, produtos de higiene pessoal, hormônios, produtos químicos industriais, pesticidas, quando presentes no ambiente como poluentes são classificados como contaminantes emergentes. Este trabalho teve como objetivo a construção de um sistema-modelo de fotodegradação/ adsorção, utilizando um indicador ácido-base como marcador, a fim de avaliar a eficiência no tratamento de efluentes líquidos. Os Processos Oxidativos Avançados (POA's) se caracterizam por transformar a maioria dos contaminantes orgânicos em CO₂, água e ânions inorgânicos, por meio de reações de degradação que envolvem espécies oxidantes, principalmente os radicais livres hidroxila (HO•). Entre os diferentes tipos de POA's usados no tratamento de efluentes podemos citar aqueles que utilizam o reagente Fenton (H₂O₂/Fe²⁺) combinado a radiação ultravioleta (processo foto-Fenton). Tais processos podem ser classificados em homogêneos ou heterogêneos, e utilizar ou não a radiação UV (proveniente da luz solar ou de lâmpadas específicas). Neste trabalho foi utilizada uma lâmpada de baixa pressão de vapor de mercúrio (T5 UV, 8 Watts, 254 nm) sendo a solução de corante introduzida no fotoreator por uma bomba peristáltica (Gilson MiniPuls 3). Como resultados preliminares dos ensaios realizados foi possível verificar a degradação do alaranjado de metila à 4,67 ppm para 3,27 ppm (aproximadamente 30,05% de degradação), enquanto que por meio do Foto-Fenton obteve concentração final de 1,08 ppm (aproximadamente 76,96%) em apenas 10 minutos de tratamento. Estes resultados foram obtidos após avaliar a proporção de maior eficiência entre o marcador, o peróxido de hidrogênio e o íon ferroso que confere a melhor eficiência na reação, sendo encontrada a proporção de 1:7:2, respectivamente.

Palavras-chave: processos oxidativos avançados; reator foto-Fenton; adsorção.

Agência de fomento: Coordenação de Pesquisa e Inovação – IFRJ *campus* Nilópolis

AVALIAÇÃO DO TEOR DE FENÓLICOS EM AMACIS PELO MÉTODO DE FOLIN-CIOCALTEAU

Ana Carolina Voigt; Ana Paula Santos
Instituto Federal do Rio de Janeiro *campus* Nilópolis

Historicamente, o conhecimento empírico sobre a utilização de plantas como tratamento terapêutico alternativo pela população foi um importante precursor na descoberta de novos fármacos. A abordagem etnofarmacológica continua sendo um método eficiente no estudo de potenciais agentes terapêuticos vegetais no desenvolvimento de variados fármacos. Nas religiões de matriz Africana do Brasil, plantas medicinais (conhecidas genericamente por ‘ervas’) são usadas em diferentes rituais ou também no preparo de alimentos e incensos. São atribuídas diversas ações terapêuticas aos metabólitos secundários presentes nestas plantas, com destaque para a classe dos compostos fenólicos e, entre as quais podemos citar a atividade antitumoral, anti-inflamatória e antioxidante. Entre as espécies vegetais mais utilizadas tanto nos rituais religiosos quanto na culinária destacam-se o alecrim (*Rosmarinus officinalis* L.), a guiné (*Petiveria alliaceae* L.) e a alfavaca (*Ocimum gratissimum* L.). Tais plantas são conhecidas por possuir terpenos, flavonoides, alcaloides, entre outros como seus constituintes químicos principais. A atividade antioxidante é atribuída a presença de ácido rosmarínico, ácido cafeico, 1,8-cineol, cânfora e α -pineno. Neste trabalho foi quantificado o teor de fenólicos totais, pelo método de Folin-Ciocalteu, em ‘amacis’ (uma espécie de extrato aquoso obtido a frio) obtidos a partir de algumas espécies vegetais selecionadas. O material vegetal foi obtido em feiras-livres, em comerciantes chamados de ‘erveiros’ e usados de forma fresca no preparo dos amacis, sendo fragmentados em água manualmente. As frações de fenólicos foram obtidas por tratamento do extrato por SPE (*Solid Phase Extraction*, chromabond PP C18 EC, 6 mL). Os teores de fenólicos totais foram determinados em equivalentes de ácido gálico, em gramas (g de EAG), por 100g de material vegetal. Os valores obtidos variaram de 0,4 a 0,44 g EAG/ 100g. Os resultados obtidos reforçam a importância do estudo das plantas medicinais usadas em rituais das religiões afro-brasileiras de modo a associar o conhecimento acadêmico ao uso tradicional.

Palavras-chave: compostos fenólicos, atividade antioxidante, etnofarmacologia, religiões Afro-Brasileiras.

SÍNTESE DE NOVOS DERIVADOS DE SUCCINIMIDAS POLICÍCLICAS N-SUBSTITUÍDAS VIA REAÇÃO DE DIELS-ALDER COM POTENCIAL ANTIFÚNGICO

¹Bragueroli, H. S.; ¹Marçal, L. L.

¹Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia do Rio de Janeiro, *campus Nilópolis*

As infecções invasivas causadas por fungos do gênero *Cândida* sp têm apresentado um aumento significativo, onde micoses podem vir a afetar o pulmão, se disseminar e envolver o cérebro, meninges, pele, rins e outros órgãos. O *Cândida albicans* é o fungo patogênico que causa a candidíase, doença que gera intensa coceira e vermelhidão nos órgãos genitais, podendo afetar também a pele, sangue, unhas com sintomas variados. No combate as doenças fúngicas investiga-se várias alternativas para a obtenção de novos fármacos potencialmente ativos, provenientes diretamente de produtos naturais e/ou obtidos por síntese orgânica. Um importante representante dos produtos naturais é o Eugenol, com atividade antifúngica já relatada. Já no âmbito sintético destacam-se os derivados de imidas cíclicas, como as succinimidas, que podem ser obtidas de formas clássicas: via adição à insaturação olefínica no anel maleimídico ou formas alternativas: via reações do tipo hétero-Diels-Alder. Com isso, este trabalho visou sintetizar novos derivados de succinimidas policíclicas N-substituídas via reação hétero-Diels-Alder. Para obter as succinimidas policíclicas de interesse foram abordadas duas rotas sintéticas distintas para cada vertente explorada (A: utilização de cicloexenona como dieno e B: utilização de isoeugenol como dieno). *Vertente A – rota 1*: síntese inicial de maleimidas N-substituídas através do acoplamento de amins primárias e anidrido maleico, seguida da condensação Diels-Alder com cicloexenona; *vertente A – rota 2*: condensação Diels-Alder de cicloexenona com o anidrido maleico, via formação de um anidrido policíclico intermediário, seguido do acoplamento de amins primárias. Ambas as rotas abordadas na *vertente A* geraram reações com formação de muitos subprodutos de difícil purificação por isso foi desenvolvido a exploração da *vertente B*. Na *vertente B* foi proposto o uso de isoeugenol, previamente isomerizado a partir do eugenol. *Vertente B – rota 1*: condensação Diels-Alder entre o isoeugenol e o anidrido maleico produzindo o anidrido policíclico intermediário, seguido do acoplamento de uma amina primária que conduziria a succinimida final de interesse; *vertente B – rota 2*: acoplamento de uma amina primária ao anidrido maleico, produzindo uma maleimida N-substituída intermediária, sequencialmente utilizada como dienófilo na reação Diels-Alder frente ao isoeugenol, objetivando a succinimida final. As duas rotas desenvolvidas na *vertente B*, conduziram a resultados inesperados. Obteve-se a partir da isomerização do eugenol um derivado de isoeugenol di-hidroxilado (73%), que foi utilizado como dieno nas duas rotas. A *rota 1* conduziu a formação de uma maleimida policíclica (via intermediário anidrido policíclico que foi obtido com *rendimento quantitativo*) e a *rota 2* conduziu a formação da maleimida policíclica. Ambos produtos finais foram obtidos a partir da aromatização total do sistema poli-succinimídico formado *in situ*. Os produtos policíclicos finais obtidos, mesmo não correspondendo aos produtos inicialmente planejados, representam um resultado interessante de um importante estudo metodológico e promissor, devido à ocorrência da aromatização total do sistema policíclico em condições atípicas. As perspectivas para o trabalho são continuar as explorações metodológicas, visando avaliar os rendimentos isolados e diminuir os tempos reacionais, investigar a obtenção de novos derivados inéditos e, por fim, investigar possíveis atividades biológicas (antifúngicas e outras).

Palavras-chave: succinimidas; Diels-Alder; imidas cíclicas

Agência de fomento: CNPq e IFRJ

RETENÇÃO DE ÍONS COBRE E CHUMBO NA CASCA DE COCO TRATADA

Carla da Silva Afonso de Almeida, Márcia Angélica Fernandes e Silva Neves
Instituto Federal do Rio de Janeiro (IFRJ), *campus Nilópolis*

Com o crescimento populacional e pós-revolução industrial, onde a produção de uma variedade de produtos aumentou, ocorreu também o aumento da geração de resíduos, que afetam o ecossistema como um todo. A água é essencial para a vida humana e sua contaminação por elementos físicos, químicos ou biológicos pode ter um efeito nocivo as plantas, atividade humana e organismos, sendo de suma importância evitar sua poluição. Essa água é utilizada também pelas indústrias em seu processo de várias maneiras, sendo elas: incorporação ao produto; lavagens de máquinas; águas utilizadas diretamente nas etapas do processo; entre outros. E podem ser contaminadas por resíduos do processo industrial (exceto pelo volume de águas incorporada aos produtos e pelas perdas por evaporação), originando assim os efluentes líquidos contaminados, como por exemplo com metais pesados. Esses metais pesados causam efeitos cumulativos que podem levar anos para serem sentidos, como os íons metálicos cobre e chumbo que são muito perigosos devido sua toxicidade que uma vez atingindo a natureza, atinge diretamente os seres humanos que usufruem. Atualmente, existem muitos métodos para a descontaminação das águas, porém uma das alternativas de tratamento para efluentes que apresenta o melhor custo-benefício é a bioissorção por possuir um baixo custo e uma grande disponibilidade do material biológico, como por exemplo a casca de coco verde que devido ao alto consumo de água de coco, principalmente no nordeste brasileiro, são geradas toneladas de casca. O presente trabalho teve como objetivo a retenção de íons Pb (II) e Cu (II) na casca de coco, estudando duas diferentes faixas granulométricas: 18-42 mesh e 42-80 mesh e avaliando dois diferentes tratamentos da casca de coco. Duas diferentes faixas granulométricas da casca de coco foram pré-tratadas, separadamente, com solução de NaOH $0,1 \text{ mol.L}^{-1}$ e água, em um erlenmeyer de 250mL, por 3 horas em shaker a temperatura ambiente. Em seguida, foi pesada uma massa de casca de coco tratada, para as duas diferentes faixas granulométricas, e essa massa foi colocada em contato, sob agitação em shaker durante 3 horas, com um volume de solução padrão contendo os íons metálicos (Pb^{2+} e Cu^{2+}). Foi avaliado se o tamanho de partícula e o pré-tratamento influenciaram na capacidade de adsorção dos íons metálicos. As amostras foram analisadas por espectrometria de absorção atômica do tipo chama. Observou-se que o tamanho de partícula não teve uma influência significativa no processo, sendo então escolhida a faixa de 18-42 mesh, já que é a faixa mais abundante e o pré-tratamento mais efetivo na remoção dos íons cobre (II) e chumbo (II) foi com NaOH $0,1 \text{ mol.L}^{-1}$.

Palavras-chave: bioissorção; metais pesados; casca de coco.

Agência de fomento: Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq)

PROCESSAMENTO DA SEMENTE DE AÇAÍ (*EUTERPE OLERACEA* MARTIUS): CARACTERIZAÇÃO DOS METABÓLITOS FENÓLICOS E SUA ATIVIDADE ANTIOXIDANTE

Felipe Rafael Lopes do Amaral, Gabriel Rocha Martins, Ayla Sant'Ana da Silva.
Instituto Nacional de Tecnologia

O açaí é fruto da palmeira *Euterpe oleracea* Mart., tipicamente brasileiro e nativo da região amazônica. As sementes de açaí são anualmente produzidas em grandes quantidades como resíduo da produção de polpa de açaí, atingindo 1,1 milhões de toneladas somente no ano de 2017. Apesar disso, a semente é uma matriz rica em substâncias fenólicas e pode ser uma fonte interessante de substâncias bioativas. Por se tratar de um resíduo amplamente produzido, as sementes de *Euterpe oleracea* tornam-se um objeto de estudo muito interessante do ponto de vista econômico, uma vez que o seu subaproveitamento leva a um grande prejuízo ambiental e econômico à cadeia produtiva de açaí. Métodos colorimétricos na região do UV-Vis podem ser ferramentas úteis para auxiliar na quantificação destes fenólicos e na atividade antioxidante, com a vantagem de serem métodos mais baratos, mais rápidos e de fácil execução. Nesse contexto, o atual estudo avaliou metodologias estabelecidas na literatura de quantificação de fenólicos e de atividade antioxidante de extratos vegetais. Os métodos analíticos selecionados para este estudo foram: (i) de Folin-Ciocalteu, para determinação de fenólicos totais; (ii) por ABTS (2,2'-azino-bis (3-etilbenzotiazolina)) 6-ácido sulfônico, (iii) por DPPH (2,2-difenil-1-picril-hidrazila) e (iv) por ORAC (Capacidade de Absorção dos Radicais Oxigenados), para a determinação da ação antioxidante. Nesse sentido, os dados gerados foram comparados com padrões analíticos comerciais e padrões internos do laboratório como extratos de polpa de açaí e de bagaço de uva. De posse dos resultados, observa-se a correlação entre os dados, indicando que, majoritariamente, os metabólitos fenólicos são encontrados na parte maciça da semente. Além do comparativo com padrões analíticos, os valores de atividade antioxidante, e de concentração de fenólicos totais mostram-se promissores com elevado potencial antioxidante, atingindo valores superiores à polpa de açaí e ao bagaço da uva. Com o tratamento sistemático de quantificação realizado foi possível elucidar etapas do processamento das sementes de açaí.

Palavras-chave: semente de açaí; metabólitos fenólicos; atividade antioxidante.

Agência de fomento: CNPq e Instituto Serrapilheira.

COMPOSTOS FENÓLICOS LIVRES E LIGADOS EM INHAME (*Dioscorea spp.*) IN NATURA, COZIDO E CASCA

Tayan Ceciliano de Oliveira Azeredo e Suellen Gomes

Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia do Rio de Janeiro, *campus* Nilópolis

O inhame (*Dioscorea spp.*) é um tubérculo que é de fácil cultivo e armazenamento, é cultivado em grande escala nas regiões subtropicais. Nos últimos anos o inhame tem sido fonte de diversas pesquisas, pois o consumo deste tubérculo está relacionado com o fortalecimento do sistema imunológico. Em regiões onde houve o aumento dos casos de dengue e chikungunya, a população tem consumido o inhame tanto após cocção com a finalidade de repelir o mosquito transmissor destas doenças, bem como devido os efeitos benéficos descritos popularmente que sua ingestão tem proporcionado, amenizando os sintomas destas doenças. Essa ação benéfica do inhame pode estar relacionada aos compostos fenólicos e terpenos, presente neste tubérculo, pois alguns destes compostos podem exercer atividade anti-inflamatória e antiviral. Portanto este estudo tem como objetivo determinar a composição de fenólicos totais presentes no inhame in natura, cozido e sua casca. O inhame utilizado nas análises foi obtido em um hortifrutí, situado na baixada fluminense/RJ. As amostras foram armazenadas em temperatura ambiente até o início de seu preparo. Todo inhame obtido foi descascado, após esse processo, a casca foi separada da polpa. A polpa foi dividida em duas partes, uma delas foi utilizada para as análises *in natura* e a outra passou pelo processo de cozimento. Após esse processo as amostras foram acondicionadas em refrigerador, logo após foram liofilizadas e moídas em *mixer* e depois foram armazenadas novamente em um refrigerador, até o início das análises. As extrações dos compostos fenólicos livres foram realizadas com solvente (metanol 80%) e os fenólicos ligados foram extraídos por hidrólise básica e ácida e os extratos obtidos, através dessas extrações, foram utilizados para analisar os fenólicos presentes nas amostras. E através de análise espectrofotométrica foi possível quantificar as concentrações dos fenólicos livres e os ligados (extraídos por hidrólise ácida e básica). Através dos resultados obtidos, pelo método de espectrofotometria, foi possível observar a alta concentração de fenólicos presentes na casca do inhame, se comparado com o inhame cozido e in natura. Os valores obtidos nos extratos dos compostos fenólicos livres da casca do inhame (32,84 mg EAG/100g), foi superior aos valores do inhame in natura (17,87 mg EAG/100g) e do cozido (9,95 mg EAG/100g). Os resultados referentes à casca do inhame, tanto na hidrólise básica (14,63 mg EAG/100g) quanto na hidrólise ácida (15,17 mg EAG/100g) se mantiveram maiores, se comparado com os valores do inhame cozido e in natura. A caracterização e quantificação dos compostos fenólicos em alimentos são necessárias para o conhecimento da composição de bioativos presentes nessas matrizes e a partir disto, é possível potencializar o uso desses alimentos nas indústrias alimentícias, farmacêuticas e cosméticas. Além de obter informações científicas que justifiquem suas aplicações atuais para a população.

Palavras-chave: tubérculo; chikungunya; fenólicos.

OBTENÇÃO DE DERIVADOS NAFTOQUINÔNICOS COM POTENCIAL ATIVIDADE BIOLÓGICA

Matheus Nicolau de Souza; José Celso Torres

Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia do Rio de Janeiro, *campus* Nilópolis

O desenvolvimento de resistência às drogas representa um desafio a mais no tratamento quimioterápico de doenças microbianas. Muitos microorganismos são intrinsecamente resistentes a quimioterápicos, enquanto outros inicialmente respondem ao tratamento, porém adquirem resistência a drogas durante o tratamento. A resistência múltipla a drogas (MDR), o quadro mais grave, ocorre quando os microorganismos *in vitro* e *in vivo* mostram resistência simultânea a diferentes drogas. Assim, apesar de um grande número de compostos que compõem o arsenal quimioterápicos de combate as doenças microbianas, o problema de resistência requer a busca constante por novas drogas eficazes no combate a essas doenças. As naftoquinonas, amplamente encontradas em plantas, fungos e bactérias, são uma das classes de compostos estudadas visando a obtenção de substância com atividade antimicrobiana. Esta classe de compostos age via inibição das DNA-topoisomerasas e/ou através da geração de radicais livres e; sob condições aeróbicas (em órgãos) predomina a redução por um elétron, resultando em intermediários do tipo radicais livres. Sob condições anaeróbicas, o mecanismo de ação envolve uma redução por dois elétrons da função quinona, que pode ser seguida pela sua desativação através da glucuronidação e/ou sulfatação ou pela conversão da hidroquinona em um intermediário alquilante. Neste contexto este projeto visa contribuir para o desenvolvimento de novas drogas, através da obtenção de novos derivados naftoquinônicos, dentre eles N-acilhidrazidas e N-acilhidrazonas, análogos de substâncias com atividade antimicrobiana.

Palavras-chave: *naftoquinona; lausona, atividade biológica*

SÍNTESE EM GRANDE ESCALA DE BENZILPIPERAZINAS COM POTENCIAL ATIVIDADE ANTITUBERCULOSE

^{a,b} Rafael Dantas Ribeiro; ^b Cristiane França da Costa, ^b Marcus Vinícius Nora de Souza, ^b Cláudia Regina Brandão Gomes.

^a Instituto Federal do Rio de Janeiro – IFRJ, ^b Departamento de Síntese de Fármacos e Bioativos, Farmanguinhos, Fundação Oswaldo Cruz, Rio de Janeiro, Brasil

A tuberculose (TB) é um grave problema de saúde mundial em pleno século XXI. De acordo com os dados da Organização Mundial da Saúde (OMS), estima-se que um terço da população mundial é portadora assintomática da tuberculose. O panorama no Brasil é muito preocupante, visto que o país ocupa o 18º lugar no ranking dos 22 países que concentram 80% dos casos de tuberculose no mundo. A associação do *Mycobacterium tuberculosis* com o vírus da imunodeficiência humana (HIV) e o rápido desenvolvimento de cepas multirresistentes são os principais fatores pelo ressurgimento dessa doença. Algumas substâncias contendo a porção benzilpiperazina e seus derivados estão sendo descritas na literatura com atividade antituberculose. Amidas contendo o núcleo benzilpiperazínico são uma classe importante de substâncias no desenvolvimento de novos fármacos, pois apresentam amplo espectro de atividade biológica. Nesse contexto, este projeto tem como objetivo propor a síntese de uma série inédita de amidas contendo benzilpiperazinas, derivadas dos aminoácidos L-fenilalanina, L-alanina, L-leucina as quais serão avaliadas *in vitro* quanto a sua propriedade antituberculose. A metodologia do projeto, consiste na obtenção das moléculas propostas, a partir da redução de benzaldeídos substituídos com borohidreto de sódio em etanol, seguida da cloração utilizando cloreto de tionila em diclorometano. A reação dos cloretos com o monocloridrato de piperazina em etanol forneceu os intermediários-chave benzilpiperazínicos, na forma de sal. Paralelamente, os aminoácidos L-fenilalanina, L-alanina e L-leucina foram protegidos com dicarbonato de *tert*-butila sendo, posteriormente, condensados com as benzilpiperazinas, levando a formação das amidas propostas. Ao todo foram obtidos 23 intermediários e 1 produto final com rendimentos entre 75-90%, utilizando-se rotas sintéticas viáveis e reprodutivas. Estes, por sua vez, foram caracterizados por métodos espectrométricos e espectroscópicos. Como perspectiva, será feito o aumento de escala das amidas que apresentarem atividade *in vitro* contra o *M. tuberculosis* para que possam ser realizados testes *in vivo*, a fim de avaliar suas atividades biológicas e desenvolver novos compostos biologicamente promissores.

Palavras-chave: amidas; benzilpiperazinas; tuberculose

Agência de fomento: CNPq

ESTUDO DO PERFIL DE METAIS DISSOLVIDOS POR ESPECTROMETRIA DE ABSORÇÃO ATÔMICA (EAA) NO LAGO DE JAVARY LOCALIZADA EM MIGUEL PEREIRA – RJ

Sérgio de S. Henrique Júnior; Alexander A. L. da Silva; Alannah M. Calazans; Amanda S. Slater; Igor E. da Silva Lima.

Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia do Rio de Janeiro, *campus* Nilópolis

O lago do Javary, localizado em Miguel Pereira é o cartão-postal da cidade, sendo utilizado para prática de pescaria, contemplação da paisagem a pé, a cavalo e também por pedalinhos. Devido a isso, o lago se enquadra na classe 3 de corpos hídricos segundo o CONAMA Nº 357. Em consequência disso, surgiu a preocupação em relação à qualidade dessa água, tendo em vista o contato das pessoas com o lago. Devido ao exposto, tornou-se necessária a verificação do perfil de metais dissolvidos no mesmo. O principal objetivo desse trabalho foi realizar 2 coletas de amostras de água em diferentes pontos do lago do Javary para determinar a concentração dos metais que se encontram dissolvidos e, posteriormente, comparar a quantidade de metais encontrados nas amostras com os valores regulamentados pelas diretrizes do CONAMA Nº 357, órgão nacional responsável pela adição de medidas acerca do Sistema Nacional do Meio Ambiente. Para realizar essa verificação de metais dissolvidos, foi utilizada a técnica de Espectroscopia de Absorção Atômica (EAA, utilizando o Espectrômetro de Absorção Atômica modelo PinAAcle 900T – PerkinElmer localizado no laboratório de Espectroscopia Atômica e Molecular e o Espectrômetro de Absorção Atômica AAnalyst 200 – PerkinElmer localizado no laboratório de Análises Instrumentais, ambos no IFRJ – Campus Nilópolis. O pré-tratamento das amostras foi realizado para a pré-concentração das amostras, e, além disso, foram preparadas soluções de diversas concentrações dos metais a serem analisados e em sua posterior leitura por EAA, a fim de traçarmos uma curva analítica onde localizaremos através de cálculos simples a concentração real do metal desejado na amostra do lago, para isso é realizada, também, a leitura da amostra. Ao utilizar a técnica para verificar a concentração de metais na lagoa de Javary, foram encontrados metais que excediam a quantidade permitida, como Níquel, Ferro, Chumbo e Cobre. Em contrapartida, Zinco, Cobalto, Manganês se encontraram dentro dessas diretrizes ambientais. Considerando-se os resultados obtidos, é possível observar valores extremamente altos de quantidades de metais na lagoa em relação ao permitido por lei, sendo essencial medidas para resolver o problema em questão.

Palavras-chave: *monitoramento ambiental; qualidade da água; absorção atômica.*

CO-CULTIVO DE FUNGOS DA PODRIDÃO BRANCA E PARDA PARA O PRÉ-TRATAMENTO BIOLÓGICO DA PALHA DE CANA-DE-AÇÚCAR E POSTERIOR ASSOCIAÇÃO COM O TRATAMENTO HIDROTÉRMICO

Davi Marconi Miranda Carvalho da Silva; Me. Bruno Cesar da Silva Coelho;
Dra. Ayla Sant'Ana da Silva
Instituto Nacional de Tecnologia (DICAP/LABIC)

O Brasil é o atual maior produtor de cana-de-açúcar do mundo, com sua última safra estimada cerca de 615 milhões de toneladas. A palha por sua vez, pode representar mais de 200 quilos do total da biomassa disponibilizada em cada tonelada de cana. A princípio, a palha é mais comumente utilizada na cogeração de energia através da sua queima, mas pode ser utilizada também para a produção de etanol de segunda geração. Este etanol de segunda geração é obtido a partir da fermentação da glicose, que por sua vez é obtida a partir da hidrólise da celulose, que pode ser promovida por hidrólise química ou enzimática. Entretanto, para produzir etanol a partir desta biomassa há grandes desafios, um deles está relacionado com a recalcitrância da matéria-prima. A palha possui uma estrutura complexa formada por fibras de celulose recobertas por hemicelulose e lignina, que dificultam o acesso de enzimas hidrolíticas à celulose. Portanto, para diminuir essa recalcitrância são realizados pré-tratamentos com o objetivo de aumentar a disponibilidade da celulose na biomassa removendo parcialmente ou totalmente a lignina e/ou a hemicelulose. Neste presente trabalho foi realizado o pré-tratamento biológico utilizando em conjunto os fungos *Pleurotus ostreatus* e *Gloeophyllum trabeum* em um co-cultivo com o objetivo de aumentar a eficiência do pré-tratamento biológico utilizando um único fungo. Os fungos utilizados são classificados como fungos de podridão branca e podridão parda, que foram selecionados devido a relatos sobre a seletividades desses microrganismos na remoção da lignina e hemicelulose da biomassa vegetal. Entretanto, este co-cultivo pode apresentar algumas dificuldades ao ser realizado, já que os fungos selecionados possuem diferentes características de crescimento, incluindo a competição por substrato. Dois co-cultivos foram realizados para avaliar a influência da alteração da ordem de inóculo no aumento na eficiência do pré-tratamento. Desse modo, foram realizados os inóculos do *P. ostreatus* com o posterior inóculo do *G. trabeum* (*P.Po-Gt*) e vice-versa (*P.Gt-Po*). A eficiência dos co-cultivos foi avaliada através de diversos parâmetros, sendo estes: (i) a perda de massa da palha promovida pelos fungos; (ii) a composição da palha pré-tratada; (iii) a liberação de glicose durante a hidrólise enzimática da palha pré-tratada. Após o período de pré-tratamento biológico, os cocultivos *P.Po-Gt* e *P.Gt-Po* proporcionaram perdas mássicas da biomassa de 12,6% e 36,7% respectivamente. Apesar desta alta perda de massa proporcionada pelo co-cultivo *P.Po-Gt*, este consumiu todos os componentes em proporções relativas iguais. No entanto, o co-cultivo *P.Gt-Po* apresentou sua seletividade relativa a lignina de 0,65 consumindo aproximadamente 32% de toda a lignina, enquanto que para celulose e hemicelulose proporcionou um consumo de 3,6% e 9,5% respectivamente. A hidrólise enzimática foi realizada para verificar se houve aumento na disponibilidade da celulose após ser realizado o pré-tratamento biológico. Foi visto que o rendimento de conversão da celulose em glicose para o co-cultivo *P.Po-Gt* foi de 22,3%, enquanto *P.Gt-Po* foi de 21,4%, e da palha *in natura* de 17,3%. Podemos afirmar que ambos os co-cultivos foram eficientes em aumentar a disponibilidade da celulose da palha da cana-de-açúcar.

Palavras-chave: pré-tratamento biológico; biomassa lignocelulósica; co-cultivo

Agência de fomento: CNPq, Faperj

ESTUDO INICIAL DE PROMISCUIDADE CATALÍTICA ENZIMÁTICA COM TRANSFERÊNCIA DE GRUPAMENTO SULFONILA

Luan Patrick Cardoso Malheiro, Angelo Amaro T. da Silva (PQ)

Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia do Rio de Janeiro, *campus* Nilópolis

A síntese de moléculas bioativas estruturalmente definidas é um desafio cada vez maior para a síntese orgânica moderna. Deve-se buscar e ordenar os tipos diversos de reações químicas com o intuito de se alcançar a estrutura adequada para uma molécula desejada. Esse planejamento, junto com uma análise retrossintética da molécula-alvo, se constituem nas etapas-chave exigidas na química orgânica sintética. Algumas delas possuem estruturas complexas com atividades biológicas diversas. A necessidade da manipulação seletiva desses grupamentos possui basicamente dois aspectos: proteção temporária de grupos OH e modificações químicas seletivas. Assim, a biocatálise tem disponibilizado metodologias eficientes e práticas na síntese de moléculas complexas, além de obedecer aos princípios da química verde. Os métodos usados para a obtenção de moléculas quirais por meio enzimático podem ser divididos em três categorias: racematos, substratos pró-quirais e materiais de partida quirais. A aplicação de enzimas em síntese orgânica vem aumentando nos últimos anos principalmente com o desenvolvimento de reações biocatalisadas não-naturais, ou seja, reações enzimáticas nas quais as ligações químicas clivadas e formadas são de natureza diferente daquelas encontradas na atividade nativa. As hidrolases são as enzimas mais utilizadas porque demonstram a habilidade de controlar o acesso ao seu sítio ativo, são enzimas tolerantes a substratos, as quais aceitam uma grande variedade de substratos naturais e sintéticos para biotransformações. Apesar da quantidade significativa de artigos nos últimos anos sobre promiscuidade catalítica com o uso de lipases, não há relatos de reação com transferência de grupamentos sulfonila em substratos alcóolicos. Ainda, há a possibilidade de uma reação em cascata (*tandem*) com a posterior substituição do sulfonato formado. Dessa forma, a aplicação desta promissora metodologia sustentável possibilitará a ampliação das linhas de pesquisa em biocatálise voltadas para esse tema, buscando, nesse projeto, o estudo da reação de biocatálise enzimática aplicada a monoálcoois e polióis por meio da promiscuidade catalítica de lipases. Os ésteres sulfônicos foram sintetizados a partir de álcoois seguindo um esquema de reação já conhecido na literatura, o de principal uso neste trabalho foi obtido com rendimento de 37%. No screening enzimático inicial utilizou-se feniletanol como material de partida e o éster sulfônico sintetizado, em três tubos contendo N-435, TL-IM e sem enzima, respectivamente, em TBME, por 72 horas. Por fim, a reação enzimática, foi confirmada pela resposta do perfil cromatográfico reacional, sendo o produto obtido apenas nos dois primeiros tubos e menos polar que o material de partida, além de não sensível a revelação por KMnO_4 , o que é teoricamente esperado. O uso de bases e tampões foi considerado não imediato neste momento, apesar do ensaio com trietilamina ter resultado na não realização da reação. Além disso, um escopo de condições reacionais a fim de se conseguir máxima eficácia enzimática pretende ser desenvolvido.

Palavras-chave: lipase; promiscuidade; catálise; sulfonila.

Agência de fomento: IFRJ

NOVOS DERIVADOS DE QUINOLINA COM POTENCIAL ATIVIDADE ANTI-*Plasmodium falciparum*

Gabriel Matheus dos S. de Araujo; Lívia M. Feitosa; Maria de Lourdes G. Ferreira; Larissa O. Guimarães; Luiz C. S. Pinheiro; Núbia Boechat

Departamento de Síntese de Fármacos, Farmanguinhos - FIOCRUZ, Fundação Oswaldo Cruz. RJ, Brasil

A malária é a principal causa de morbidade e mortalidade ao redor do mundo por doenças parasitárias, especialmente em países em desenvolvimento. Dados da Organização Mundial de Saúde (OMS) mostram que houve cerca de 219 milhões de casos de malária e cerca de 435 mil mortes em 2017. Em 2016, quase metade da população mundial estava em risco de contrair malária e, embora existam tratamentos eficazes, a quimioterapia da doença possui diversas limitações, incluindo a resistência generalizada aos fármacos utilizados. No Brasil, a maioria dos casos de malária se concentra na Amazônia, área endêmica da doença. Nas demais regiões, apesar das poucas notificações, a doença não pode ser negligenciada. A malária é uma doença infecciosa febril aguda, causada pelo *Plasmodium*, transmitidos pela fêmea infectada do mosquito do gênero *Anopheles*. A ocorrência da malária está associada ao clima tropical, pois este se apresenta favorável à reprodução e ao desenvolvimento do mosquito *Anopheles*. Apresenta cura se for tratada em tempo oportuno e adequadamente. Hoje a quimioterapia antimalárica preconizada pela OMS é baseada, principalmente, em terapias combinadas à base de derivados de artemisinina (ACTs). Apesar do avanço com as ACTs, ainda é necessário a busca de novas moléculas bioativas para solucionar os problemas advindos do desenvolvimento de resistência dos parasitos aos medicamentos em uso. Durante nossa busca por novos compostos que possam ser usados no tratamento da malária, demonstramos a importância do **protótipo I**, 5-metil-*N*-(naftalen-2-il)-2-(trifluorometil)-[1,2,4]triazolo[1,5-*a*]pirimidina-7-amina que possui atividade anti-*P. falciparum* (IC₅₀ = 0,023 µM). Em outro trabalho, demonstramos a importância dos derivados quinolina ligados à benzenossulfonamida por espaçadores metilênicos de 4 carbonos como ligante (protótipo II). O **protótipo II**, 4-cloro-*N*-(4-((7-cloroquinolin-4-il)amino)butil)benzenossulfonamida que foi apresentou IC₅₀ de 0,09 µM, menor que o de cloroquina (CQ) (IC₅₀ = 0,46 µM) e quando avaliado contra *P. berghei*, o **protótipo II** inibiu a parasitemia em 49% no quinto dia após a inoculação. Para obter novos compostos com atividade anti-*P. falciparum* foi planejada uma nova série de derivados *N*¹-(7-cloroquinolin-4-il)-*N*³-(5-metil-[1,2,4]triazolo[1,5-*a*]pirimidin-7-il)propano-1,3-diamina e *N*¹-(7-cloroquinolin-4-il)-*N*⁴-(5-metil-[1,2,4]triazolo[1,5-*a*]pirimidin-7-il)butano-1,4-diamina (9-14), a partir da hibridação do anel triazolo[1,5-*a*]pirimidina presente no **protótipo I** com o anel quinolínico presente na cloroquina (CQ) por 3 ou 4 carbonos metileno. A reação dos apropriados 1*H*-1,2,4-triazol-5-aminas com acetoacetato de etila em tolueno produziu os derivados triazolo[1,5-*a*]pirimidin-7(4*H*)-ona com 71-95% de rendimento, que foram tratados com $POCl_3$ para obter os intermediários chave 7-cloro-5-metil-[1,2,4]triazolo[1,5-*a*]pirimidina com rendimento de 51-70%. A reação entre a 4,7-dicloroquinolina com as respectivas diaminas, 1,4-butanodiamina e 1,3-propanodiamina, sem solvente, sob refluxo produziu as aminoquinolinas com 90 e 86% de rendimento, respectivamente. Através da reação dos intermediários chave e as respectivas aminoquinolinas em etanol foram formados os compostos *N*¹-(7-cloroquinolin-4-il)-*N*³-(5-metil-[1,2,4]triazolo[1,5-*a*]pirimidin-7-il)propano-1,3-diamina e *N*¹-(7-cloroquinolin-4-il)-*N*⁴-(5-metil-[1,2,4]triazolo[1,5-*a*]pirimidin-7-il)butano-1,4-diamina, não constando na literatura, em 40-50% de rendimento, após purificação. A síntese para obtenção dos novos derivados quinolínicos foi viável e esses já estão sendo testados contra *P. falciparum*. Além disso, as moléculas mais potentes serão enviadas para *in vivo* para investigação de sua atividade antimalárica. O projeto está sendo desenvolvido no departamento de Síntese de Fármacos – Farmanguinhos/Fiocruz.

Palavras-chave: malária; triazolopirimidina; quinolina

Agência de fomento: CNPq, CAPES, FAPERJ e PDTIS/FIOCRUZ.

ESTUDO DA DEGRADAÇÃO TÉRMICA DE ADITIVOS EM ALIMENTOS

Mariana Soares de Freitas; Katia Christina Leandro; Katia Laine Magalhães do Couto; André Luis Mazzei Albert e Jorge Guerra Mendes
Instituto Nacional Controle Qualidade em Saúde-INCQS/FIOCRUZ.

Segundo o Ministério da Saúde, os aditivos alimentares são ingredientes adicionados de forma intencional aos alimentos, a fim de modificar as características físicas, químicas, biológicas ou sensoriais durante todo o processo de fabricação até o transporte ou manipulação do produto acabado. O presente estudo avalia os aditivos químicos, corantes e edulcorantes, que são substâncias naturais ou sintéticas adicionadas aos alimentos para proporcionar, respectivamente, cor e sabor. Através da revisão bibliográfica, foram determinados os corantes e edulcorantes mais ingeridos pela população e os alimentos mais consumidos. Foram então selecionadas e adquiridas amostras de bebidas ultraprocessadas não alcoólicas. A seleção das amostras foi realizada através da identificação em seus rótulos dos aditivos em questão. As amostras são comercializadas em estabelecimentos da cidade do Rio de Janeiro, totalizando 41 amostras. Do mesmo modo, um levantamento na literatura científica foi realizado, no intuito de avaliar quais métodos são utilizados para esta análise. A metodologia analítica selecionada para a análise das amostras de bebidas ultraprocessadas não alcoólicas foi a cromatografia líquida de alta eficiência (CLAE) com detector de arranjo de diodos (DAD). Com o propósito de avaliar a aplicabilidade do método cromatográfico desenvolvido, foi analisada uma primeira amostra de refrigerante sabor uva. O produto produzido no Brasil declara na sua composição os corantes tartrazina, amaranto e o azul brilhante. Foram observados três sinais cromatográficos no espectro UV/VIS, apresentando um bom perfil, dentro de um tempo de análise razoável. Todavia, não foram identificados todos os sinais cromatográficos, quando comparados com os respectivos padrões analíticos, sugerindo então uma disparidade entre um dos corantes declarados e o terceiro sinal apresentado na análise da amostra. Cabe ainda uma investigação mais apurada para identificação do analito. Os resultados apresentados ressaltam a relevância do estudo em questão, levando em consideração que outras amostras, assim como, a primeira analisada, podem apresentar discrepâncias entre o que é declarado e o que está contido na composição.

Palavras-chave: aditivos alimentares; degradação térmica; cromatografia líquida.

Agência de fomento: Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico – CNPq

PRODUÇÃO DE ENZIMAS HIDROLÍTICAS VIA FERMENTATIVA UTILIZANDO RESÍDUOS DE CERVEJARIAS

Phellipe Botelho Fogaça, Ivanilton Almeida Nery, Edmir Fernandes Ferreira
IFRJ, *campus* Nilópolis

O Malte é uma mistura de cereais aplicadas a produção de bebidas alcoólicas como a cerveja, sendo composto majoritariamente por grãos de cevada, trigo e milho em produções comerciais. Este insumo gera cerca de 14 a 20 kg de resíduo sólido para cada batelada de 100 L de cerveja produzida, sendo expressivo o volume deste resíduo considerando a produção mundial. Só no Brasil estima-se que o consumo seja de 60 litros per capta por ano. Sendo o malte um resíduo lignocelulósico, o bagaço do malte e sua água de lavagem são elegíveis para estudos de viabilidade no aproveitamento por diferentes vias, com a via biotecnológica buscando aplica-lo a produção enzimática. O amido é um polissacarídeo formado por dois componentes de alto peso molecular, a amilose e amilopectina e é encontrado em plantas como reserva de energia, o amido pode ser encontrado em grandes quantidades em efluentes da indústria de processamento de vegetais. As enzimas glicohidrolíticas podem ser obtidas por via biotecnológica pela fermentação submersa (FS) de águas de efluentes industriais ricas em amido, os agentes fermentadores mais utilizados são o bacilo *Bacillus subtilis* e o fungo filamentosos *Aspergillus niger* devido as suas altas produções aliadas a facilidade de manutenção das cepas. Este trabalho tem o intuito de avaliar comparativamente a produção de enzimas amilolíticas por diferentes microrganismos a partir da água de lavagem do bagaço de malte em fermentação submersa. O bagaço de malte recebido de experimentos anteriores de fabricação de cerveja de trigo foi lavado com água destilada até a completa remoção do açúcar residual, sendo a avaliação realizada com Ácido 3,5-dinitrosalicílico (DNS), a água resultante foi esterilizada a 121°C e 1 atm por 15 minutos e submetida a fermentação submersa (FS) por cepas de *B.subtilis* a 36 °C sem aeração por 24, 48 e 72 horas; e por cepas de *A.niger* por 4, 5 e 6 dias. Os extratos enzimáticos obtidos nestas fermentações serão submetidos a ensaio de determinação de atividade amilolítica, utilizando DNS para quantificação dos açúcares redutores liberados, com resultados das atividades expressos em U.mL⁻¹ definido como micromols de equivalentes de glicose liberados por minuto por mililitro de extrato.

Palavras-chave: fermentação; resíduos agroindustriais; enzimas hidrolíticas

Agência de fomento: IFRJ

INFLUÊNCIA DA FASE CRISTALINA DO TiO₂ NO DESEMPENHO DE COMPÓSITOS DE PVDF

Ludmila da Silva Candido^{1,2}; Maria de Fátima Vieira Marques²; José Jonathan Rubio Arias²; Fernanda Fabbri Gondim²; Fábio Elias Jorge²; Ana Beatriz Rocha^{2,3}

1. Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia do Rio de Janeiro
2. Instituto de Macromoléculas Professora Eloísa Mano / UFRJ
3. Instituto de Química - Universidade Federal do Rio de Janeiro

O fluoreto de polivinilideno (PVDF) é um polímero opaco, semicristalino que caracteriza-se por apresentar excelente resistência química sem ter as desvantagens de baixo desempenho mecânico ou dificuldades de processamento que podem ocorrer em outros materiais fluoroplásticos. Isso justifica a ampla área de aplicabilidade deste material, sendo utilizado em diversos produtos que requerem alta resistência mecânica e química, resistência às altas temperaturas, e em ambientes severamente exigentes, como tubulações. O dióxido de titânio (TiO₂) é um mineral estável, não tóxico e de baixo custo de produção, normalmente estudado pelas suas propriedades químicas e físicas. Em sua forma cristalina o mesmo pode ser encontrado em três fases polimorfas diferentes, sendo elas: anatase e rutilo, ambas com estrutura tetragonal, hábito octaédrico e prismático respectivamente; e bruquita, que possui uma estrutura ortorrômbica. As aplicações do dióxido de titânio variam de acordo com as fases cristalográficas em que o material se encontra, uma vez que suas propriedades físicas e químicas sofrem alterações dependendo da fase obtida. A fase cristalográfica anatase é formada mais facilmente, pois esta é obtida em temperaturas baixas, enquanto a fase rutilo é obtida apenas com tratamentos térmicos acima de 900 °C. Os compósitos de PVDF/TiO₂ possuem inúmeras aplicações, como filtros, nanofibras condutivas, fotocatalise e sensores, por exemplo. Estudos comprovam que, em alguns métodos de obtenção dos compósitos de PVDF/TiO₂, é possível observar através de imagens de microscopia eletrônica de varredura, por exemplo, que os compósitos de TiO₂/PVDF apresentam uma boa dispersão de cargas e alta homogeneidade. Levando isto em consideração, o presente trabalho visa o preparo de compósitos de TiO₂/PVDF através de extrusão a 220 °C em extrusora Mini Haake dupla rosca e posterior avaliação da permeabilidade dos compósitos ao CO₂ mediante um sistema de diferencial de pressão do CO₂, comparando a permeabilidade dos compósitos com a do material polimérico puro.

Palavras-chave: *pvd; tio₂; anatase*

Agência de fomento: *Fundação Coordenação de Projetos, Pesquisas e Estudos Tecnológicos - COPPETEC*

REAPROVEITAMENTO DE CASCA DE FRUTAS RICAS EM COMPOSTOS FENÓLICOS PARA OBTENÇÃO DE BISCOITOS

Rebeca Fernandes dos Santos Pimenta, Suellen Gomes.

Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia do Rio de Janeiro, *campus* Nilópolis

O consumo de frutas é extremamente frequente, tanto na indústria alimentícia, na composição de receitas caseiras ou *in natura*, elas são muito utilizadas por possuírem sabor agradável ao paladar e também serem ricas fontes de nutrientes, contribuindo para uma alimentação balanceada. Porém, ainda pouco se fala sobre a utilização de suas cascas. Estudos comprovam que as cascas das frutas, também são fontes de muitos nutrientes e possuem uma gama de compostos bioativos, sendo assim benéficas a saúde. O descarte ou subaproveitamento das cascas de frutas aumenta o volume de lixo produzido, além de desperdiçar seu potencial bioativo. O desenvolvimento de novos produtos a partir de cascas de frutas tem sido uma alternativa para diminuir a quantidade de resíduos gerados e evitar desperdício. As cascas das frutas maracujá, abacaxi e manga, possuem compostos fenólicos e carotenoides, já analisados em estudos anteriores, sendo de grande valor a sua utilização. Este projeto tem como objetivo a produção de um biscoito, com a farinha das cascas das frutas manga, abacaxi e maracujá, caracterizando a composição de compostos fenólicos presentes no mesmo. Foram testadas diferentes proporções da farinha das cascas na massa do biscoito, até que se chegasse a uma formulação ideal. Serão realizados teste de cinzas, a fim de quantificar compostos inorgânicos presentes, e o teste de lipídios, para avaliar a quantidade de lipídios presentes. Os teores de compostos fenólicos totais das amostras do biscoito contendo a farinha e do biscoito controle serão analisados por espectrofotometria. Este projeto tem o intuito de proporcionar o reaproveitamento de um resíduo do processamento de frutas, adicionando valor agregado, além de favorecer o consumo de um alimento saudável com apelo funcional para a sociedade.

Palavras-chave: *resíduos; cascas de frutas; compostos fenólicos.*

A QUÍMICA VERDE NOS EXPERIMENTOS DE QUÍMICA ORGÂNICA

Lucas de Souza Silva; José Celso Torres

Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia do Rio de Janeiro, *campus* Nilópolis.

É através de seus conhecimentos de Química que o Homem busca alimentar a população do planeta, encontrar novas fontes de energia, vestir e abrigar a humanidade, ofertar substitutos renováveis para materiais escassos ou em via de extinção, melhorar a saúde e vencer doenças, fortalecer a segurança pública, monitorar e proteger o meio ambiente. Porém, o crescimento da população mundial e o aumento da demanda por energia e por bens de consumo, tem causado forte impacto no Meio Ambiente e ao próprio ser humano e, fez surgir a Química verde – que é um conjunto de ações que visam minimizar estes impactos. Essa preocupação com o futuro da Humanidade atinge também o ensino de Química, pois se propõe a formar profissionais capazes de atuar eticamente no mundo real e global. Para tal é preciso lançar mão de ferramentas, cujas perspectivas transcendam o domínio da dimensão tecnológica e das implicações destes conhecimentos e técnicas no movimento da sociedade e na modificação da natureza. Elaborar e desenvolver projetos visando reunir, organizar os conhecimentos dispersos e aplicar estes conhecimentos em sala de aula, contribui para a melhoria na qualidade do Ensino. Além disso, se as pesquisas levarem em consideração a escassez dos recursos físicos não renováveis, os conflitos sociais causados pela obtenção destes, a contaminação do Meio Ambiente Natural e o conseqüente reflexo no Meio Ambiente, estaremos contribuindo para formar profissionais éticos segundo os novos paradigmas do século 21. Assim, este trabalho tem por objetivo elaborar aulas experimentais, tendo como base os 12 princípios da Química Verde, para serem utilizados nas práticas das disciplinas de Química Orgânica dos cursos Técnicos e de Graduação do Instituto Federal do Rio de Janeiro, *campus* Nilópolis.

Palavras-chave: *ensino de química; química verde; química orgânica*