

# A Diversidade de Debates na Pesquisa em Química 2

Jéssica Verger Nardeli  
(Organizadora)

# A Diversidade de Debates na Pesquisa em Química 2

Jéssica Verger Nardeli  
(Organizadora)

 **Atena**  
Editora

Ano 2020

2020 by Atena Editora

Copyright © Atena Editora

Copyright do Texto © 2020 Os autores

Copyright da Edição © 2020 Atena Editora

**Editora Chefe:** Profª Drª Antonella Carvalho de Oliveira

**Diagramação:** Natália Sandrini de Azevedo

**Edição de Arte:** Lorena Prestes

**Revisão:** Os Autores



Todo o conteúdo deste livro está licenciado sob uma Licença de Atribuição *Creative Commons*. Atribuição 4.0 Internacional (CC BY 4.0).

O conteúdo dos artigos e seus dados em sua forma, correção e confiabilidade são de responsabilidade exclusiva dos autores. Permitido o download da obra e o compartilhamento desde que sejam atribuídos créditos aos autores, mas sem a possibilidade de alterá-la de nenhuma forma ou utilizá-la para fins comerciais.

### **Conselho Editorial**

#### **Ciências Humanas e Sociais Aplicadas**

Profª Drª Adriana Demite Stephani – Universidade Federal do Tocantins

Prof. Dr. Álvaro Augusto de Borba Barreto – Universidade Federal de Pelotas

Prof. Dr. Alexandre Jose Schumacher – Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia de Mato Grosso

Profª Drª Angeli Rose do Nascimento – Universidade Federal do Estado do Rio de Janeiro

Prof. Dr. Antonio Carlos Frasson – Universidade Tecnológica Federal do Paraná

Prof. Dr. Antonio Gasparetto Júnior – Instituto Federal do Sudeste de Minas Gerais

Prof. Dr. Antonio Isidro-Filho – Universidade de Brasília

Prof. Dr. Carlos Antonio de Souza Moraes – Universidade Federal Fluminense

Profª Drª Cristina Gaio – Universidade de Lisboa

Profª Drª Denise Rocha – Universidade Federal do Ceará

Prof. Dr. Deyvison de Lima Oliveira – Universidade Federal de Rondônia

Prof. Dr. Edvaldo Antunes de Farias – Universidade Estácio de Sá

Prof. Dr. Eloi Martins Senhora – Universidade Federal de Roraima

Prof. Dr. Fabiano Tadeu Grazioli – Universidade Regional Integrada do Alto Uruguai e das Missões

Prof. Dr. Gilmei Fleck – Universidade Estadual do Oeste do Paraná

Prof. Dr. Gustavo Henrique Cepolini Ferreira – Universidade Estadual de Montes Claros

Profª Drª Ivone Goulart Lopes – Istituto Internazionele delle Figlie de Maria Ausiliatrice

Prof. Dr. Julio Candido de Meirelles Junior – Universidade Federal Fluminense

Profª Drª Keyla Christina Almeida Portela – Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia de Mato Grosso

Profª Drª Lina Maria Gonçalves – Universidade Federal do Tocantins

Prof. Dr. Luis Ricardo Fernando da Costa – Universidade Estadual de Montes Claros

Profª Drª Natiéli Piovesan – Instituto Federal do Rio Grande do Norte

Prof. Dr. Marcelo Pereira da Silva – Universidade Federal do Maranhão

Profª Drª Miranilde Oliveira Neves – Instituto de Educação, Ciência e Tecnologia do Pará

Profª Drª Paola Andressa Scortegagna – Universidade Estadual de Ponta Grossa

Profª Drª Rita de Cássia da Silva Oliveira – Universidade Estadual de Ponta Grossa

Profª Drª Sandra Regina Gardacho Pietrobon – Universidade Estadual do Centro-Oeste

Profª Drª Sheila Marta Carregosa Rocha – Universidade do Estado da Bahia

Prof. Dr. Rui Maia Diamantino – Universidade Salvador

Prof. Dr. Urandi João Rodrigues Junior – Universidade Federal do Oeste do Pará

Profª Drª Vanessa Bordin Viera – Universidade Federal de Campina Grande

Prof. Dr. William Cleber Domingues Silva – Universidade Federal Rural do Rio de Janeiro  
Prof. Dr. Willian Douglas Guilherme – Universidade Federal do Tocantins

### **Ciências Agrárias e Multidisciplinar**

Prof. Dr. Alexandre Igor Azevedo Pereira – Instituto Federal Goiano  
Prof. Dr. Antonio Pasqualetto – Pontifícia Universidade Católica de Goiás  
Prof. Dr. Cleberton Correia Santos – Universidade Federal da Grande Dourados  
Profª Drª Daiane Garabeli Trojan – Universidade Norte do Paraná  
Profª Drª Diocléa Almeida Seabra Silva – Universidade Federal Rural da Amazônia  
Prof. Dr. Écio Souza Diniz – Universidade Federal de Viçosa  
Prof. Dr. Fábio Steiner – Universidade Estadual de Mato Grosso do Sul  
Prof. Dr. Fágner Cavalcante Patrocínio dos Santos – Universidade Federal do Ceará  
Profª Drª Girlene Santos de Souza – Universidade Federal do Recôncavo da Bahia  
Prof. Dr. Júlio César Ribeiro – Universidade Federal Rural do Rio de Janeiro  
Profª Drª Lina Raquel Santos Araújo – Universidade Estadual do Ceará  
Prof. Dr. Pedro Manuel Villa – Universidade Federal de Viçosa  
Profª Drª Raissa Rachel Salustriano da Silva Matos – Universidade Federal do Maranhão  
Prof. Dr. Ronilson Freitas de Souza – Universidade do Estado do Pará  
Profª Drª Talita de Santos Matos – Universidade Federal Rural do Rio de Janeiro  
Prof. Dr. Tiago da Silva Teófilo – Universidade Federal Rural do Semi-Árido  
Prof. Dr. Valdemar Antonio Paffaro Junior – Universidade Federal de Alfenas

### **Ciências Biológicas e da Saúde**

Prof. Dr. André Ribeiro da Silva – Universidade de Brasília  
Profª Drª Anelise Levay Murari – Universidade Federal de Pelotas  
Prof. Dr. Benedito Rodrigues da Silva Neto – Universidade Federal de Goiás  
Prof. Dr. Edson da Silva – Universidade Federal dos Vales do Jequitinhonha e Mucuri  
Profª Drª Eleuza Rodrigues Machado – Faculdade Anhanguera de Brasília  
Profª Drª Elane Schwinden Prudêncio – Universidade Federal de Santa Catarina  
Profª Drª Eysler Gonçalves Maia Brasil – Universidade da Integração Internacional da Lusofonia Afro-Brasileira  
Prof. Dr. Ferlando Lima Santos – Universidade Federal do Recôncavo da Bahia  
Prof. Dr. Fernando José Guedes da Silva Júnior – Universidade Federal do Piauí  
Profª Drª Gabriela Vieira do Amaral – Universidade de Vassouras  
Prof. Dr. Gianfábio Pimentel Franco – Universidade Federal de Santa Maria  
Profª Drª Iara Lúcia Tescarollo – Universidade São Francisco  
Prof. Dr. Igor Luiz Vieira de Lima Santos – Universidade Federal de Campina Grande  
Prof. Dr. José Max Barbosa de Oliveira Junior – Universidade Federal do Oeste do Pará  
Prof. Dr. Luís Paulo Souza e Souza – Universidade Federal do Amazonas  
Profª Drª Magnólia de Araújo Campos – Universidade Federal de Campina Grande  
Prof. Dr. Marcus Fernando da Silva Praxedes – Universidade Federal do Recôncavo da Bahia  
Profª Drª Mylena Andréa Oliveira Torres – Universidade Ceuma  
Profª Drª Natiéli Piovesan – Instituto Federaci do Rio Grande do Norte  
Prof. Dr. Paulo Inada – Universidade Estadual de Maringá  
Profª Drª Renata Mendes de Freitas – Universidade Federal de Juiz de Fora  
Profª Drª Vanessa Lima Gonçalves – Universidade Estadual de Ponta Grossa  
Profª Drª Vanessa Bordin Viera – Universidade Federal de Campina Grande

### **Ciências Exatas e da Terra e Engenharias**

Prof. Dr. Adélio Alcino Sampaio Castro Machado – Universidade do Porto

Prof. Dr. Alexandre Leite dos Santos Silva – Universidade Federal do Piauí  
Prof. Dr. Carlos Eduardo Sanches de Andrade – Universidade Federal de Goiás  
Prof<sup>a</sup> Dr<sup>a</sup> Carmen Lúcia Voigt – Universidade Norte do Paraná  
Prof. Dr. Eloi Rufato Junior – Universidade Tecnológica Federal do Paraná  
Prof. Dr. Fabrício Menezes Ramos – Instituto Federal do Pará  
Prof. Dr. Juliano Carlo Rufino de Freitas – Universidade Federal de Campina Grande  
Prof<sup>a</sup> Dr<sup>a</sup> Luciana do Nascimento Mendes – Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia do Rio Grande do Norte  
Prof. Dr. Marcelo Marques – Universidade Estadual de Maringá  
Prof<sup>a</sup> Dr<sup>a</sup> Neiva Maria de Almeida – Universidade Federal da Paraíba  
Prof<sup>a</sup> Dr<sup>a</sup> Natiéli Piovesan – Instituto Federal do Rio Grande do Norte  
Prof. Dr. Takeshy Tachizawa – Faculdade de Campo Limpo Paulista

### **Conselho Técnico Científico**

Prof. Me. Abrãao Carvalho Nogueira – Universidade Federal do Espírito Santo  
Prof. Me. Adalberto Zorzo – Centro Estadual de Educação Tecnológica Paula Souza  
Prof. Me. Adalto Moreira Braz – Universidade Federal de Goiás  
Prof. Dr. Adaylson Wagner Sousa de Vasconcelos – Ordem dos Advogados do Brasil/Seccional Paraíba  
Prof. Me. André Flávio Gonçalves Silva – Universidade Federal do Maranhão  
Prof<sup>a</sup> Dr<sup>a</sup> Andreza Lopes – Instituto de Pesquisa e Desenvolvimento Acadêmico  
Prof<sup>a</sup> Dr<sup>a</sup> Andrezza Miguel da Silva – Universidade Estadual do Sudoeste da Bahia  
Prof. Dr. Antonio Hot Pereira de Faria – Polícia Militar de Minas Gerais  
Prof<sup>a</sup> Ma. Bianca Camargo Martins – UniCesumar  
Prof<sup>a</sup> Ma. Carolina Shimomura Nanya – Universidade Federal de São Carlos  
Prof. Me. Carlos Antônio dos Santos – Universidade Federal Rural do Rio de Janeiro  
Prof. Ma. Cláudia de Araújo Marques – Faculdade de Música do Espírito Santo  
Prof<sup>a</sup> Dr<sup>a</sup> Cláudia Taís Siqueira Cagliari – Centro Universitário Dinâmica das Cataratas  
Prof. Me. Daniel da Silva Miranda – Universidade Federal do Pará  
Prof<sup>a</sup> Ma. Daniela da Silva Rodrigues – Universidade de Brasília  
Prof<sup>a</sup> Ma. Dayane de Melo Barros – Universidade Federal de Pernambuco  
Prof. Me. Douglas Santos Mezacas – Universidade Estadual de Goiás  
Prof. Dr. Edwaldo Costa – Marinha do Brasil  
Prof. Me. Eduardo Gomes de Oliveira – Faculdades Unificadas Doctum de Cataguases  
Prof. Me. Eliel Constantino da Silva – Universidade Estadual Paulista Júlio de Mesquita  
Prof. Me. Euvaldo de Sousa Costa Junior – Prefeitura Municipal de São João do Piauí  
Prof<sup>a</sup> Ma. Fabiana Coelho Couto Rocha Corrêa – Centro Universitário Estácio Juiz de Fora  
Prof. Dr. Fabiano Lemos Pereira – Prefeitura Municipal de Macaé  
Prof. Me. Felipe da Costa Negrão – Universidade Federal do Amazonas  
Prof<sup>a</sup> Dr<sup>a</sup> Germana Ponce de Leon Ramírez – Centro Universitário Adventista de São Paulo  
Prof. Me. Gevair Campos – Instituto Mineiro de Agropecuária  
Prof. Dr. Guilherme Renato Gomes – Universidade Norte do Paraná  
Prof. Me. Gustavo Krahl – Universidade do Oeste de Santa Catarina  
Prof. Me. Helton Rangel Coutinho Junior – Tribunal de Justiça do Estado do Rio de Janeiro  
Prof<sup>a</sup> Ma. Jaqueline Oliveira Rezende – Universidade Federal de Uberlândia  
Prof. Me. Javier Antonio Albornoz – University of Miami and Miami Dade College  
Prof<sup>a</sup> Ma. Jéssica Verger Nardeli – Universidade Estadual Paulista Júlio de Mesquita Filho  
Prof. Me. Jhonatan da Silva Lima – Universidade Federal do Pará  
Prof. Me. José Luiz Leonardo de Araujo Pimenta – Instituto Nacional de Investigación Agropecuaria Uruguay  
Prof. Me. José Messias Ribeiro Júnior – Instituto Federal de Educação Tecnológica de Pernambuco

Profª Ma. Juliana Thaisa Rodrigues Pacheco – Universidade Estadual de Ponta Grossa  
 Profª Drª Kamilly Souza do Vale – Núcleo de Pesquisas Fenomenológicas/UFPA  
 Profª Drª Karina de Araújo Dias – Prefeitura Municipal de Florianópolis  
 Prof. Dr. Lázaro Castro Silva Nascimento – Laboratório de Fenomenologia & Subjetividade/UFPR  
 Prof. Me. Leonardo Tullio – Universidade Estadual de Ponta Grossa  
 Profª Ma. Lilian Coelho de Freitas – Instituto Federal do Pará  
 Profª Ma. Liliani Aparecida Sereno Fontes de Medeiros – Consórcio CEDERJ  
 Profª Drª Lívia do Carmo Silva – Universidade Federal de Goiás  
 Prof. Me. Lucio Marques Vieira Souza – Secretaria de Estado da Educação, do Esporte e da Cultura de Sergipe  
 Prof. Me. Luis Henrique Almeida Castro – Universidade Federal da Grande Dourados  
 Prof. Dr. Luan Vinicius Bernardelli – Universidade Estadual do Paraná  
 Prof. Dr. Michel da Costa – Universidade Metropolitana de Santos  
 Prof. Dr. Marcelo Máximo Purificação – Fundação Integrada Municipal de Ensino Superior  
 Prof. Me. Marcos Aurelio Alves e Silva – Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia de São Paulo  
 Profª Ma. Marileila Marques Toledo – Universidade Federal dos Vales do Jequitinhonha e Mucuri  
 Prof. Me. Ricardo Sérgio da Silva – Universidade Federal de Pernambuco  
 Prof. Me. Rafael Henrique Silva – Hospital Universitário da Universidade Federal da Grande Dourados  
 Profª Ma. Renata Luciane Polsaque Young Blood – UniSecal  
 Profª Ma. Solange Aparecida de Souza Monteiro – Instituto Federal de São Paulo  
 Prof. Me. Tallys Newton Fernandes de Matos – Faculdade Regional Jaguaribana  
 Prof. Dr. Welleson Feitosa Gazel – Universidade Paulista

<b>Dados Internacionais de Catalogação na Publicação (CIP) (eDOC BRASIL, Belo Horizonte/MG)</b>	
D618	<p>A diversidade de debates na pesquisa em química 2 [recurso eletrônico] / Organizadora Jéssica Verger Nardeli. – Ponta Grossa, PR: Atena Editora, 2020.</p> <p>Formato: PDF            Requisitos de sistemas: Adobe Acrobat Reader            Modo de acesso: World Wide Web            Inclui bibliografia            ISBN 978-65-5706-036-0            DOI 10.22533/at.ed.360202105</p> <p>1. Química – Pesquisa – Brasil. 2. Pesquisa – Metodologia.            I.Nardeli, Jéssica Verger.</p> <p style="text-align: right;">CDD 540.7</p>
<b>Elaborado por Maurício Amormino Júnior – CRB6/2422</b>	

Atena Editora  
 Ponta Grossa – Paraná - Brasil  
[www.atenaeditora.com.br](http://www.atenaeditora.com.br)  
 contato@atenaeditora.com.br

## APRESENTAÇÃO

A coleção “A Diversidade de Debates na Pesquisa em Química 2” é uma obra que tem um conjunto fundamental de conhecimentos direcionados a industriais, pesquisadores, engenheiros, técnicos, acadêmicos e, é claro, estudantes. A coleção abordará de forma categorizada pesquisas que transitam nos vários caminhos da química de forma aplicada, inovadora, contextualizada e didática objetivando a divulgação científica por meio de trabalhos com diferentes funcionalidades que compõem seus capítulos.

O objetivo central foi apresentar de forma categorizada e clara estudos relacionados a revestimentos inteligentes – *smart coatings*; técnicas eletroquímicas; modificação de superfície; processo foto-Fenton; dessulfurização adsortiva de diesel; otimização de sensores; contaminantes orgânicos; degradação de compostos; nanotubos de carbono hidrofílicos; oxidação parcial do metano; produção de etanol; tratamento de efluente aquoso; produção de biogás; processo oxidativo avançado; partição de íons metálicos; ensino de polímeros; reutilização de óleo industrial; análise complexométrica de alumínio e modelagem molecular. Em todos esses trabalhos a linha condutora foi o aspecto relacionado à caracterização, aplicação, otimização de procedimentos e metodologias, entre outras abordagens importantes na área de química, ensino e engenharia química. A diversidade de Debates na pesquisa em Química tem sido um fator importante para a contribuição em diferentes áreas.

Temas diversos e interessantes são, deste modo, discutidos aqui com a proposta de fundamentar o conhecimento de acadêmicos, mestres e todos aqueles que de alguma forma se interessam pela área de química tecnológica, bacharel e licenciatura. Possuir um material que demonstre evolução de diferentes metodologias, abordagens, aplicações de processos, caracterização com diferentes técnicas (eletroquímica, microscopia, espectroscopia no infravermelho por transformada de Fourier e raios-X) substanciais é muito relevante, assim como abordar temas atuais e de interesse tanto no meio acadêmico como social.

Portanto, esta obra é oportuna e visa fornecer uma infinidade de estudos fundamentados nos resultados experimentais obtidos pelos diversos pesquisadores, professores e acadêmicos que desenvolveram seus trabalhos que aqui serão apresentados de maneira concisa e didática.

Jéssica Verger Nardeli

## SUMÁRIO

<b>CAPÍTULO 1</b> .....	<b>1</b>
SMART COATING FOR CORROSION PROTECTION OF ALUMINIUM ALLOYS: GLOBAL AND LOCALIZED STUDY OF ANTI- CORROSION PERFORMANCE	
Jéssica Verger Nardeli Cecílio Sadao Fugivara Fátima Montemor Assis Vicente Benedetti	
<b>DOI 10.22533/at.ed.3602021051</b>	
<b>CAPÍTULO 2</b> .....	<b>13</b>
FACTORIAL EXPERIMENTAL DESIGN APPLIED FOR OPTIMIZATION OF TARTRAZINE REMOVAL BY PHOTO-FENTON PROCESS USING $Cu_2FeSn_4$ CATALYST	
Julia da Silveira Salla Vitória Segabinazzi Foletto Jivago Schumacher de Oliveira Gabriela Carvalho Collazzo Evandro Stoffels Mallmann Edson Luiz Foletto	
<b>DOI 10.22533/at.ed.3602021052</b>	
<b>CAPÍTULO 3</b> .....	<b>23</b>
TRANSFORMACIÓN DE ÁCIDO FERÚLICO CON HONGOS AISLADOS DE BAGAZO DE CAÑA	
Miguel Ávila Jiménez Myriam Gisela Gutiérrez Rueda Julia Aguilar Pliego María del Rocío Cruz Colín María Teresa Castañeda Briones	
<b>DOI 10.22533/at.ed.3602021053</b>	
<b>CAPÍTULO 4</b> .....	<b>32</b>
APLICAÇÃO DE MATERIAIS MCM-41 E SBA-15 COMO SINTETIZADOS E MODIFICADOS COM ÍONS NÍQUEL E PRATA NA DESSULFURIZAÇÃO ADSORTIVA DE DIESEL	
Clenildo de Longe Rafael Viana Sales Anne Beatriz Figueira Câmara Adriano Santos de Sousa Leila Maria Aguilera Campos Maritza Montoya Urbina Tatiana de Campos Bicudo Luciene Santos de Carvalho	
<b>DOI 10.22533/at.ed.3602021054</b>	
<b>CAPÍTULO 5</b> .....	<b>43</b>
AVALIAÇÃO DO SENSOR BASEADO GRAFENO E COBRE PARA DETECÇÃO DE GLIFOSATO E AMPA	
Sarah Setznagl Ivana Cesarino	
<b>DOI 10.22533/at.ed.3602021055</b>	

<b>CAPÍTULO 6</b> .....	<b>57</b>
COMPORTAMENTO DE CONTAMINANTES ORGÂNICOS EM SUBSUPERFÍCIE	
Vivian Maria de Arruda Magalhães	
Oswaldo Chiavone Filho	
Marilda Mendonça Guazzelli Ramos Vianna	
<b>DOI 10.22533/at.ed.3602021056</b>	
<b>CAPÍTULO 7</b> .....	<b>76</b>
INVESTIGAÇÃO DA DEGRADAÇÃO DO FENOL EM MEIO AQUOSO UTILIZANDO PERÓXIDO DE HIDROGÊNIO E IRRADIAÇÃO SOLAR	
Julia da Silveira Salla	
Humberto Neves Maia de Oliveira	
André Luís Novais Mota	
Cláudio Augusto Oller do Nascimento	
Edson Luiz Foletto	
Oswaldo Chiavone-Filho	
<b>DOI 10.22533/at.ed.3602021057</b>	
<b>CAPÍTULO 8</b> .....	<b>89</b>
PRODUÇÃO DE NANOTUBOS DE CARBONO HIDROFÍLICOS	
Leila Cottet	
Luís Otávio de Brito Benetoli	
Nito Angelo Debacher	
<b>DOI 10.22533/at.ed.3602021058</b>	
<b>CAPÍTULO 9</b> .....	<b>98</b>
ÓXIDOS DO TIPO PEROVSKITA $Nd_{0,95}FeO_3$ E $Nd_{0,95}CrO_3$ PARA PRODUÇÃO DE GÁS DE SÍNTESE ATRAVÉS DA OXIDAÇÃO PARCIAL DO METANO	
Karina Tamião de Campos Roseno	
Rodrigo Brackmann	
Rita Maria de Brito Alves	
Reinaldo Giudici	
Martin Schmal	
<b>DOI 10.22533/at.ed.3602021059</b>	
<b>CAPÍTULO 10</b> .....	<b>107</b>
PRODUÇÃO DE ETANOL UTILIZANDO BAGAÇO DE SORGO BIOMASSA	
Cristian Jacques Bolner de Lima	
Charles Nunes de Lima	
Fernanda Maria da Silva Costa	
Érik Ramos da Silva de Oliveira	
Monique Virões Barbosa dos Santos	
<b>DOI 10.22533/at.ed.36020210510</b>	
<b>CAPÍTULO 11</b> .....	<b>118</b>
UTILIZAÇÃO DAS CINZAS PESADAS DE TERMOELÉTRICA COMO CATALISADOR EM REAÇÃO FOTO-FENTON PARA REMOÇÃO DE CORANTE TÊXTIL EM EFLUENTE AQUOSO	
Fernanda Caroline Drumm	
Patrícia Grassi	
Jivago Schumacher de Oliveira	
Julia da Silveira Salla	
Sérgio Luiz Jahn	
Edson Luiz Foletto	
<b>DOI 10.22533/at.ed.36020210511</b>	

**CAPÍTULO 12 ..... 128**

**AVALIAÇÃO DA PRODUÇÃO DE ETANOL A PARTIR DA SELEÇÃO DE UM CULTIVAR DE SORGO SACARINO NO ESTADO DE MATO GROSSO**

Cristian Jacques Bolner de Lima  
Fernanda Maria da Silva Costa  
Érik Ramos da Silva de Oliveira  
Francieli Fernandes  
Charles Souza da Silva  
Juniele Gonçalves Amador  
Monique Virões Barbosa dos Santos

**DOI 10.22533/at.ed.36020210512**

**CAPÍTULO 13 ..... 141**

**PRODUÇÃO DE BIOGÁS A PARTIR DA BIODIGESTÃO ANAERÓBICA DO LODO DA ESTAÇÃO DE TRATAMENTO DE ESGOTOS (ETE) DA UFRN**

Oscar Eduardo Reyes Cavalcanti  
Ana Beatriz de Gois Lima  
Thalita Gomes Ferreira  
Nathalia Souza Teixeira  
Rosangela Dala Possa  
Leila Maria Aguilera Campos  
Maritza Montoya Urbina  
Adriano Santos de Sousa  
Luciene Santos de Carvalho

**DOI 10.22533/at.ed.36020210513**

**CAPÍTULO 14 ..... 154**

**REMEDIAÇÃO DE SOLO CONTAMINADO COM NAFTALENO: ESTUDO COMPARATIVO DA APLICAÇÃO DE PROCESSOS OXIDATIVOS AVANÇADOS HOMOGÊNEO E HETEROGÊNEO**

Vivian Maria de Arruda Magalhães  
Gabriela Paupitz Mendes  
Rayanne Macêdo Aranha  
Oswaldo Chiavone Filho  
Marilda Mendonça Guazzelli Ramos Vianna

**DOI 10.22533/at.ed.36020210514**

**CAPÍTULO 15 ..... 170**

**SISTEMA AQUOSO BIFÁSICO: CONCEITOS, PROPRIEDADES E APLICAÇÕES NA PARTIÇÃO DE ÍONS METÁLICOS**

Ednilton Moreira Gama  
Roberta Pereira Matos  
Guilherme Dias Rodrigues

**DOI 10.22533/at.ed.36020210515**

**CAPÍTULO 16 ..... 179**

**UTILIZAÇÃO DE ANALOGIAS E ATIVIDADES CONTEXTUALIZADAS: UMA PERSPECTIVA DE APRIMORAMENTO DE COMPETÊNCIAS PARA O ENSINO DE POLÍMEROS**

Amanda Rebelo de Azevedo  
Vinicius Fernandes Moreira

**DOI 10.22533/at.ed.36020210516**

**CAPÍTULO 17 ..... 201**

PRODUÇÃO DE SABÃO UTILIZANDO ÓLEO RESIDUAL ORIUNDO DE PROCESSAMENTO DE MÁQUINAS DE FRANGO

Gisele Carvalho Conceição  
Thayssa Sales Cardoso  
Diego Ribeiro Nunes  
Ronald Almeida dos Santos  
Sérgio Vinicius Machado dos Santos  
Emanoel Oliveira de Aviz  
Arlesson Pereira da Silva  
Ronald Vieira Garcia  
Josiney Farias de Araújo  
Simonny do Carmo Simões Rolo de Deus  
Ricardo Jorge Amorim de Deus  
Manolo Cleiton Costa de Freitas  
Leandro Marques Correia

**DOI 10.22533/at.ed.36020210517**

**CAPÍTULO 18 ..... 221**

ANÁLISE COMPLEXOMÉTRICA DE ALUMÍNIO EM ARROZ COZIDO EM PANELAS DE ALUMÍNIO E/OU INOX, EM RESTAURANTES DE SÃO LUÍS – MA

Elis Cristina de Sousa Ferreira  
Ricardo Santos Silva  
Anna Karolyne Lages Leal  
Raissa Soares Penha Ferreira  
Maria do Socorro Nahuz Lourenço

**DOI 10.22533/at.ed.36020210518**

**CAPÍTULO 19 ..... 231**

A PRIMEIRA MODELAGEM MOLECULAR POR HOMOLOGIA DA PROTEÍNA VP4 DO VÍRUS CHANGUINOLA

Bruno Rafael Costa Guimarães  
Raul Alexandre Maciel Campos  
Jânio di Paula Cavalleiro de Macêdo dos Santos  
Adriano Santos da Rocha  
Alan Sena Pinheiro  
Jorddy Neves Cruz  
Sandro Patroca da Silva  
Davi Henrique Trindade Amador  
Miguel Braga  
Renato Araújo da Costa  
Elaine Cristina Medeiros da Rocha  
João Augusto Pereira da Rocha

**DOI 10.22533/at.ed.36020210519**

**CAPÍTULO 20 ..... 249**

POESIA COMO SIGNO ARTÍSTICO EM AULAS DE QUÍMICA

Elaine da Silva Ramos  
Carlos Eduardo Laburú

**DOI 10.22533/at.ed.36020210520**

**CAPÍTULO 21 ..... 261**

ALBERTO MAGNO IN CHEMICAL TEACHING: THE COMICS AS A LEARNING METHOD

Ednalva Dantas Rodrigues da Silva Duarte  
Ismael Montero Fernández

Cecilia Araujo

DOI 10.22533/at.ed.36020210521

**CAPÍTULO 22 ..... 269**

ESTUDO QUÍMICO DE PINTURAS RUPESTRES DO SÍTIO ARQUEOLÓGICO TOCA DA BAIXA DO CAJUEIRO POR FRX PORTÁTIL E SUAS IMPLICAÇÕES PARA A CONSERVAÇÃO

Maria Conceição Soares Meneses Lage

Wilkins Oliveira de Barros

Iasmin Maria Rodrigues de Sales Vieira

Anibal Gustavo Sousa Oliveira

Andressa Carvalho Lima

Benedito Batista Farias Filho

DOI 10.22533/at.ed.36020210522

**SOBRE A ORGANIZADORA..... 281**

**ÍNDICE REMISSIVO ..... 282**

## A PRIMEIRA MODELAGEM MOLECULAR POR HOMOLOGIA DA PROTEÍNA VP4 DO VÍRUS CHANGUINOLA

Data de aceite: 04/05/2020

Data de submissão: 17/04/2020

### **Bruno Rafael Costa Guimarães**

Instituto Federal de Educação, ciência e tecnologia do Pará Campus Bragança Bragança-PA

Link para o Currículo Lattes: <http://lattes.cnpq.br/1362010971392046>

### **Raul Alexandre Maciel Campos**

Instituto Federal de Educação, ciência e tecnologia do Pará Campus Bragança Bragança-PA

Link para o Currículo Lattes: <http://lattes.cnpq.br/8451497026855954>

### **Jânio di Paula Cavalleiro de Macêdo dos Santos**

Instituto Federal de Educação, ciência e tecnologia do Pará Campus Bragança Bragança-PA

Link para o Currículo Lattes: <http://lattes.cnpq.br/9322078784517634>

### **Adriano Santos da Rocha**

Instituto Federal de Educação, ciência e tecnologia do Pará Campus Castanhal Castanhal-PA

Link para o Currículo Lattes: <http://lattes.cnpq.br/5535745529748373>

### **Alan Sena Pinheiro**

Universidade Federal do Pará

Belém-PA

Link para o Currículo Lattes: <http://lattes.cnpq.br/8843196346750075>

### **Jorddy Neves Cruz**

Universidade da Amazônia Belém-PA

Link para o Currículo Lattes: <http://lattes.cnpq.br/2193062444490482>

### **Sandro Patroca da Silva**

Instituto Evandro Chagas Ananindeua-PA

Link para o Currículo Lattes: <http://lattes.cnpq.br/0476330416864057>

### **Davi Henrique Trindade Amador**

Instituto Federal de Educação, ciência e tecnologia do Pará Campus Tucuruí Tucuruí-PA

Link para o Currículo Lattes: <http://lattes.cnpq.br/8178097641642139>

### **Miguel Braga**

Instituto Federal de Educação, ciência e tecnologia do Pará Campus Bragança Bragança-PA

Link para o Currículo Lattes:

### **Renato Araújo da Costa**

Instituto Federal de Educação, ciência e tecnologia do Pará Campus Parauapebas Parauapebas-PA

Link para o Currículo Lattes: <http://lattes.cnpq.br/6578338979054891>

**Elaine Cristina Medeiros da Rocha**

Universidade Federal Rural da Amazônia Campus de Capanema

Capanema-PA

Link para o Currículo Lattes: <http://lattes.cnpq.br/3165652101046479>

**João Augusto Pereira da Rocha**

Instituto Federal de Educação, ciência e tecnologia do Pará Campus Bragança

Bragança-PA

Link para o Currículo Lattes: <http://lattes.cnpq.br/2843154716548835>

**RESUMO:** Os vírus são causadores de muitas doenças que assolaram a humanidade como a gripe espanhola, ebola, varíola e o sarampo. Dentre os diferentes grupos de vírus conhecidos estão as arboviroses, vírus transmitidos por artrópodes, sendo que no Brasil, já foram registrados 210 tipos diferentes de arbovírus e 34 são considerados patogênicos para o homem. Dentro desse grupo de vírus transmitidos por artrópodes, está o Vírus Changuinola (CGLV). Esse grupo, atualmente, consiste de 12 sorotipos registrados no Catálogo Internacional de arbovírus, sendo o Vírus Irituia considerado o sorotipo protótipo do CGLV no Brasil. Em 1966, o VCGL foi isolado do sangue de um paciente, apresentando uma síndrome febril, na região de Bocas Del Toro, Panamá, único caso de doença humana relatado por este até o presente momento. Neste estudo nos relatamos a estrutura tridimensional da proteína VP4 do vírus Changuionola obtida por modelagem por homologia. Para construção do modelo de proteína foi utilizado o servidor SWISS MODEL. O modelo obtido foi validado através do servidor MolProbity onde a identidade com o molde (PDB ID: 2JH8) foi de 57,1% e o gráfico de Ramachandran mostra 91,8% dos resíduos em regiões estereoquimicamente favoráveis. A literatura considera a predição aceitável quando a mesma apresenta valores acima de 25% e 80%, respectivamente. Dessa maneira os resultados foram satisfatórios ao predizer a conformação da VP4 do CGLV desse modo gerando novas possibilidades no entendimento do comportamento desse vírus.

**PALAVRAS-CHAVE:** Changuinola, Bluetongue, homologia, vírus, proteína.

## THE FIRST MOLECULAR MODELING BY HOMOLOGY OF THE CHANGUINOLA VIRUS VP4 PROTEIN

**ABSTRACT:** Viruses are simple organisms, but they are the cause of many diseases that have plagued mankind: the Spanish flu, Ebola virus, smallpox and measles. Among the different known virus groups are arboviruses, viruses transmitted by arthropods, and in Brazil, 210 different types of arbovirus have been registered and 34 are considered pathogenic for humans. Within this group of viruses transmitted by arthropods, there are some less known as Changuinola Virus (VCGL). This group currently consists of 12

serotypes registered in the International Arbovirus Catalog, the Irituia Virus considered the prototype serotype of the VCGL in Brazil. In 1966, VCGL was isolated from the blood of a human patient, presenting a febrile syndrome in the region of Bocas Del Toro, Panama, the only case of human disease reported by him to date. In this study, the sequence was obtained through pyro sequencing on the GSFlex 454 platform (Irituia serotype) for structural prediction through the SWISS MODEL server of the VCGL VP4 protein using as template the Bluetongue virus crystallographic model (PDB code: 2JH8). The obtained model was validated through the MolProbity server where the identity with the template was 57.1% and the Ramachandran graph shows 91.8% of the residues in stereochemically favorable regions. The literature considers the prediction to be acceptable when it presents values above 25% and 80%, respectively. In this way the results were satisfactory in predicting the conformation of VP4 of the VCGL thus generating new possibilities in the understanding of the behavior of this virus.

**KEYWORDS:** Changuinola, bluetongue, homology, virus, protein.

## 1 | INTRODUÇÃO

### 1.1 Características do Arbovírus

Os vírus são organismos simples, parasitas intracelulares obrigatórios possuindo apenas DNA ou RNA, sendo causadores de muitas doenças que assolaram a humanidade como, por exemplo, a gripe espanhola (causada pela virulência incomum de uma estirpe do vírus Influenza A.), vírus ebola, Síndrome da Imunodeficiência adquirida, varíola e o sarampo. No estado do Pará, as doenças mais graves causadas por vírus são a dengue e a febre amarela, pertencentes a classe dos arbovírus, que são transmitidos pelo mosquito *aedes aegypti*. (FIGUEIREDO, 2007; UJVARI 2012).

Os arbovírus (*arthropod borne virus*) são vírus capazes de se multiplicar no interior de vetores artrópodes hematófagos quando estes ingerem o sangue de vertebrados virêmicos. A maioria deles atualmente registrados encontra-se distribuídos dentro de cinco famílias: *Bunyaviridae*, *Flaviviridae*, *Reoviridae*, *Rhabdoviridae* e *Togaviridae*, no entanto, nem todos os vírus que fazem parte destas, são necessariamente arbovírus. Esta classe apresenta uma ampla distribuição geográfica, geralmente encontrada em áreas tropicais dependendo de muitos fatores: umidade, temperatura, altitude, diversidade de hospedeiros vertebrados (mamíferos, aves, anfíbios e répteis) e invertebrados (ex. mosquitos e carrapatos). (FIGUEIREDO 2007; de Andrade et al, 2016; Silva, 2013).

O Brasil possui uma grande extensão terrestre, predominante em uma área com regiões tropicais e extensas florestas na Região Amazônica, além das regiões de

cerrado, pântano e caatinga no nordeste. A maior parte do país tem um clima tropical, sendo favorável para a existência de vetores. Além disso, outros fatores também levam a ampliação da transmissão das arboviroses; rápidas mudanças climáticas, desmatamento, aumento da migração populacional, ocupação desorganizada das áreas urbanas e condições sanitárias desfavoráveis. (Figueiredo 2000; Lopes et al 2014)

## 1.2 A família *Reoviridae*

A família *Reoviridae* é uma das mais complexas dentro das suas características biológicas e moleculares, com representantes que podem infectar mamíferos, aves, répteis, anfíbios, peixes, invertebrados e plantas. Esta família é composta por 11 gêneros dos quais somente cinco atingem vertebrados (*Orthoreovirus*, *Orbivirus*, *Rotavirus*, *Coltivirus* e *Aquareovirus*). Destes apenas os *Orbivirus* e *Rotavirus* ocasionam infecções e pela gravidade dos sinais clínicos, são considerados importantes em mamíferos (Flores 2007; Silva 2013).

## 1.3 O gênero *Orbivirus*

Os orbívirus constituem um dos gêneros da família *Reoviridae*. Esse gênero infecta uma variedade de ruminantes domésticos e selvagens, equídeos, roedores, morcegos, primatas, marsupiais e aves. Além disso, são transmitidos primariamente por vetores artrópodes como mosquitos, culicídeos, flebotomíneos e carrapatos, no entanto a infecção nestas espécies não apresenta efeitos destrutivos evidentes. (Flores 2007)

Os orbívirus apresentam maior importância na medicina veterinária do que médica, visto que as infecções são mais presentes em mamíferos herbívoros (gado bovino, equinos e ovinos) encontrados na África, Austrália, e na América Central e do Sul.

Segundo Mário (2013) as perdas mundiais econômicas devido as infecções por este gênero não foram expressas em números exatos, mas a estimativa é de três bilhões de dólares por ano nos Estados Unidos. As perdas são tanto diretas (óbitos, abortamento, perda de peso, produção de leite reduzida e queda na eficiência da produção de carne) quanto, o mais importante, indiretas, como resultado das restrições à exportação de animais vivos, sêmen e hemoderivados. Este fato implica em uma importância comercial, pois as doenças causadas por esses vírus como a doença da língua azul provocam uma queda na produção por afetarem o desenvolvimento desses animais, podendo levá-los a morte.

A tabela 1 mostra alguns vírus e suas respectivas doenças causadas (Maclachlan & Guthrie, 2010). Esse gênero também apresenta infecções humanas

que foram relatadas por serem transmitidas por carrapatos, estes vírus são da espécie *Changuinola*, *Great Island*, *Corriparta*, *Lebombo* e *Orungo*. (Tabela 1).

O *Bluetongue virus* BTV é o mais estudado em termos de aspectos estruturais, funcionais e genéticos sendo considerado o protótipo do gênero *Orbivirus*. (Attoui *et al.*, 2005).

VÍRUS	SIGLA	DOENÇA CAUSADA
<i>African horse sickness virus</i>	AHSV	Peste equina africana
<i>Bluetongue virus</i>	BTV	Doença da língua azul
<i>Peruvian horse sickness virus</i>	PHSV	Vírus Peruano da doença do cavalo
<i>Epizootic hemorrhagic disease virus</i>	EHDV	Doença hemorrágica epizootica
<i>Equine encephalosis virus</i>	EEV	Encefalose equina
<i>Corriparta virus</i>	CORV	_____
<i>Changuinola virus</i>	CGLV	_____
<i>Lebombo vírus.</i>	LEBV	_____
<i>Orungo virus</i>	ORUV	_____

Tabela 1 - Espécies virais registradas no ICTV (Comitê internacional de taxonomia dos vírus) pertencentes ao gênero *Orbivirus*, com suas respectivas siglas para facilitar a identificação e os nomes das doenças causadas.

Fonte: Comitê internacional de taxonomia dos vírus. 2012

O BTV e o CGV pertencem ao mesmo grupo, por isso apresentam semelhanças na composição do seu genoma. O BTV possui sete proteínas estruturais (VP1, VP2, VP3, VP4, VP5, VP6 e VP7) organizadas em camadas do capsídeo, como está disposto na figura 1. A VP1, VP3, VP4 e VP6, se encontram na camada interna ou núcleo e a VP2, VP5 e VP7 estão distribuídas nas outras camadas (Capriles, 2014)

As VP1, VP4 e VP6, são responsáveis pela replicação do genoma viral, sendo VP7 a mais presente que constitui o núcleo, e possui os principais determinantes antigênicos específicos do grupo. Além de fazer parte do núcleo, ela se encontra exposta em algumas regiões da superfície viral sendo capaz de estimular a produção de anticorpos. Localizadas no interior do subnúcleo, as proteínas VP1, VP4 e VP6 estão presentes em pequenas quantidades. ( Capriles, 2014; Silva 2013)

A VP1 é a proteína com maior massa do BTV e, com base em sua massa, localização, concentração molar no núcleo e sequência de aminoácidos, acredita-se

que seja a RNA polimerase viral. Essa proteína seria a responsável pela transcrição e replicação do genoma durante a replicação viral nas células hospedeiras. (Flores 2007; Maclachlan & Guthrie, 2010; Zhang *et. al.*, 2010).

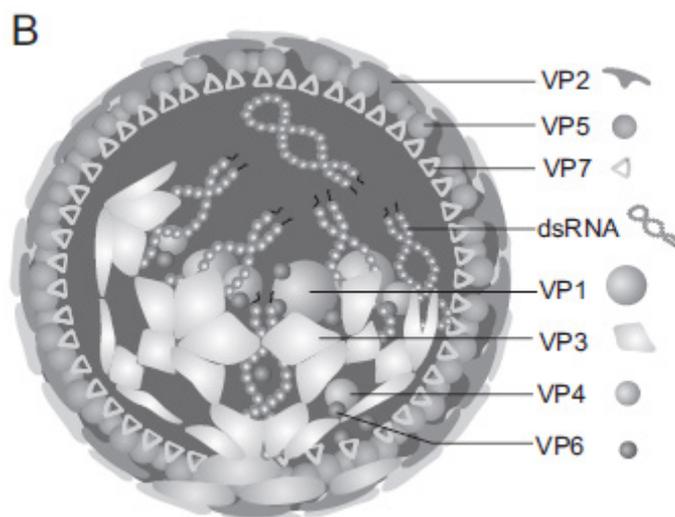


Figura 1: Ilustração esquemática da estrutura de uma partícula viral indicando os elementos constituintes.

Fonte: Adaptado de Roy 2001.

#### 1.4 O Vírus Changuinola (CGLV)

O Vírus protótipo do grupo Changuinola, foi isolado pela primeira vez *em 1960* no Panamá através de um mosquito da espécie *Lutzomyia*, logo após em 1961, na Bacia Amazônica um agente antigênico relacionado, o Vírus *Irituia*, foi recuperado de um roedor da espécie *Oryzomys Goeldi*. Em 1966 o CGLV foi isolado do sangue do único paciente humano (apresentando síndrome febril) registrado até momento. Este caso foi relatado durante um levantamento feito na cidade de Almirante, região Bocas Del Toro, Panamá. (Silva, 2013).

O grupo Changuinola possui 12 sorotipos registrados no Catálogo Internacional de Arboviroses (CIA), sendo que destes, 11 foram isolados no Brasil, além do CGLV isolado no Panamá. Além destes reconhecidos pelo CIA, mais 48 sorotipos ligados ao CGLV foram identificados na Amazônia Brasileira. Por apresentar apenas um caso em um paciente humano, é desconhecida a existência de agentes causadores de infecção em humanos, ou em outros vertebrados, por isso pouco se sabe seu papel biológico na história natural até o presente momento. (Travassos da Rosa, 1985).

Os estudos que existem sobre o CGLV se limitam a identificação sorológica deste vírus, e os trabalhos no âmbito da biologia molecular são poucos, baseando-se apenas no estudo da proteína VP1 que se encontra abundante no núcleo. (Silva 2013; Travassos da Rosa, 1985)

Como a proteína VP4 do CGLV não apresenta dados estruturais no PDB, será realizada a predição da sua estrutura tridimensional por homologia, comparando a sequência aminoacídica obtida experimentalmente através de piro sequenciamento da plataforma 454 GSFlex (sorotipo Irituia), com a proteína do BTV. Os dados estruturais da VP4 obtidos nesta pesquisa serão utilizados nos estudos do mecanismo biológico, da replicação e das infecções causadas pelo mesmo, possibilitando o desenvolvimento de possíveis vacinas para a profilaxia desse vírus. (SILVA, 2013)

Desta forma, o estudo sobre a estrutura da proteína VP4 do *Changuinola Vírus* almejada neste trabalho servirá como base para o estudo molecular e biológico no comportamento deste vírus, além de contribuir na compreensão deste agente na saúde animal e humana.

## 2 | METODOLOGIA

### 2.1 Modelagem comparativa ou por homologia.

É a ferramenta mais utilizada para a predição de estruturas tridimensionais através de moldes (estruturas primárias) obtidas experimentalmente. A qualidade da estrutura elaborada nesse processo dependerá do grau de homogeneidade das sequências entre a proteína com estrutura já definida, (proteína-molde) e a proteína a qual se deseja modelar (proteína-alvo) (WERNER, 2012).

Para conhecer o papel biológico desempenhado pela proteína é necessário que se conheça as suas estruturas, pois sabe-se que elas estão profundamente ligadas, então este método é empregado para a determinação estrutural de sequências, a partir de uma ancestral em comum devido à similaridade proteica. (HILLISCH et al., 2004).

#### 2.1.1 A obtenção da sequência

Utilizou-se a sequência fasta indicada na figura 2, adquirida experimentalmente a partir do Irituia (Sendo gentilmente fornecida para o trabalho pelo Dr. Sandro Patroca da Silva, Pesquisador do Instituto Evandro Chagas) como proteína alvo, para ser modelada através de uma proteína primária que será identificada pelo servidor PDB. (DE SOUZA, 2008; WERNER, 2012).

```
PEPHAVIYLTNELVQVILHAFLPKWRLTGAETLNDLWLQNGLYHYDVYAY  
GEISRWSYRQLRGHGFI FVSTRKRIKLADGEVEVDILLKSTFIHGTTKQL  
ETEIGRRRLRLRKGF GDILRKYAFMVSKVLNGSEAETLNDADYKIHRVCG  
LPAKPPVYGDGCEISYRRDGGTDEKLVSM LDYMIYSANEIHYVGCGLRT  
LLKFKKRSEKRFNQVEWHVYDKIVKYIDL PNVRIHNHFVYKASDIMKNVD  
VSKKRERLLIWDVSTDRIAHTNLEWDAHRGREDRLGEVIATELEGMFALA  
LIKHRIPTNIESYRCVTSHLIPQPGAPHDMFELRNVIRLSGF . . . .
```

Figura 2: sequência Fasta obtida experimentalmente através de piro sequenciamento da plataforma 454 GSFlex do sorotipo Irituia.

### *2.1.2 Alinhamento de sequências e a identificação da estrutura primária homóloga.*

O alinhamento é um processo fundamental na busca por modelos homólogos, pois nele, estipula-se a correspondência dos resíduos entre a sequência molde e a alvo. Nesta etapa executou-se o alinhamento unidimensional nos servidores (*Protein Data Bank (PDB)*, *Swiss Model*) para sobrepor sequências aminoacídica com a finalidade de encontrar os moldes similares (OLIVEIRA, 2002; Altschul et al, 1990).

Nesta estudo foi adotado o alinhamento global, este é realizado entre duas ou mais sequências de aminoácidos, feita por inteiro de uma ponta a outra do ramo, com objetivo de encontrar regiões mais conservadas das sequências homólogas que apresentam um alto grau de similaridade em todo seu comprimento. (MUNIZ, 2003).

Sendo assim o servidor PDB encontrou a proteína VP4 do vírus Bluetongue (BTV) depositada sob o código 2JH8 obtida pelo método de difração de raios-X, como sendo a mais homóloga com 57,10% de similaridade.

### *2.1.3 Construção do modelo*

Na construção da proteína-problema, o servidor usa o molde mais similar para produzir uma estrutura de melhor qualidade, ou seja, quanto maior o grau de identidade e similaridade, melhor é a predição estrutural. Neste trabalho foi utilizado o servidor SWISS-MODEL para realizar a construção, pois ele apresenta um bom conjunto de ferramentas que podem ser utilizados neste trabalho (WERNER 2010)

O SWISS MODEL (SM) é um servidor automatizado que procura em múltiplos bancos de dados, moldes que podem ser utilizados, além de possuir a função de construir os modelos similares utilizando o método de corpos rígidos (GIBAS e JAMBECK, 2001; GUEx & PEITSCH, 1997).

A partir da identificação do molde mais similar, o servidor construiu o modelo

alvo, a partir do que foi identificado como mais similar, no caso o 2JH8 com 57.10% de similaridade entre os resíduos.

#### 2.1.4 Validação do modelo

A qualidade de um modelo é determinada por um conjunto de fatores energéticos e funcionais, tais como qualidade estereoquímica, nível do empacotamento de resíduos e confiabilidade do enovelamento. (SILVA & SILVA, 2007).

Dentre as análises as seguintes foram recomendadas:

- **Qualidade estereoquímica:** Verificar os aspectos tridimensionais das moléculas e examinar a estabilidade conformacional das mesmas, a fim de analisar regiões de tensão angular e torcional, e quirality. Neste contexto é utilizado o gráfico de Ramachandran para identificar a correlação entre os ângulos da proteína além de orientar a avaliação da qualidade para modelos teóricos e experimentais de proteínas, definindo os resíduos que se encontram nas regiões energeticamente favoráveis, desfavoráveis e permitidas, possibilitando uma melhora no modelo final. (Laskowski et al, 1993). Exemplos de programas que são utilizados incluem-se Procheck e o Molprobit.
- **Análises Energéticas:** São métodos baseados em minimização de funções de energia. É considerada a relação entre a estrutura 1D-3D, atentando-se a capacidade de cada aminoácido estar em um tipo de estrutura secundária, ou seja, a probabilidade de dois resíduos estarem em contato e até mesmo o tipo de função que a proteína desempenha. Alguns programas bastante usados para estas análises incluem Verify3D, QMEAN, GMQE, PROVE e PProQ. (HÖLTJE, et al., 2003; SILVA & SILVA, 2007; Melo e Feytmans, 1997).

Dentre os softwares citados, os usados neste trabalho estão o MOLPROBITY, VERIFY3D, QMEAN e GMQE.

O MOLPROBITY avalia parâmetros estereoquímicos de devido interesse como, cadeias laterais e os ângulos de torção da cadeia principal, gerando o gráfico de Ramachandran (RAMACHANDRAN & SASISEKHARAN, 1968 ;Laskowski et al, 2005).

O VERIFY3D determina os ambientes químicos de cada resíduo do modelo e atribui “scores” com referência a uma matriz construída a partir de uma análise estatística envolvendo estruturas proteicas do PDB. Nessa matriz estão inclusas três propriedades que cada aminoácido apresenta dentro de 18 ambientes químicos diferentes. Este *software* detecta regiões de baixa qualidade. A soma dos *scores* obtidos é comparada à um valor ideal esperado, sendo assim o resultado deve ser maior que 45 %, que é a faixa encontrada para estruturas de boa qualidade (LUTHY, et al., 1992; Laskowski et al, 2005).

O GMQE (Global Model Quality Estimation) (programa do servidor SM) é a pontuação resultante expressa como um valor adimensional entre 0 e 1, refletindo

a precisão do modelo construído, valores mais altos indicam maior confiabilidade (Waterhouse et al, 2018). O QMEAN (programa do servidor SM) e o QMEANscore6 são estimadores compostos baseado em propriedades geométricas e fornece estimativas de qualidade, para toda a estrutura ou por resíduo com base no molde, Pontuações (valores adimensionais) de -4.0 ou abaixo são uma indicação de modelos com baixa qualidade. (Benkert et al, 2011)

### 3 | RESULTADOS E DISCUSSÕES

#### 3.1 Alinhamento e construção do modelo

Logo após a identificação da sequência alvo, esta foi submetida ao servidor PDB, com a finalidade de encontrar o molde mais similar, no qual foi usado como base na construção do modelo alvo. Servidor supracitado forneceu a proteína VP4 do *Bluetongue vírus* depositado sob o código 2JH8, contendo a maior porcentagem de identidade, com 56.5%. A figura 3 mostra imagem tridimensional da proteína molde.

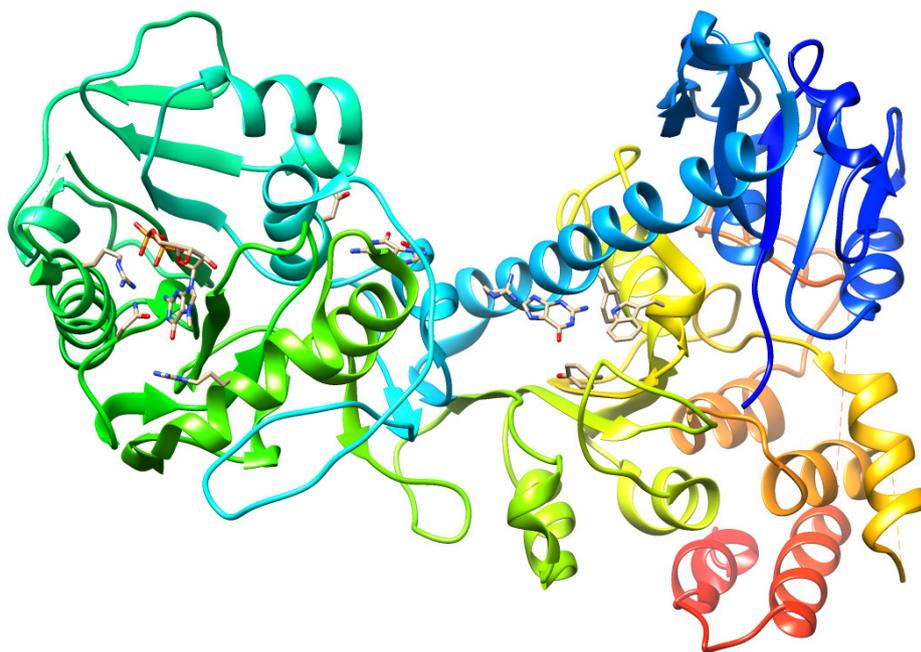


Figura 3: Ilustração da estrutura tridimensional da proteína 2JH8.

Fonte: Imagem produzida pelo programa chimera 1.12 a partir do arquivo pdb. da proteína 2JH8.

Antecipando o processo de construção do modelo, utilizamos o SM, para também procurar moldes homólogos a partir da sequência alvo. O servidor nos apontou o mesmo molde encontrado no PDB, com 56,5% de identidade entre os resíduos, sendo que para modelos de boa qualidade consideram-se valores acima de 25%. Antes da localização da estrutura primária, o programa automaticamente

realiza o alinhamento unidimensional entre a sequência alvo e o molde a fim de encontrar a porcentagem de similaridade residual. A Figura 4 tirada da página do SWISS MODEL apresenta o alinhamento aminoacídico. (PACHECO 2009).



Figura 4: - Alinhamento unidimensional das sequencias aminoacídicas.

Fonte: [www.expasy.org/swissmod/SWISS-MODEL.html](http://www.expasy.org/swissmod/SWISS-MODEL.html)

Neste alinhamento, foi submetido no servidor o arquivo da proteína 2JH8 no formato pdb.,. Desta forma o SWISS MODEL, calcula o alinhamento entre o alvo (target) e o molde carregado no programa (template\_upload), fornecendo o grau de similaridade, sendo este 57.10%.

Assim que o servidor em questão localizou o molde, iniciou-se a produção do modelo alvo por homologia. A figura 5 elucida o modelo tridimensional construído a partir do homólogo. A figura 6 mostra o alinhamento tridimensional realizado no programa chimera 1.12 entre o molde e o modelo construído mostrando a similaridade estrutural entre elas.

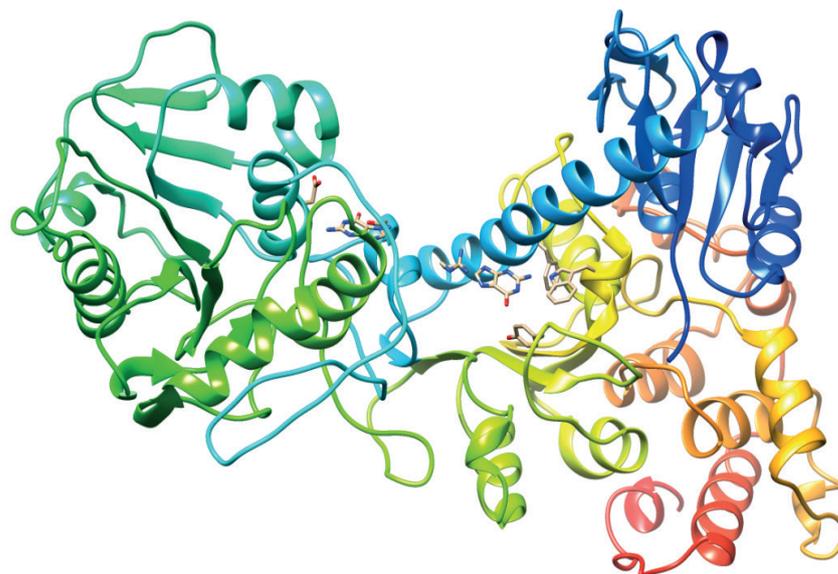


Figura 5: Ilustração da estrutura tridimensional do modelo alvo.

Fonte: Imagem produzida pelo programa chimera 1.12 a partir do arquivo pdb da proteína alvo do CGLV

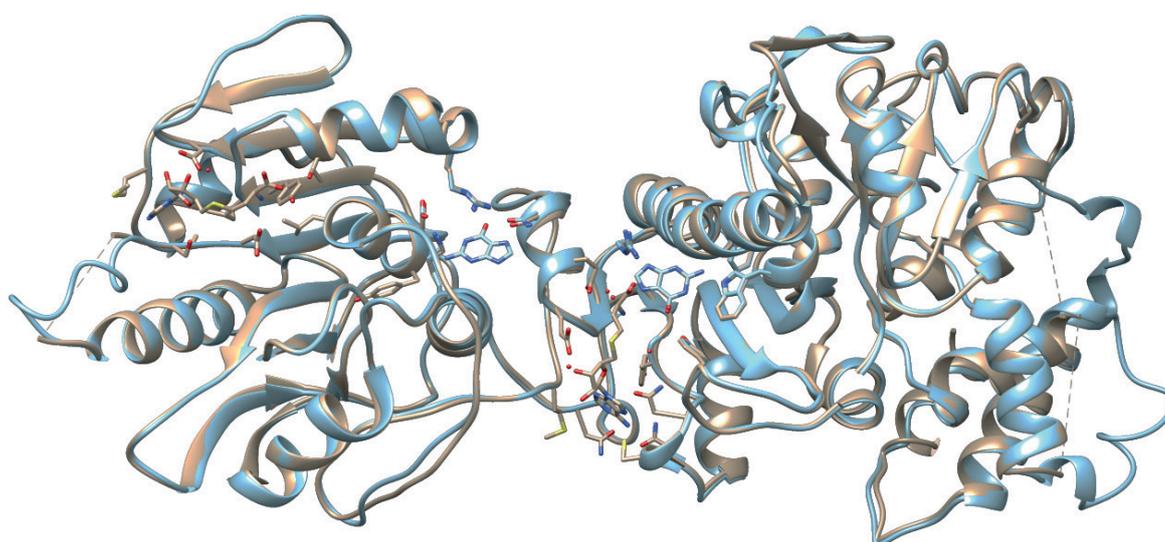


Figura 6: Alinhamento tridimensional entre o molde 2jh8 e o modelo do CGLV elucidado. ■

Molde 2jh8 ■ Modelo construído

Fonte: Imagem produzida pelo programa chimera 1.12

### 3.2 Validação do modelo

O GMQE expressa a pontuação de estimativa global da estrutura, avaliada entre 0 para modelos não válidos e 1 para modelos excelentes, o valor obtido no servidor foi de 0,77. A literatura considera o modelo de boa qualidade. O QMEAN apresentado é -2,75, sendo considerado válido acima de - 4,0. A figura 7 mostra a estimativa de qualidade local, ou seja, por resíduo.

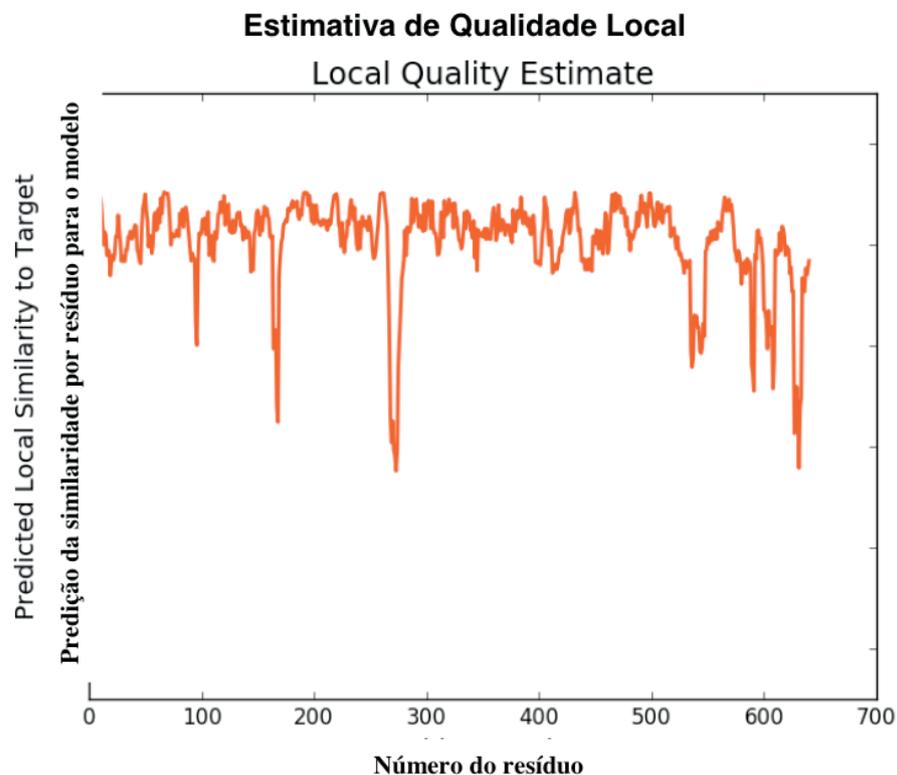


FIGURA 7: Estimativa de Qualidade local. Número do resíduo X Predição da similaridade por resíduo para o modelo.

entre o molde e o modelo de 0 a 1 (se multiplicado por 100, nos informa o valor em porcentagem de 0% a 100%), ou seja, quanto mais se distancia da de  $y_0$  (origem do eixo y) melhor é a qualidade residual. A média dos valores da predição por resíduo é igual a 0.77 que corrobora com o GMQE. A figura 8 indica a pontuação local do QMEAN, indicando valores próximos de 1 na maioria dos resíduos. O servidor MOLPROBITY gerou o gráfico de Ramachandran (figura 9), indicando que 91,8% dos resíduos da estrutura alvo, localizam-se em zonas energeticamente favoráveis, e 98,3% em zonas permitidas. Para o molde, os valores foram de 74,5% e 97.3% para zonas energeticamente favoráveis e zonas permitidas respectivamente.

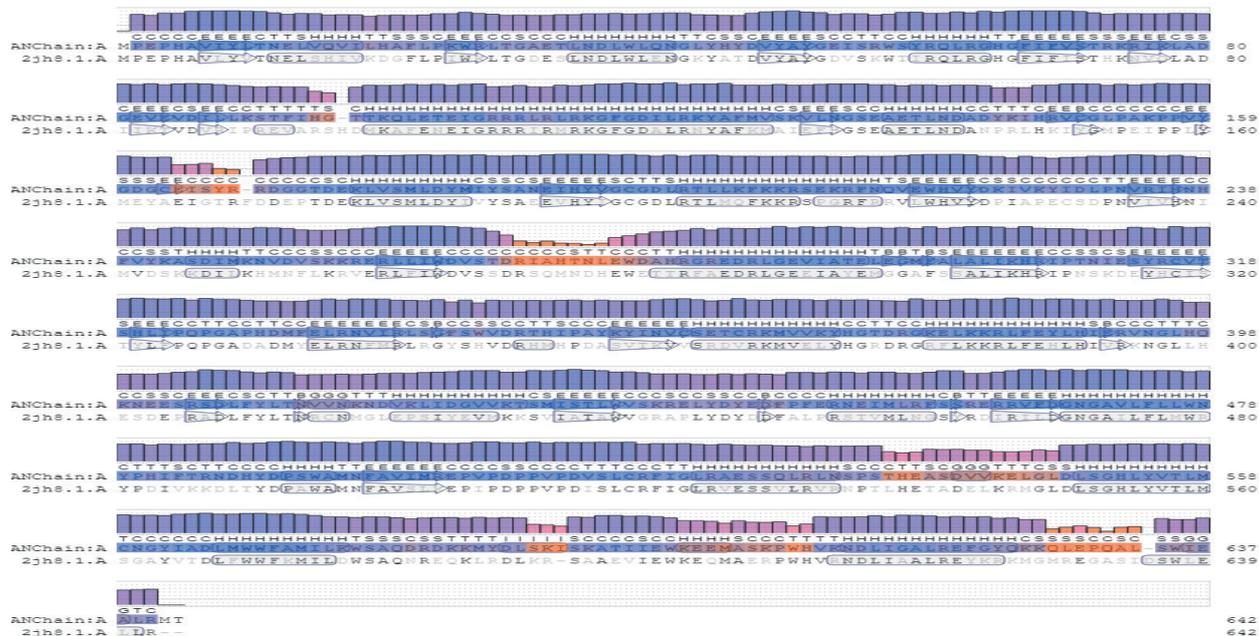


FIGURA 8: Indica valores de QMEAN por aminoácido. Regiões de cores em azul escuro mostram zonas com baixa energia, e regiões em tons vermelhos e laranja, são de alta energia

(A)

(B)

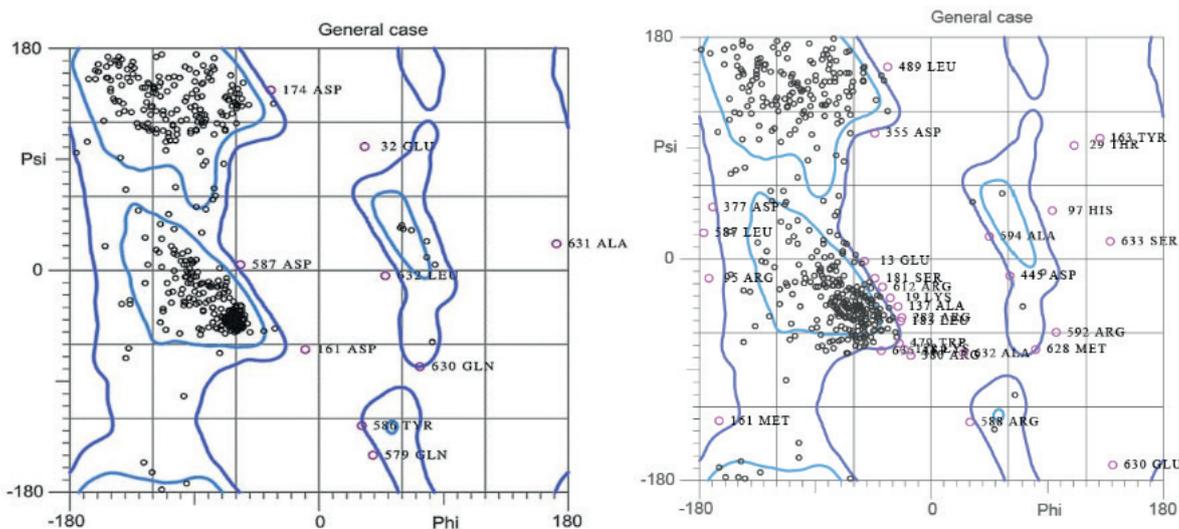


FIGURA 9: Gráfico de Ramachandran. (A) modelo construído. (B) molde 2JH8

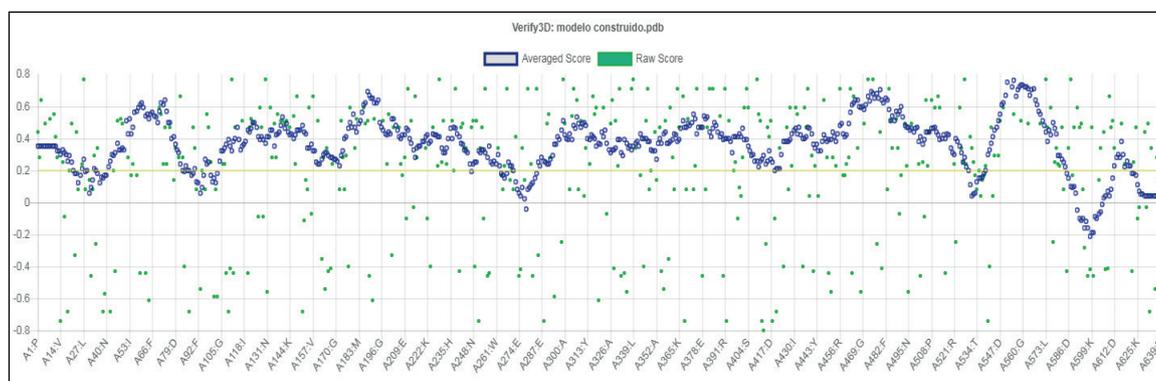
O servidor VERIFY3D determina a compatibilidade de um modelo atômico (3D) com sua própria sequência de aminoácidos (1D), atribuindo uma classe estrutural baseada em sua localização e ambiente (alfa, beta, loop, polar, não polar etc) e comparando os resultados a boas estruturas. Simulando ambientes químicos diversos, o servidor aponta valores adimensionais para cada aminoácido de acordo com a sua localização, utilizando como resultado a média destes. Adotando um valor médio fixo de 0,2 o servidor considera que no mínimo 45% dos resíduos devem ter a pontuação média de 0,2.

Submetendo os arquivos *pdb*. das proteínas 2JH8 e do CGLV no Verify3D, o servidor informou que 59% dos resíduos do molde 2JH8 (BTV) e 84,51% do modelo

(CGLV) , tiveram a pontuação acima da média. A figura 10 indicam as pontuações individuais e quantidade dos resíduos que estão acima ou abaixo do valor de 0,2.

Na tabela 2 estão dispostos todos os resultados do processo de modelagem molecular por homologia; Identidade, Similaridade, GMQE, QMEAN, RAMACHANDRAN e VERIFY 3D.

(A)



(B)

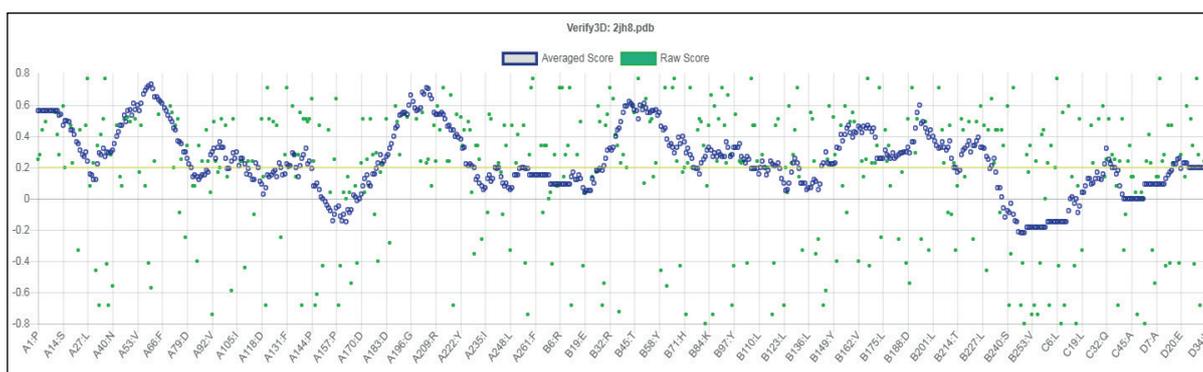


FIGURA 10: Gráfico de pontuações individuais por resíduo. (A) modelo construído. (B) molde 2JH8.

	2JH8	MODELO
<b>Identidade</b>	55,25%	
<b>Similaridade</b>	57,10%	
<b>GMQE</b>	-	0,77
<b>QMEAN</b>	-	-2,75
<b>RAMACHANDRAN</b>		
<b>Reg. favoráveis</b>	74,5%	91,8%
<b>Reg. permitidas</b>	93,7%	98,3%
<b>VERIFY 3D</b>	59%	84,51%

TABELA 2: Valores obtidos no processo de modelagem molecular do molde 2JH8 e do Modelo elucidado: identidade, similaridade, GMQE, QMEAN, Ramachandran; regiões favoráveis e permitidas, Verify 3d.

## 4 | CONCLUSÃO

O modelo tridimensional das proteínas VP4 do vírus Changuinola foi construído a partir da proteína VP4 do Vírus Bluetongue, sendo esta identificada como molde nos servidores PDB e SM, a partir da sequência de aminoácidos obtida de forma experimental. Foram encontrados os valores de 54% e 56,5% de identidades e realizada a média para diminuir o erro entre eles, o valor calculado foi de 55,25%, valor acima do que a literatura prediz, pois devem ser considerados valores maiores de 25% para os modelos aceitáveis. Os valores de GMQE e QMEAN foram consideravelmente acima do mínimo exigido.

Os gráficos de estimativa por resíduo (figuras 7 e 8) indicam que grande parte dos aminoácidos possuem valores próximos à 1.

No processo de validação foram identificados que 91,8% dos resíduos encontra-se em regiões energeticamente favoráveis, sendo que acima de 90% o resultado é satisfatório, mesmo que o molde se encontra abaixo do valor esperado, a modelagem é considerada válida.

Na verificação da qualidade tridimensional do modelo, o gráfico gerado pelo VERIFY3D indicou que 84,51% dos resíduos apresentam valores médios na sua pontuação de 0,2. A estrutura primária ( 2JH8 ) indicou 59%, notavelmente abaixo. Apesar disto o valor para a estrutura alvo verificou-se acima de 45%, que é considerado para modelos de boa qualidade.

Desta forma foi possível prever com confiabilidade o modelo estrutural da proteína VP4 do Vírus Changuinola e assim, melhor compreender a estrutura proteica BTV. Dessa maneira gerando novas possibilidades de estudos futuros a nível de dinâmica molecular para ambos os vírus. Contribuindo para o melhoramento da saúde humana e animal.

## REFERENCIAS

ALTSCHUL, S.F.; GISH, W.; MILLER, W.; MYERS, E.W.; LIPAMAN, D.J. **Basic local Alignment search tool**. Journal Molecular Biology. v. 215, p. 403, 1990.

Benkert, P., Biasini, M., Schwede, T. **Toward the estimation of the absolute quality of individual protein structure models**. Bioinformatics 27, 343-350, 2011.

BERMAN, H. M.; WESTBROOK, J.; FENG, G.; GILLILAND, G.; BHAT, T.N.; WEISSIG, H.; SHINDYALOV, I. N.; BOURNE, P. E. **The Protein Data Bank**. *Nucleic Acids Res.* V. 28, p. 235-242, 2000.

Capriles P. V. S. Z., Trevizani R., Rocha G. K., Dardenne L. E., Custódio F. L. **Bioinformática da biologia a flexibilidade molecular : Modelos tridimensionais**. Sociedade Brasileira de Biologia e Bioquímica Molecular. V1, P 147-171. 2014

DE ANDRADE, P. P., F. J. L. Aragão, W. Colli, O. A. Dellagostin, F. Finardi-Filho, M. H. Hirata, A. de

Castro Lira-Neto, M. A. de Melo, A. L. Nepomuceno and F. G. da Nóbrega. **“Use of transgenic *Aedes aegyptii* in Brazil: risk perception and assessment.”** Bulletin of the World Health Organization **94**(10): 766-771.,2016.

DE SOUZA, Mariana Laureano. Modelagem por Homologia de Estruturas Proteicas do Veneno de *Apis mellifera*. Tese (Monografia) - Universidade de São Paulo, Faculdade de Filosofia, Ciências e Letras de Ribeirão Preto, Faculdade de Medicina de Ribeirão Preto, Departamento de Genética Informática Biomédica, Ribeirão Preto, 2008.

FIGUEIREDO, L. T. M.. “Emergent arboviruses in Brazil.” **Revista da Sociedade Brasileira de Medicina Tropical** 40(2): 224-229, 2007.

Figueiredo, L. T. M.. **The Brazilian flaviviruses.** *Microbes Infect.* 2(13):1643-9. 2000

FLORES, E.S. **Virologia veterinária.** 1 ed. Santa Maria: UFSM,2007.

FORESMAN, J. B.; FRISCH, A.E. **Exploring Chemistry With Electronic Structure Methods 2.** Ed. Pittsburgh, Gaussian, Inc. 1996.

GUEx, N.; PEITSCH, M. C. **Swiss-Model And The Swiss-Pdb viewer: An Environment For Comparative Protein Modeling.** *Electrophoresis*, n.18, p. 2714-2723, 1997.

GIBAS, C.; JAMBECK, P. **Desenvolvendo Bioinformática: ferramentas de software para aplicações em biologia.** Tradução Milarepa Ltda.- Rio de Janeiro: Campus, 2001.

HEHRE, W. J.; et al. **Abinitio Molecular Orbital Theory.** New York: Wiley, 1986.

HILLISCH, A.; PINEDA, L. F.; HILGENFELD, R. **Utility of homology models in the drug discovery process.** *Drug Discovery Today.* v. 09, p. 659-669, 2004.

HÖLTJE, H. D.; SIPPL, W.; ROGNAN, D.; FOLKERS, G. **Introduction to comparative protein modeling. In *Molecular Modeling: Basic Principles and Applications.*** Weinheim: Wiley-VCH, 2003.

INOUE, A. G. O.; KIYOSHI, M. **Laboratório de Bioinformática do Projeto Genoma Funcional e Diferencial do Fungo *Paracoccidioides brasiliensis* - Projeto Genoma Pb** - Universidade de Brasília, 2002.

LASKOWSKI, R. A.; MACARTHUR, M. W.; MOSS, D. S.; THORNTON, J. M. **PROCHECK: A Program to Check the Stereochemical Quality of Protein Structures.** *Journal Applied Crystal Structure.* v. 26, p. 283-291, 1993.

LASKOWSKI R A, CHISTYAKOV V V, THORNTON J M. **PDBsum more: new summaries and analyses of the known 3D structures of proteins and nucleic acids.** *Nucleic Acids Res.*, 33, D266-D268, 2005.

FORESMAN, J. B.; FRISCH, A.E. **Exploring Chemistry With Electronic Structure Methods 2.** Ed. Pittsburgh, Gaussian, Inc. 1996.

LUTHY, R., BOWIE, J.U.; EISENBERG, D. **Assessment of protein models with three-dimensional profiles.** *Nature.* 356: 83-85, 1992.

MACLACHLAN, N.J., GUTHRIE, A.J. **Re-emergence of bluetongue, African horse sickness, and other Orbivirus diseases.** *Veterinary Research.* 41:1-12, 2010.

MELO, F.; FEYTMANS, E. **“Novel knowledge-based mean force potential at atomic level”.** *Journal*

of Molecular Biology. n. 267, p. 207-222, 1997.

OLIVEIRA, D. C. **Alinhamento de Sequências: Monografia: Departamento de Ciência da Computação da Universidade Federal de Lavras**, 2002.

PACHECO, A. G. M. Tese (Doutorado) – Universidade Estadual de Feira de Santana. Programa de Pós-Graduação de Biotecnologia. **Modelagem Molecular Comparativa e estudos de acoplamento molecular da enzima lanosterol 14 $\alpha$ -desmetilase do moniliophthora pernicioso**. Feira Santana, 2009.

RAMACHANDRAN, G. N.; SASISEKHARAN, V.; **Advances in Protein Chemistry**. v. 23, p. 283, 1968.

SÁNCHEZ, Roberto; ŠALI, Andrej. **Comparative protein structure modeling in genomics**. Journal of Computational Physics, v. 151, n. 1, p. 388-401, 1999.

SILVA, S.P da. **Caracterização genética de 13 vírus pertencentes ao grupo changuinola (reoviridae, orbivirus)**. Tese (Doutorado) – Universidade Federal do Pará, Instituto de Ciências Biológicas, Programa de Pós-Graduação em Biologia de Agentes Infecciosos e Parasitários, Belém, 2013.

SILVA, V. B.; SILVA, C. H. T. P. **Modelagem molecular de proteínas-alvo por homologia estrutural**. Revista Eletrônica de Farmácia, v. 04, p. 15-26, 2007.

TRAVASSOS DA ROSA, A.P.A., TESH, R.B., PINHEIRO, F.P., TRAVASSOS DA ROSA, J.F.S., PERALTA, P.H., KNUDSON, D.L. **Characterization of the Changuinola serogroup viruses (Reoviridae: Orbivirus)**. Intervirology. 21: 38-49, 1984.

UJVARI, S.C. **A história da humanidade contada pelos vírus bactérias, parasitas e outros microrganismos**. 1 ed. São Paulo: Contexto, 2012.

WATERHOUSE, A., BERTONI, M., BIENERT, S., STUDER, G., TAURIELLO, G., GUMIENNY, R., HEER, F.T., DE BEER, T.A.P., REMPFER, C., BORDOLI, L., LEPORE, R., SCHWEDE, T. **SWISS-MODEL: homology modelling of protein structures and complexes**. Nucleic Acids Res. 46(W1), W296-W303 (2018).

WERNER, T.; MORRIS, M.B.; DASTMALCHI, S.; CHURCH, W.B. **Structural modelling and dynamics of proteins for insights into drug interactions**. Advanced Drug Delivery Reviews, V. 64, P. 323-343, 2012.

ZHANG, X., BOYCE, M., BHATTACHARYA, B., ZHANG, X., SCHEIN, S., ROY, P., ZHOU, Z.H. **Bluetongue virus coat protein VP2 contains sialic acid-binding domains, and VP5 resembles enveloped virus fusion proteins**. Proceedings of the National Academy of Sciences. 107: 6292-6297, 2010.

## ÍNDICE REMISSIVO

### A

AA2024 alloy 1, 6, 7  
Adsorção de compostos 32, 36  
Advanced Oxidation Processes 14, 87, 155  
Aluminum alloy 4, 8, 12  
Amplitude de pulso 50, 51, 52, 53, 54  
Anti-corrosion performance 4, 7

### B

Biocombustível 129  
Biodigestor 142, 143, 144  
Bioetanol 107, 115, 129, 139  
Biogás 141, 142, 143, 144, 145, 146, 150, 151, 152  
Biotransformation 24, 30

### C

Chemistry Teaching 250, 261, 262  
Cinza volante 118  
Combustíveis fósseis 33, 99, 143  
Complexometria 221, 222, 224  
Compostos sulfurados 32, 33, 36, 39  
Contaminantes orgânicos 57, 63, 69, 125, 157  
Corrosion protection 1, 2, 12

### D

Decolorization 13, 14, 15, 16, 17, 18, 19, 20, 21, 87  
Diagrama de fase 172, 173, 174

### E

Electrochemical Impedance Spectroscopy 1, 5, 7, 8, 281  
Energias renováveis 129, 143  
Espectroscopia fotoeletrônica de raios X 32, 36, 41

### F

Ferulic acid 24, 30, 31

## G

Geoquímica de Contaminantes 69

Glifosato 43, 44, 45, 46, 47, 50, 51, 53, 54, 55, 56

Grafeno 43, 47, 48, 49, 50, 51, 52, 53, 54

## H

Hidrocarbonetos policíclicos aromáticos 57, 60, 63, 154, 155, 156

## I

Isotermas de adsorção-dessorção 32, 36, 38

## L

Localized impedance 1, 2

## M

Materiais mesoestruturados 37

Mecanismos de partição 57, 69

## N

Nanotubos de carbono hidrofílicos 89, 96

Negro de carbono 89, 90

## O

Óleo Residual 201, 202, 205, 206, 207, 208, 209, 210, 212, 213, 214, 215, 216, 219, 220

Open circuit potential 1, 5, 7

Oxidação parcial do metano 98

## P

Perfil cinético 113, 114, 135, 136, 137

Perovskita 98, 99, 100, 102, 103, 104, 105

Persulfato 154, 155, 157, 158, 159, 160, 164, 165

Photocatalytic efficacy 14

Photo-fenton process 13, 22

Polymer coating 3

Processo oxidativo avançado 155

Processos enzimáticos 107

## R

Reaction 3, 9, 14, 16, 19, 77, 99, 106, 119, 126, 169, 202

Reator solar 76, 77

Reforma do metano 99

## S

Saponificação 202, 203, 204, 207, 209, 215, 216, 217, 219

Scanning Electron Microscopy 4, 281

Self-healing mechanism 3

Semiologia 249, 251, 259

Sensor eletroquímico 43

Sistema Aquoso Bifásico 170, 172, 177

Smart coating 1, 2, 9, 281

## T

Teaching strategies 261

Toxicidade 46, 57, 65, 154, 156, 176, 222

## V

Voltametria 43, 46, 47, 49

 **Atena**  
Editora

**2 0 2 0**