

# O ensino e a pesquisa em **QU** **MICA**

Cleiseano Emanuel da Silva Paniagua  
(Organizador)

# 2

  
Atena  
Editora  
Ano 2021

# O ensino e a pesquisa em **QU** **MICA**

Cleiseano Emanuel da Silva Paniagua  
(Organizador)

# 2

  
Atena  
Editora  
Ano 2021

**Editora chefe**

Profª Drª Antonella Carvalho de Oliveira

**Assistentes editoriais**

Natalia Oliveira

Flávia Roberta Barão

**Bibliotecária**

Janaina Ramos

**Projeto gráfico**

Natália Sandrini de Azevedo

Camila Alves de Cremona

Luiza Alves Batista

Maria Alice Pinheiro

**Imagens da capa**

iStock

**Edição de arte**

Luiza Alves Batista

**Revisão**

Os autores

2021 by Atena Editora

Copyright © Atena Editora

Copyright do Texto © 2021 Os autores

Copyright da Edição © 2021 Atena Editora

Direitos para esta edição cedidos à Atena Editora pelos autores.

Open access publication by Atena Editora



Todo o conteúdo deste livro está licenciado sob uma Licença de Atribuição *Creative Commons*. Atribuição-Não-Comercial-NãoDerivativos 4.0 Internacional (CC BY-NC-ND 4.0).

O conteúdo dos artigos e seus dados em sua forma, correção e confiabilidade são de responsabilidade exclusiva dos autores, inclusive não representam necessariamente a posição oficial da Atena Editora. 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.

Todos os manuscritos foram previamente submetidos à avaliação cega pelos pares, membros do Conselho Editorial desta Editora, tendo sido aprovados para a publicação com base em critérios de neutralidade e imparcialidade acadêmica.

A Atena Editora é comprometida em garantir a integridade editorial em todas as etapas do processo de publicação, evitando plágio, dados ou resultados fraudulentos e impedindo que interesses financeiros comprometam os padrões éticos da publicação. Situações suspeitas de má conduta científica serão investigadas sob o mais alto padrão de rigor acadêmico e ético.

**Conselho Editorial**

**Ciências Humanas e Sociais Aplicadas**

Prof. Dr. Alexandre Jose Schumacher – Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia do Paraná

Prof. Dr. Américo Junior Nunes da Silva – Universidade do Estado da Bahia

Profª Drª Andréa Cristina Marques de Araújo – Universidade Fernando Pessoa

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. Arnaldo Oliveira Souza Júnior – Universidade Federal do Piauí  
Prof. Dr. Carlos Antonio de Souza Moraes – Universidade Federal Fluminense  
Prof. Dr. Crisóstomo Lima do Nascimento – Universidade Federal Fluminense  
Profª Drª Cristina Gaio – Universidade de Lisboa  
Prof. Dr. Daniel Richard Sant'Ana – Universidade de Brasília  
Prof. Dr. Deyvison de Lima Oliveira – Universidade Federal de Rondônia  
Profª Drª Dilma Antunes Silva – Universidade Federal de São Paulo  
Prof. Dr. Edvaldo Antunes de Farias – Universidade Estácio de Sá  
Prof. Dr. Elson Ferreira Costa – Universidade do Estado do Pará  
Prof. Dr. Eloi Martins Senhora – Universidade Federal de Roraima  
Prof. Dr. Gustavo Henrique Cepolini Ferreira – Universidade Estadual de Montes Claros  
Prof. Dr. Humberto Costa – Universidade Federal do Paraná  
Profª Drª Ivone Goulart Lopes – Istituto Internazionele delle Figlie de Maria Ausiliatrice  
Prof. Dr. Jadson Correia de Oliveira – Universidade Católica do Salvador  
Prof. Dr. José Luis Montesillo-Cedillo – Universidad Autónoma del Estado de México  
Prof. Dr. Julio Candido de Meirelles Junior – Universidade Federal Fluminense  
Profª Drª Lina Maria Gonçalves – Universidade Federal do Tocantins  
Prof. Dr. Luis Ricardo Fernandes da Costa – Universidade Estadual de Montes Claros  
Profª Drª Natiéli Piovesan – Instituto Federal do Rio Grande do Norte  
Prof. Dr. Marcelo Pereira da Silva – Pontifícia Universidade Católica de Campinas  
Profª Drª Maria Luzia da Silva Santana – Universidade Federal de Mato Grosso do Sul  
Prof. Dr. Miguel Rodrigues Netto – Universidade do Estado de Mato Grosso  
Prof. Dr. Pablo Ricardo de Lima Falcão – Universidade de Pernambuco  
Profª Drª Paola Andressa Scortegagna – Universidade Estadual de Ponta Grossa  
Profª Drª Rita de Cássia da Silva Oliveira – Universidade Estadual de Ponta Grossa  
Prof. Dr. Rui Maia Diamantino – Universidade Salvador  
Prof. Dr. Saulo Cerqueira de Aguiar Soares – Universidade Federal do Piauí  
Prof. Dr. Urandi João Rodrigues Junior – Universidade Federal do Oeste do Pará  
Profª Drª Vanessa Bordin Viera – Universidade Federal de Campina Grande  
Profª Drª Vanessa Ribeiro Simon Cavalcanti – Universidade Católica do Salvador  
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. Arinaldo Pereira da Silva – Universidade Federal do Sul e Sudeste do Pará  
Prof. Dr. Antonio Pasqualetto – Pontifícia Universidade Católica de Goiás  
Profª Drª Carla Cristina Bauermann Brasil – Universidade Federal de Santa Maria  
Prof. Dr. Cleberton Correia Santos – Universidade Federal da Grande Dourados  
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. Jael Soares Batista – Universidade Federal Rural do Semi-Árido  
Prof. Dr. Jayme Augusto Peres – Universidade Estadual do Centro-Oeste  
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  
Profª Drª Daniela Reis Joaquim de Freitas – Universidade Federal do Piauí  
Profª Drª Débora Luana Ribeiro Pessoa – Universidade Federal do Maranhão  
Prof. Dr. Douglas Siqueira de Almeida Chaves – Universidade Federal Rural do Rio de Janeiro  
Prof. Dr. Edson da Silva – Universidade Federal dos Vales do Jequitinhonha e Mucuri  
Profª Drª Elizabeth Cordeiro Fernandes – Faculdade Integrada Medicina  
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  
Profª Drª Fernanda Miguel de Andrade – Universidade Federal de Pernambuco  
Prof. Dr. Fernando Mendes – Instituto Politécnico de Coimbra – Escola Superior de Saúde de Coimbra  
Profª Drª Gabriela Vieira do Amaral – Universidade de Vassouras  
Prof. Dr. Gianfábio Pimentel Franco – Universidade Federal de Santa Maria  
Prof. Dr. Helio Franklin Rodrigues de Almeida – Universidade Federal de Rondônia  
Profª Drª Iara Lúcia Tescarollo – Universidade São Francisco  
Prof. Dr. Igor Luiz Vieira de Lima Santos – Universidade Federal de Campina Grande  
Prof. Dr. Jefferson Thiago Souza – Universidade Estadual do Ceará  
Prof. Dr. Jesus Rodrigues Lemos – Universidade Federal do Piauí  
Prof. Dr. Jônatas de França Barros – Universidade Federal do Rio Grande do Norte  
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 Maria Tatiane Gonçalves Sá – Universidade do Estado do Pará  
Profª Drª Mylena Andréa Oliveira Torres – Universidade Ceuma  
Profª Drª Natiéli Piovesan – Instituto Federac do Rio Grande do Norte  
Prof. Dr. Paulo Inada – Universidade Estadual de Maringá  
Prof. Dr. Rafael Henrique Silva – Hospital Universitário da Universidade Federal da Grande Dourados  
Profª Drª Regiane Luz Carvalho – Centro Universitário das Faculdades Associadas de Ensino  
Profª Drª Renata Mendes de Freitas – Universidade Federal de Juiz de Fora  
Profª Drª Vanessa da Fontoura Custódio Monteiro – Universidade do Vale do Sapucaí  
Profª Drª Vanessa Lima Gonçalves – Universidade Estadual de Ponta Grossa  
Profª Drª Vanessa Bordin Viera – Universidade Federal de Campina Grande  
Profª Drª Welma Emidio da Silva – Universidade Federal Rural de Pernambuco

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

Prof. Dr. Adélio Alcino Sampaio Castro Machado – Universidade do Porto  
Profª Drª Ana Grasielle Dionísio Corrêa – Universidade Presbiteriana Mackenzie  
Prof. Dr. Carlos Eduardo Sanches de Andrade – Universidade Federal de Goiás  
Profª Drª Carmen Lúcia Voigt – Universidade Norte do Paraná  
Prof. Dr. Cleiseano Emanuel da Silva Paniagua – Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia de Goiás  
Prof. Dr. Douglas Gonçalves da Silva – Universidade Estadual do Sudoeste da Bahia  
Prof. Dr. Eloi Rufato Junior – Universidade Tecnológica Federal do Paraná  
Profª Drª Érica de Melo Azevedo – Instituto Federal do Rio de Janeiro

Prof. Dr. Fabrício Menezes Ramos – Instituto Federal do Pará  
Profª Dra. Jéssica Verger Nardeli – Universidade Estadual Paulista Júlio de Mesquita Filho  
Prof. Dr. Juliano Carlo Rufino de Freitas – Universidade Federal de Campina Grande  
Profª Drª 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. Dr. Marco Aurélio Kistemann Junior – Universidade Federal de Juiz de Fora  
Profª Drª Neiva Maria de Almeida – Universidade Federal da Paraíba  
Profª Drª Natiéli Piovesan – Instituto Federal do Rio Grande do Norte  
Profª Drª Priscila Tessmer Scaglioni – Universidade Federal de Pelotas  
Prof. Dr. Sidney Gonçalves de Lima – Universidade Federal do Piauí  
Prof. Dr. Takeshy Tachizawa – Faculdade de Campo Limpo Paulista

#### **Linguística, Letras e Artes**

Profª Drª Adriana Demite Stephani – Universidade Federal do Tocantins  
Profª Drª Angeli Rose do Nascimento – Universidade Federal do Estado do Rio de Janeiro  
Profª Drª Carolina Fernandes da Silva Mandaji – Universidade Tecnológica Federal do Paraná  
Profª Drª Denise Rocha – Universidade Federal do Ceará  
Profª Drª Edna Alencar da Silva Rivera – Instituto Federal de São Paulo  
Profª Drª Fernanda Tonelli – Instituto Federal de São Paulo,  
Prof. Dr. Fabiano Tadeu Grazioli – Universidade Regional Integrada do Alto Uruguai e das Missões  
Prof. Dr. Gilmei Fleck – Universidade Estadual do Oeste do Paraná  
Profª Drª Keyla Christina Almeida Portela – Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia do Paraná  
Profª Drª Miraniilde Oliveira Neves – Instituto de Educação, Ciência e Tecnologia do Pará  
Profª Drª Sandra Regina Gardacho Pietrobon – Universidade Estadual do Centro-Oeste  
Profª Drª Sheila Marta Carregosa Rocha – Universidade do Estado da Bahia

**Diagramação:** Camila Alves de Cremo  
**Correção:** Giovanna Sandrini de Azevedo  
**Indexação:** Gabriel Motomu Teshima  
**Revisão:** Os autores  
**Organizador:** Cleiseano Emanuel da Silva Paniagua

**Dados Internacionais de Catalogação na Publicação (CIP)**

E59 O ensino e a pesquisa em química 2 / Organizador Cleiseano Emanuel da Silva Paniagua. - Ponta Grossa - PR: Atena, 2021.

Formato: PDF

Requisitos de sistema: Adobe Acrobat Reader

Modo de acesso: World Wide Web

Inclui bibliografia

ISBN 978-65-5983-423-5

DOI: <https://doi.org/10.22533/at.ed.235213108>

1. Química - Estudo e ensino. I. Paniagua, Cleiseano Emanuel da Silva (Organizador). II. Título.

CDD 540.7

Elaborado por Bibliotecária Janaina Ramos - CRB-8/9166

**Atena Editora**

Ponta Grossa - Paraná - Brasil

Telefone: +55 (42) 3323-5493

[www.atenaeditora.com.br](http://www.atenaeditora.com.br)

contato@atenaeditora.com.br

## DECLARAÇÃO DOS AUTORES

Os autores desta obra: 1. Atestam não possuir qualquer interesse comercial que constitua um conflito de interesses em relação ao artigo científico publicado; 2. Declaram que participaram ativamente da construção dos respectivos manuscritos, preferencialmente na: a) Concepção do estudo, e/ou aquisição de dados, e/ou análise e interpretação de dados; b) Elaboração do artigo ou revisão com vistas a tornar o material intelectualmente relevante; c) Aprovação final do manuscrito para submissão.; 3. Certificam que os artigos científicos publicados estão completamente isentos de dados e/ou resultados fraudulentos; 4. Confirmam a citação e a referência correta de todos os dados e de interpretações de dados de outras pesquisas; 5. Reconhecem terem informado todas as fontes de financiamento recebidas para a consecução da pesquisa; 6. Autorizam a edição da obra, que incluem os registros de ficha catalográfica, ISBN, DOI e demais indexadores, projeto visual e criação de capa, diagramação de miolo, assim como lançamento e divulgação da mesma conforme critérios da Atena Editora.

## DECLARAÇÃO DA EDITORA

A Atena Editora declara, para os devidos fins de direito, que: 1. A presente publicação constitui apenas transferência temporária dos direitos autorais, direito sobre a publicação, inclusive não constitui responsabilidade solidária na criação dos manuscritos publicados, nos termos previstos na Lei sobre direitos autorais (Lei 9610/98), no art. 184 do Código penal e no art. 927 do Código Civil; 2. Autoriza e incentiva os autores a assinarem contratos com repositórios institucionais, com fins exclusivos de divulgação da obra, desde que com o devido reconhecimento de autoria e edição e sem qualquer finalidade comercial; 3. Todos os e-book são *open access, desta forma* não os comercializa em seu site, sites parceiros, plataformas de *e-commerce*, ou qualquer outro meio virtual ou físico, portanto, está isenta de repasses de direitos autorais aos autores; 4. Todos os membros do conselho editorial são doutores e vinculados a instituições de ensino superior públicas, conforme recomendação da CAPES para obtenção do Qualis livro; 5. Não cede, comercializa ou autoriza a utilização dos nomes e e-mails dos autores, bem como nenhum outro dado dos mesmos, para qualquer finalidade que não o escopo da divulgação desta obra.

## APRESENTAÇÃO

O e-book: “O ensino e a pesquisa em química” volume II é constituído por quinze capítulos de livro que foram reunidos em três grandes áreas temáticas, a saber: *i)* química analítica: determinação, otimização e validação; *ii)* desenvolvimento de adsorventes e catalisadores para remoção de diferentes classes de contaminantes e aplicação industrial e *iii)* temas diversos.

A primeira temática é constituída por seis capítulos e apresentam diversos estudos, entre os quais: *i)* determinação quantitativa de glicazida em comprimidos e os problemas provenientes do uso de comprimidos pelo sistema de partição não homogêneo; *ii)* a determinação de Hidrocarbonetos Policíclicos Aromáticos (HPAs) empregando-se a técnica de voltametria; *iii)* a validação de um sistema fotocolorímetro em análises para o ensino de química na Universidade Tecnológica de Gutiérrez Zamora na cidade de Vera Cruz no México; *iv)* a importância da otimização para melhor entendimento dos estudos cinéticos em uma reação de hidroalogenação; *v)* a triagem fitoquímica e análise de propriedades antioxidantes e *vi)* avaliação de estruturas metálicas orgânicas como fase estacionária em Cromatografia Líquida de Alta Eficiência (HPLC).

A segunda temática é composta por cinco capítulos e apresentam: estudo de revisão que demonstram: *i)* o potencial de extração de fósforo em efluentes líquidos; *ii)* estudo de Montmorilonita como potencial adsorvente e aplicação em sistemas de fluxo contínuo e *iii)* avaliação e estudo de diferentes catalisadores para remoção de inúmeras classes de poluentes em matrizes aquáticas e reforma do etanol com vapor d’água.

Por fim, a terceira temática que apresenta quatro diferentes estudos que contemplam a corrosão obtida por pulverização de gás frio, a importância e utilização de supressores de poeira na mineração, preparação de nanopartículas poliméricas enriquecidas com óleos essenciais poliméricas e estudo de revisão das propriedades químicas da série de lantanídeos.

Nesta perspectiva, a Atena Editora vem trabalhando por meio do incentivo de publicações de trabalhos de pesquisadores de todas as regiões do Brasil e de outros países com o intuito de colaborar com a publicação de e-books e, conseqüentemente, sua divulgação de forma gratuita em diferentes plataformas digitais de fácil acesso. Logo, a Atena Editora contribui para a divulgação e disseminação do conhecimento científico gerado dentro de instituições de ensino e pesquisa e que pode ser acessado de qualquer lugar e em tempo real por qualquer pessoa interessada na busca pelo conhecimento.

Cleiseano Emanuel da Silva Paniagua

## SUMÁRIO

### **CAPÍTULO 1..... 1**

#### **DETERMINAÇÃO QUANTITATIVA DE GLICLAZIDA EM COMPRIMIDOS SULCADOS**

Jacqueline Cristinne Guimarães Vidal

Maria Amélia Albergaria Estrela

 <https://doi.org/10.22533/at.ed.2352131081>

### **CAPÍTULO 2..... 13**

#### **DETERMINAÇÃO VOLTAMÉTRICA DE HIDROCARBONETOS POLICÍCLICOS AROMÁTICOS USANDO UM ELETRODO DE PASTA DE CARBONO MODIFICADO COM FTALOCIANINA DE ZINCO**

Daniel Jackson Estevam da Costa

Rhayane Silva Rodrigues do Nascimento

Larissa da Silva Pereira

Janete Clair da Silva Santos

Camila Luciana Silva de Mesquita

Fátima Aparecida Castriani Sanches-Brandão

William Farias Ribeiro

Francisco Antonio da Silva Cunha

Mário César Ugulino de Araújo

 <https://doi.org/10.22533/at.ed.2352131082>

### **CAPÍTULO 3..... 25**

#### **VALIDACIÓN DE UN FOTOCOLORÍMETRO PARA ANÁLISIS CUANTITATIVOS EN LA ENSEÑANZA DE LA QUÍMICA**

Raúl Alejandro Limón Hernández

Verónica López Hernández

Fidel Alejandro Aguilar Aguilar

Iriana Hernández Martínez

José Luis Xochihua Juan

Arsenio Sosa Fomperosa

Oscar Enrique Morales Moguel

 <https://doi.org/10.22533/at.ed.2352131083>

### **CAPÍTULO 4..... 40**

#### **OTIMIZAÇÃO NUMÉRICA E ESTUDO CINÉTICO DA REAÇÃO DE HIDROALOGENAÇÃO DO ALFA-PINENO**

Vladimir Lavayen

Thágor Moreira Klein

Chádia Schissler

Leticia Antunes Natividade

Alexandre Chagas

Jacqueline Arguello da Silva

 <https://doi.org/10.22533/at.ed.2352131084>

**CAPÍTULO 5..... 50**

TRIAMEN FITOQUÍMICA E ANÁLISE QUALITATIVA DO POTENCIAL ANTIOXIDANTE DOS EXTRATOS FOLIARES DE *Cinnamomum zeylanicum* E *Cinnamomum burmannii*

Ana Francisca Gomes da Silva

Valéria Flávia Batista da Silva

Carolina Lopes

 <https://doi.org/10.22533/at.ed.2352131085>

**CAPÍTULO 6..... 58**

MOFs (METAL ORGANIC FRAMEWORKS) AS A STATIONARY PHASE IN LIQUID CHROMATOGRAPHY (HPLC)

Tamires dos Reis Menezes

Kátilla Monique Costa Santos

Silvia Maria Egues Dariva

Juliana Faccin de Conto Borges

Cesar Costapinto Santana

 <https://doi.org/10.22533/at.ed.2352131086>

**CAPÍTULO 7..... 76**

POTENCIAL DE EXTRAÇÃO DE FÓSFORO DE EFLUENTES LÍQUIDOS – REVISÃO DE LITERATURA

Luciana Faria Caetano de Souza

Suzana Maria Loures de Oliveira Marcionilio

Ana Carolina Ribeiro Aguiar

Ana Paula Cardoso Gomide

 <https://doi.org/10.22533/at.ed.2352131087>

**CAPÍTULO 8..... 84**

ESTUDO DE OBTENÇÃO DE MONTMORILONITA POR PRECIPITAÇÃO SEQUENCIAL PARA USO COMO ADSORVENTE PARA SISTEMAS DE FLUXO CONTÍNUO

Kathely Priscila de Souza Trindade

Graciele Vieira Barbosa

Alberto Adriano Cavalheiro

 <https://doi.org/10.22533/at.ed.2352131088>

**CAPÍTULO 9..... 97**

OXIDAÇÃO CATALÍTICA DO CORANTE AZUL DE METILENO USANDO NOVOS CATALISADORES  $Fe_2O_3$

Matheus de Araújo Moura

Henrique Rebouças Marques Santos

Márcio Souza Santos

Rennan Noronha de Franca

Alexilda Oliveira de Souza

 <https://doi.org/10.22533/at.ed.2352131089>

**CAPÍTULO 10..... 107**

**AVALIAÇÃO DA SELETIVIDADE DO CATALISADOR FORMADO A PARTIR DO SULFATO DE MAGNÉSIO *in situ* NA PIRÓLISE CATALÍTICA DA BIOMASSA DE MACRÓFITA AQUÁTICA PARA OBTENÇÃO DE BIO-ÓLEO PIROLÍTICO**

Júnior da Silva Camargo  
Sonia Tomie Tanimoto  
Fernando Alves Ferreira  
Vitor Vinícius Anjos Bonfim Ribeiro  
Regineide de Oliveira Lima  
Ricardo Faustino Rits de Barros  
José Alfredo Valverde  
Layssa Aline Okamura  
Paulo Renato dos Santos

 <https://doi.org/10.22533/at.ed.23521310810>

**CAPÍTULO 11 ..... 120**

**REFORMA DO ETANOL COM VAPOR D' ÁGUA: AVALIAÇÃO DA ATIVAÇÃO PRÉVIA DO CATALISADOR Cu/Ni/Na<sub>2</sub>O-Nb<sub>2</sub>O<sub>5</sub>**

Laura dos Santos Costa  
Maria Eduarda Bogado dos Santos  
Marília de Oliveira Camargo  
Marcos de Souza  
Isabela Dancini Pontes

 <https://doi.org/10.22533/at.ed.23521310811>

**CAPÍTULO 12..... 129**

**STUDY OF CORROSION AND MECHANISMS OF COATINGS OBTAINED BY COLD GAS SPRAY USING OPEN CIRCUIT POTENTIAL AND MICROSCOPIC ANALYSIS**

Fernando Santos da Silva  
Sergi Dosta  
Assis Vicente Benedetti

 <https://doi.org/10.22533/at.ed.23521310812>

**CAPÍTULO 13..... 144**

**SUPRESSORES DE POEIRA DE MINERAÇÃO**

Stéphane Miranda Francisco  
Enio Nazaré de Oliveira Júnior  
Ana Maria de Oliveira

 <https://doi.org/10.22533/at.ed.23521310813>

**CAPÍTULO 14..... 156**

**PREPARATION OF SUB-50 NM POLYMERIC NANOPARTICLES LOADED WITH ESSENTIAL OILS**

Hened Saade Caballero

 <https://doi.org/10.22533/at.ed.23521310814>

<b>CAPÍTULO 15.....</b>	<b>160</b>
QUÍMICA DE LANTANÍDEOS	
Jorge Fernando Silva de Menezes	
Rodrigo Galvão dos Santos	
 <a href="https://doi.org/10.22533/at.ed.23521310815">https://doi.org/10.22533/at.ed.23521310815</a>	
<b>SOBRE O ORGANIZADOR.....</b>	<b>192</b>
<b>ÍNDICE REMISSIVO.....</b>	<b>193</b>

# CAPÍTULO 4

## OTIMIZAÇÃO NUMÉRICA E ESTUDO CINÉTICO DA REAÇÃO DE HIDROALOGENAÇÃO DO ALFA-PINENO

Data de aceite: 23/08/2021

Data de submissão: 03/06/2021

### Vladimir Lavayen

Universidade Federal do Rio Grande do Sul,  
Instituto de Química  
Porto Alegre – Rio Grande do Sul  
ORCID: 0000-0002-0382-8183  
<http://lattes.cnpq.br/4036436694149528>

### Thágor Moreira Klein

Universidade Federal do Rio Grande do Sul,  
Instituto de Química  
Porto Alegre – Rio Grande do Sul  
ORCID: 0000-0002-7454-9149  
<http://lattes.cnpq.br/9178342746328530>

### Chádia Schissler

Universidade Federal do Rio Grande do Sul,  
Instituto de Química  
Porto Alegre – Rio Grande do Sul  
ORCID: 0000-0003-0215-1630  
<http://lattes.cnpq.br/9546516063129416>

### Leticia Antunes Natividade

Universidade Federal do Rio Grande do Sul,  
Instituto de Química  
Porto Alegre – Rio Grande do Sul  
ORCID: 0000-0002-0469-0016  
<http://lattes.cnpq.br/7984391316142365>

### Alexandre Chagas

Universidade Federal do Rio Grande do Sul,  
Instituto de Química  
Porto Alegre – Rio Grande do Sul  
ORCID: 0000-0002-0500-6749  
<http://lattes.cnpq.br/2966344244857961>

### Jacqueline Arguello da Silva

Universidade Federal do Rio Grande do Sul,  
Instituto de Química  
Porto Alegre – Rio Grande do Sul  
ORCID: 0000-0002-6918-1597  
<http://lattes.cnpq.br/4712538462433785>

**RESUMO:** O óleo essencial da espécie vegetal *Eucalyptus globulus* é constituído principalmente de 1,8-cineol (80 – 85%). Como subprodutos principais das diversas frações de destilação encontra-se o  $\alpha$ -pineno e o  $p$ -cimeno, entre outros compostos de origem terpênico. Estes subprodutos apresentam baixo interesse comercial. Por tanto, para criar condições de maior valor agregado é conveniente realizar reações de isomerização e hidroalogenação, como por exemplo a produção do canfeno, um terpeno cristalino usado como base para inseticidas. Neste trabalho é apresentado o uso de ferramentas de desenhos experimentais na reação de hidroalogenação de  $\alpha$ -pineno (99,7%, e  $[\alpha]_D^{25} = + 4,0^\circ$ ). No planejamento fatorial as variáveis independentes foram a vazão de HCl (68 - 102 mL min<sup>-1</sup>), o tempo de reação (4-7h), e temperatura de reação (0 °C a -5 °C), e como variável dependente a massa dos sólidos formados na síntese. A análise experimental foi desenvolvida em dois níveis e em duplicata e em ordem aleatória para minimizar o efeito de variáveis não controladas. O rendimento da reação foi de 29 %, e o grau de conversão foi de 15 %. A melhor combinação de variáveis da reação de hidrocloração mostra a formação de um produto sólido com um ponto de fusão de

108 - 112 °C, densidade relativa ( $D_{20}^{20}$ ) de 0,8077, e índice de refração de 1,3620. Análises subsequentes por cromatografia gasosa acoplada à espectrometria de massas mostraram que o principal produto é o cloreto de bornila. Por fim, o acompanhamento cinético dos dados cromatográficos foi realizado mediante o método de mínimos quadrados, e permitiu determinar uma energia de ativação de 26 KJ mol<sup>-1</sup>, e constante de ativação de  $k$  igual a 895 s<sup>-1</sup>.

**PALAVRAS-CHAVE:** Pineno, cinética, hidrocloração, planejamento fatorial.

## NUMERICAL OPTIMIZATION AND KINETIC STUDY OF THE ALPHA-PINENE HYDROHALOGENATION REACTION

**ABSTRACT:** The essential oil of the plant species *Eucalyptus globulus* consists mainly of 1,8-cineole (80 - 85%). The main by-products of the different distillation fractions are  $\alpha$ -pinene and  $p$ -cymene, among other compounds of terpenic origin. These by-products are of low commercial interest. Therefore, to create more value-added conditions, it is convenient to carry out isomerization and hydrohalogenation reactions, such as the production of camphene, a crystalline terpene used as a base for insecticides. The present work presents the use of experimental design tools in the hydrohalogenation reaction of  $\alpha$ -pinene (99.7%, and  $[\alpha]_D^{25} = + 4,0^\circ$ ). In the factorial design, the independent variables were HCl flow (68 - 102 mL min<sup>-1</sup>), reaction time (4 - 7 h), and reaction temperature (0 °C to -5 °C), and as a dependent variable on the mass of solids formed in the synthesis. The experimental analysis was performed at two levels and in duplicate and at random to minimize uncontrolled variables. The reaction yield was 29%, and the degree of conversion was 15%. The best combination of variables from the hydrochlorination reaction shows the formation of a solid product with a melting point of 108 - 112 °C, relative density ( $D_{20}^{20}$ ) de 0,8077, and a refractive index of 1.3620. Subsequent analysis by gas chromatography coupled with mass spectrometry showed that the main product is bornyl chloride. Finally, the kinetic monitoring of the chromatographic data was performed by the least-squares method and allowed the determination of activation energy of 26 KJ mol<sup>-1</sup> and an activation constant of  $k$  equal to 895 s<sup>-1</sup>.

**KEYWORDS:** Pinene, kinetics, hydrochlorination, factorial design.

## 1 | INTRODUÇÃO

O estudo dos monoterpenos e seus derivados é uma área ainda muito ativa, devido principalmente ao fato de que alguns compostos apresentam características aromáticas. Alguns deles formam parte da composição de óleos essenciais, que são utilizados como matéria prima na elaboração de produtos como sabonetes, detergentes, bases de substâncias perfumadas, ceras (FINDIK; GÜNDÜZ, 1997; GUENTHER; GILBERTSON; KOENIG, 1971; XIANG; ZHU; LUO, 2020).

O composto orgânico denominado Pineno é o principal constituinte da árvore turpentina (*Pistacia terebinthus*), uma das matérias primas da terebintina, a qual é usada para diluir tintas à base de óleos (GUENTHER; GILBERTSON; KOENIG, 1971). Mediante destilação pode ser obtida a partir do óleo essencial da espécie vegetal *Eucalyptus globulus*

um óleo constituído de 1,8-cineol (80 - 85%) e *p*-cimeno numa concentração de 1,8 %. O restante dessa composição está formado por  $\alpha$ -pineno principalmente, e limoneno, entre outros compostos (PONOMAREV; VISHNYAKOVA; RUDOMETOVA, 2010).

Para dar maior valor agregado, por conta que alguns destes subprodutos apresentam baixo interesse comercial, pode-se funcionalizar. Assim, procura-se usar reações de isomerização e hidroalogenação para produzir então, o canfeno, um terpeno cristalino usado como base para inseticidas (LAVAYEN, 1999; XIANG; ZHU; LUO, 2020).

A hidroalogenação do  $\alpha$ -pineno, como exemplo do uso sintético dos monoterpenos já é bem conhecida, esta reação produz o cloreto de bornila como produto majoritário. A formação de subprodutos está relacionada com os efeitos da combinação de fatores como catalisador, tempo, e temperatura do meio reacional. Nesta reação, o mecanismo passa pela formação de um carbocátion não clássico junto a um reordenamento do tipo Wagner-Wervein (BIRLADEANU, 2000; KWART; NULL, 1998).

O planejamento fatorial, uma ferramenta muito utilizada na indústria, proporciona informação das interações entre variáveis independentes. Além de ter a capacidade de extrair informação relevante com um número mínimo de experimentos. A análise de superfície de resposta, que é outra ferramenta usada nos planejamentos fatoriais, fornece uma melhor combinação de parâmetros da reação no modelo de estudo, onde a otimização univariante apresenta limitações ou é inadequado (MONTGOMERY, 2001).

Neste trabalho, foi realizado um planejamento fatorial na reação de hidrocloração do  $\alpha$ -pineno, tendo como variáveis independentes a vazão de cloreto de hidrogênio (HCl), temperatura e tempo de reação, visando obter cloreto de bornila como produto principal. Finalmente, foi realizado o seguimento cinético da reação usando otimização matemática nos dados de cromatografia gasosa, tudo isto para encontrar o melhor ajuste para o conjunto de dados no modelo de estudo.

## 2 | PARTE EXPERIMENTAL

Para reação de hidroalogenação foi usado  $\alpha$ -pineno recém destilado, com 99,7% de pureza, rotação ótica de +4,08°, índice de refração ( $n_D^{20}$ ) de 1,4655 e densidade 0,8563 g mL<sup>-1</sup>. Para produção de cloreto de hidrogênio foi empregado 250 mL de H<sub>2</sub>SO<sub>4</sub> e 140,0 g NaCl. A vazão do gás produzido, cloreto de hidrogênio, foi medida usando um fluxômetro, e o gás em excesso foi desativado usando dois traps lavadores de gases, um com solução de NaOH 7,0 mol L<sup>-1</sup> e outro com água (LAVAYEN, 1999). Para melhorar a difusão do gás formado, foi colocado no reator um difusor de vidro com pedra porosa cerâmica.

A reação foi realizada usando como variáveis independentes: (1) vazão de HCl, no intervalo 68 – 102 mL min<sup>-1</sup>, (2) tempo de reação entre 4 – 7 h, e (3) temperatura de reação entre 0 °C – -5 °C. Foi utilizado como variável dependente a massa dos sólidos formados na síntese. Para determinar a composição do sólido utilizou-se um cromatógrafo

a gás Shimadzu GC 14B, equipado com uma coluna supelcowax 10, com programação de temperatura inicial de 40° por 2 min, seguido de uma rampa de aquecimento de 2 °C min<sup>-1</sup> até 180 °C, sendo mantida a temperatura nesse patamar durante 15 min. O CG-MS foi realizado num equipamento HP5972 MSD a 70 eV.

Em cada reação foi utilizado 170 mL de  $\alpha$ -pineno, que foi colocado a reagir com o cloreto de hidrogênio, sendo o produto da reação uma mistura de um sólido de cor amarelo claro e um líquido, com valor de pH entre 1,0 e 2,0. Filtrou-se os produtos, onde o sólido foi separado para posterior purificação. Com o intuito de eliminar impurezas, o mesmo foi lavado várias vezes com água e etanol a 95% gelados (2°C). O líquido residual da filtração foi levado a cristalização a -18 °C durante 120 horas, e os cristais formados foram novamente filtrados e lavados várias vezes com água e etanol gelados. Finalmente, os dois sólidos foram reunidos e pesados - estando os valores encontrados descritos na Tabela 1.

Para a otimização da reação, se utilizo um planejamento fatorial completo 2<sup>k</sup>, onde k significa a quantidade de fatores analisados em 2 níveis. As planilhas de cálculo reportados por Teófilo, (2006), além de conceitos de literatura (PEREIRA FILHO, 2015) serviram como referências. Neste trabalho foi usado um planejamento fatorial 2<sup>3</sup> feito por duplicata, onde cada experimento foi feito em ordem aleatório para minimizar o efeito de variáveis não controladas. Ao menor intervalo de cada variável independente foi assignado um valor de (-1) e ao maior valor no intervalo foi assignado um valor de (+1), como mostrado na Tabela 1.

Ensaio	1*	2	3	Massas medidas (g)		Média (g)
1	-	-	-	28,5	29,5	29,0
2	+	-	-	42,0	38,0	40,0
3	-	+	-	34,0	36,0	35,0
4	+	+	-	35,0	33,0	34,0
5	-	-	+	46,0	44,0	45,0
6	+	-	+	57,0	55,0	56,0
7	-	+	+	54,0	52,0	53,0
8	+	+	+	51,0	53,0	52,0

\*Os símbolos (-) e (+) significam o menor e maior valor no intervalo de estudo.

Tabela 1. Matriz de planejamento fatorial 2<sup>3</sup> para a hidroalogenação de  $\alpha$ -pineno.

## 3 | RESULTADOS

### 3.1 Síntese e caracterização

Antes da reação, o  $\alpha$ -pineno foi primeiramente destilado, sendo obtido uma pureza de 99,7%. O esquema da reação de hidrocloração é mostrado na Figura 1, onde observa-

se a formação de dois produtos, sendo o primeiro o cloreto de bornila, o produto desejado, por sua utilização para obtenção de canfeno, e o segundo, um subproduto denominado cloreto de isobornila (STELTENKAMP, 1968; BOUŘ; MCCANN; WIESER, 1998).

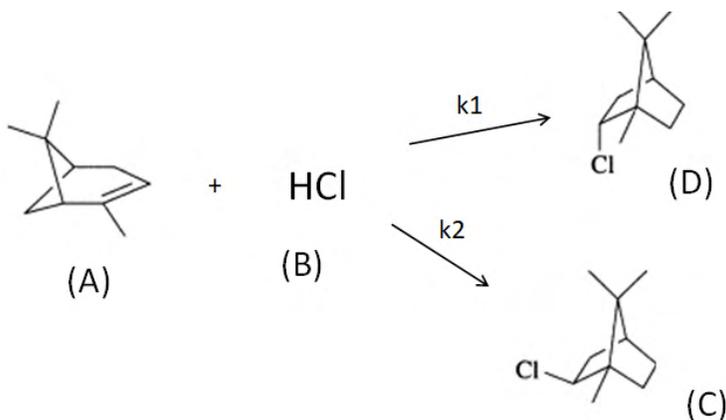


Figura 1. Esquema das reações estudadas. (A) a-pineno, (B) cloreto de hidrogênio, (C) cloreto de isobornila, (D) cloreto de bornila. Onde  $k_1$  e  $k_2$  são as constantes cinéticas de velocidade das reações (1) e (2) respectivamente.

A adição de uma molécula de HCl ao alqueno assimétrico, como o caso do a-pineno pode ser levada a cabo por um ataque eletrofílico que envolve a interação entre os elétrons da ligação  $\pi$  do alceno e o eletrófilo para formar um complexo  $\pi$ . O alceno protonado pode se converter num carbocátion, o qual logo reage com o íon cloreto, um nucleófilo. Por conta da formação de um carbocátion não clássico na reação, o isômero majoritário na reação estará afetado pela combinação das condições de reação (MARCH, 1992). A estabilidade termodinâmica fará com que se forme o isômero na posição *endo*, tendo como resultado a formação do cloreto de bornila. Por outro lado, o controle cinético fará com que o isômero se forme na posição *exo*, e assim se terá a formação do cloreto de isobornila (MAJOR; WEITMAN, 2012; NIE et al., 2015).

Os resultados do planejamento fatorial completo  $2^3$  são apresentados na Tabela 2 e Figuras 2 e 3. Os valores dos coeficientes foram calculados para um nível de confiança de 95%. As interações relacionadas entre tempo – temperatura (2-3), vazão de HCl – temperatura (1-3) como as interações de três fatores (1-2-3) foram insignificantes. Pelo valor absoluto dos coeficientes, a temperatura é o fator de maior significância na reação de hidrocloreção. A interação vazão de HCl – tempo (1-3) e o fator principal vazão de HCl apresentam quase a mesma magnitude, porém sinais contrários, nesse nível de significância.

	Estimativa $\pm$ erro padrão
<b>Média:</b>	<b>43,0 <math>\pm</math> 0,4</b>
<b>Efeitos principais:</b>	
1 (Vazão)	<b>5,0 <math>\pm</math> 0,8</b>
2 (Tempo)	<b>1,0 <math>\pm</math> 0,8</b>
3 (Temperatura)	<b>17,0 <math>\pm</math> 0,8</b>
<b>Interações dois fatores:</b>	
1 2	<b>-6,0 <math>\pm</math> 0,8</b>
1 3	<b>0,0 <math>\pm</math> 0,8</b>
2 3	<b>1,0 <math>\pm</math> 0,8</b>
<b>Interações três fatores:</b>	
1 2 3	<b>0,0 <math>\pm</math> 0,8</b>

Tabela 2. Efeitos calculados para o planejamento fatorial 2<sup>3</sup>.

A Figura 2 apresenta os valores experimentais em função das respostas previstas pelo modelo, onde se observa boa concordância entre as respostas reais, experimentais, e aquelas previstas pelo modelo.

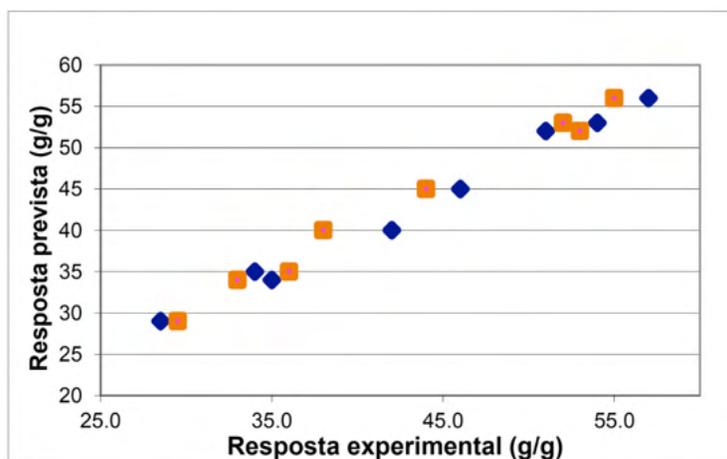


Figura 2: Resposta experimental em função da resposta prevista no modelo proposto. Em que os pontos em cor azul são a resposta prevista, e os pontos em cor alaranjado são os dados da resposta experimental.

Com base na análise do modelo matemático e verificação dos coeficientes significativos da Tabela 2, pode-se concluir que a temperatura é a variável mais significativa no planejamento fatorial. A Figura 3 mostra o gráfico do contorno, o qual é uma representação bidimensional da superfície de resposta do modelo proposto. Assim, é possível observar que existe uma região onde se apresenta um máximo de sinal, referente aos menores tempos de reação e vazões de HCl.

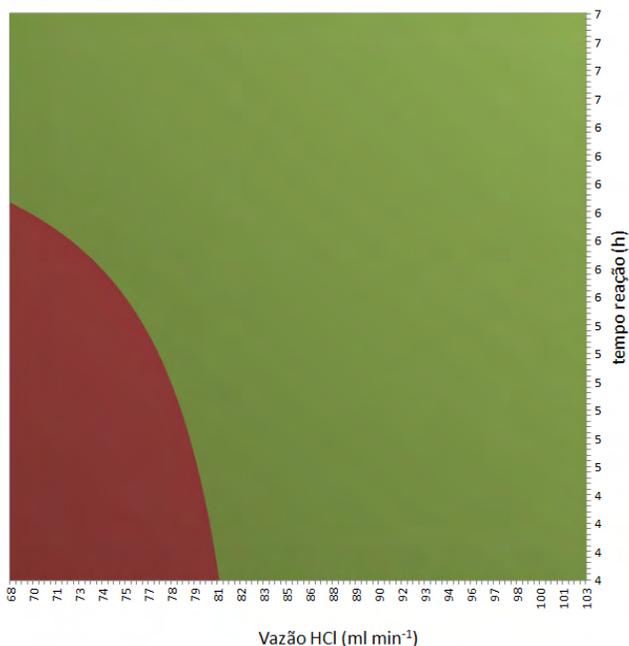


Figura 3. Gráfico do contorno de modelo proposto, em que a região vermelha representa a região de menor intensidade.

A temperatura se apresenta com um mínimo de intensidade em 0 °C na superfície de resposta. A melhor combinação de variáveis da reação de hidrocloração na região de menor intensidade no gráfico de contorno corresponde a vazão de HCl 68 mL min<sup>-1</sup>, tempo de reação de 4 h, e temperatura de 0 °C. A percentagem de conversão do sólido formado foi de 15 % e a percentagem de rendimento foi de 29 %. O produto sólido possui um ponto de fusão de 108 - 112 °C, densidade relativa ( $D_{20}^{20}$ ) de 0,8077, e índice de refração de 1,3620.

### 3.2 Estudo cinético da reação

A partir dos dados de cromatografia gasosa e da melhor condição fornecida pelo planejamento fatorial foi feito o acompanhamento cinético da reação de hidrocloração. Assim, foram considerados as reações (1) e (2) baseadas na Figura 1. Onde  $k_1$  e  $k_2$  são as constantes cinéticas de velocidade das reações (1) e (2) respectivamente.



As equações de concentração em função do tempo são representadas pelas equações (3), (4), (5) respectivamente.

$$-\frac{dC_A}{dt} = k_i C_A^n C_B^m \quad (3)$$

$$\frac{dC_D}{dt} = k_i C_A^n C_B^m \quad (4)$$

$$\frac{dC_C}{dt} = k_i C_A^n C_B^m \quad (5)$$

Onde  $k_1 + k_2 = k_i$  e  $n$  e  $m$  são as ordens de reação das espécies (A) e (B) respetivamente. Supondo que durante todo momento da reação o cloreto de hidrogênio (B) borbulhado no reator está em excesso, pode-se dizer que a concentração do gás se manteve invariante, constante e muito maior que a concentração do  $\alpha$ -pineno (A). Supondo que a reação é de primeira ordem, as concentrações das espécies  $\alpha$ -pineno (A), cloreto de bornila (D) e cloreto de isobornila (C) estão representados pelas equações (6), (7) e (8) respectivamente.

$$C_A = C_{A0} e^{-k_i t} \quad (6)$$

$$C_D = -\left(\left(\frac{k_1 C_{A0}}{k_i}\right) * (e^{-k_i/t} - 1)\right) \quad (7)$$

$$C_C = -\left(\left(\frac{k_2 C_{A0}}{k_i}\right) * (e^{-k_i/t} - 1)\right) \quad (8)$$

Os dados de cromatografia gasosa mostraram-se valiosos para encontrar as constantes cinéticas. Na Tabela 3 se apresentam as concentrações (massa/massa) para o cloreto de bornila, cloreto de isobornila e  $\alpha$ -pineno, respetivamente.

A partir desses dados foi aplicado o método de mínimos quadrados para a otimização matemática, o qual procura encontrar o melhor ajuste para um conjunto de dados tentando minimizar a soma dos quadrados das diferenças entre o valor estimado e os dados observados (MONTGOMERY, 2001).

t (min)	C <sub>A</sub> (g A/g totais)	C <sub>D</sub> (g D/g totais)	C <sub>C</sub> (g C/g totais)	T (K)	k <sub>1</sub> exp (s <sup>-1</sup> )	k <sub>2</sub> exp (s <sup>-1</sup> )
0,0	99,6	0,0	0,0	268		
44,0	40,6	7,6	22,4	270	2,09 x10 <sup>-2</sup>	2,09 x10 <sup>-2</sup>
66,2	13,2	12,5	44,4	272	1,38 x10 <sup>-1</sup>	1,51 x10 <sup>-1</sup>
90,2	1,06	15,1	54,4	276	2,47 x10 <sup>-2</sup>	1,01 x10 <sup>-1</sup>
116,2	0,37	15,4	54,5	273	4,00 x10 <sup>-5</sup>	6,85 x10 <sup>-2</sup>
133,8	0,32	15,3	53,4	273		

Tabela 3. Dados experimentais da reação do hidrocloração.

A partir dos valores da Tabela 3 foi obtido o valor da soma de quadrados das diferenças de  $1,36 \times 10^{-6}$ , com um erro de  $1,17 \times 10^{-3}$ . Com os dados obtidos a diferentes

temperaturas, aplicando-se a equação de Arrhenius foi possível calcular a energia de ativação ( $E_a$ ) e a constante de velocidade ( $k$ ) para as reações das equações (5) e (6). Finalmente, para reação de formação do cloreto de bornila o valor da energia de ativação é  $26 \text{ KJ mol}^{-1}$  e o do ( $k$ ) igual a  $895 \text{ s}^{-1}$  e, para a reação de formação do cloreto de isobornila, o valor de energia de ativação é  $59 \text{ KJ mol}^{-1}$  e o do ( $k$ ) igual a  $2,6 \text{ s}^{-1}$ .

## 4 | CONSIDERAÇÕES FINAIS

Neste trabalho foi apresentado o estudo do planejamento fatorial na reação de hidrocloração de  $\alpha$ -pineno. A partir da análise matemática foi estabelecido a melhor seleção de variáveis para a reação de hidrocloração de  $\alpha$ -pineno.

Cloreto de bornila foi obtido com uma porcentagem de conversão do sólido formado de 15 % e o porcentagem de rendimento de 29 %. O estudo da cinética da reação mostra uma reação de primeira ordem, a qual foi obtida usando o método de mínimos quadrados, com uma energia de ativação de  $59 \text{ KJ mol}^{-1}$  para o cloreto de bornila. Finalmente, este trabalho mostrou-se como um estudo interdisciplinar entre química orgânica, análise numérica e estatística.

## AGRADECIMENTOS

Este estudo foi financiado em parte pela Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior - Brasil (CAPES) - Finance Code 001. Os autores agradecem o suporte financeiro do INCT de bioanálítica (CNPq/INCT 465389/2014-7), CNPq (Processo: 550441/2012-3), Propesq/UFRGS. V.L agradece o apoio do CTA-UMSS e a ajuda no estudo cinético a J. Quillaguamán.

## REFERÊNCIAS

BIRLADEANU, L. The Story of the Wagner-Meerwein Rearrangement. **Journal of Chemical Education**, v. 77, n. 7, p. 858-863, 2000. Disponível em: <https://doi.org/10.1021/ed077p858>.

BOUŘ, P.; MCCANN, J.; WIESER, H. Measurement and Calculation of Absolute Rotational Strengths for Camphor,  $\alpha$ -Pinene, and Borneol. **The Journal of Physical Chemistry A**, v. 102, n. 1, p. 102-110, 1998. Disponível em: <https://doi.org/doi.org/10.1021/jp971665z>.

FINDIK, S.; GÜNDÜZ, G. Isomerization of  $\alpha$ -pinene to camphene. **Journal of the American Oil Chemists' Society**, v 74, n. 9, p. 1145-1151, 1997. Disponível em: <https://doi.org/10.1007/s11746-997-0038-8>.

GUENTHER, E.; GILBERTSON, G.; KOENIG, R.T. Essential oils and related products. **Analytical Chemistry**, v. 43, n. 5, p. 45-64, 1971. Disponível em: <https://doi.org/10.1021/ac60300a015>.

KWART H.; NULL, G. Proof of the Configuration of Bornyl Chloride; Observations on the Non-reactivity

of Bornyl Dichloride. **Journal of the American Chemical Society**, v. 78, n. 22, p. 5943-5945, 1956. Disponível em: <https://doi.org/10.1021/ja01603a061>.

NIE, H. *et al.* Thermodynamic and kinetic studies on alkoxylation of camphene over cation exchange resin catalysts. **AIChE Journal**, v. 61, n. 6, p. 1925-1932, 2015. Disponível em: <https://doi.org/10.1002/aic.14786>.

LAVAYEN, V. **Estudio de la Transformaciones Químicas del a-pineno**. 1999, Trabalho de Conclusão de Curso, Universidad Mayorde San Simon, Cochabamba.

MARCH, J. **Advanced organic chemistry: reactions, mechanisms, and structure**. 4th ed. New York: John Wiley & Sons, 1992.

MAJOR, D. T.; WEITMAN, M. Electrostatically Guided Dynamics—The Root of Fidelity in a Promiscuous Terpene Synthase?. **Journal of the American Chemical Society**, v. 134, n. 47, p. 19454-19462, 2012. Disponível em: <https://doi.org/10.1021/ja308295p>.

MONTGOMERY D.C. **Design and analysis of experiments**. 5th ed. New York: John Wiley & Sons, 2001.

PONOMAREV, D. A.; VISHNYAKOVA, E. V.; RUDOMETOVA, N. V. Preparation of fragrant substances from bornyl chloride. **Russian Journal of Applied Chemistry**, v. 83, n.4, p. 695–699, 2010. <https://doi.org/10.1134/S1070427210040221>.

PEREIRA FILHO, E. R. **Planejamento Fatorial Em Química: Maximizando a Obtenção de Resultados**. 1. ed. São Carlos: EdUSFCar, 2015.

STELTENKAMP, R. J. The chemistry of detergent perfumery. **Journal of the American Oil Chemists' Society**, v 45, n. 6, p. 429-432, 1968. Disponível em: <https://doi.org/10.1007/BF02655500>.

TEÓFILO, R. F.; FERREIRA, M. M. Quimiometria II: Planilhas para Cálculos de Planejamentos Experimentais, um tutorial. **Química Nova**, v. 29, n. 2, p. 338-350, 2006. Disponível em: <https://doi.org/10.1590/S0100-40422006000200026>.

XIANG, J.; ZHU, L.; LUO, Z. Application of kinetics and computational fluid dynamics in pinene isomerization. **Chinese Journal of Chemical Engineering**, v. 28, n.8, p. 2111-2120, 2020. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.cjche.2020.03.021>.

## ÍNDICE REMISSIVO

### A

Adsorção 84, 85, 86, 93, 94, 95, 98, 99, 151  
Adsorvente 84, 94, 95  
Agência de Proteção Ambiental Americana - USEPA 15  
Agência Nacional de Mineração - ANM 145, 153  
Aguas residuales 25  
Águas superficiais 98  
Ambiente aquático 98  
Análise qualitativa 50  
Análise quantitativa 1  
Antioxidante 50, 51, 52, 53, 54, 55, 56, 57  
Argilominerais sintéticos 84

### B

Biocombustíveis 108, 116  
Biomassa 81, 107, 108, 109, 110, 112, 113, 114, 118

### C

Câncer 15, 54  
Catalisador 42, 99, 101, 107, 108, 109, 110, 111, 114, 115, 116, 117, 118, 120, 121, 122, 123, 124, 125, 126, 127  
Combustíveis fósseis 120, 121  
Compostos tóxicos 98  
Comprimido 1, 2, 3, 5, 7, 8, 9, 10, 11  
Contaminantes ambientais 13  
Corantes 17, 97, 98  
Corrosion 129, 130, 131, 134, 135, 136, 137, 138, 139, 140, 141, 142, 143  
Cromatografia gasosa 41, 42, 46, 47, 112, 116

### D

Degradação térmica 109  
Desenvolvimento sustentável 144  
Destilação 40, 41  
Doseamento 1, 6

## **E**

Ecosistemas aquáticos 79

Efeito estufa 121

Efluentes industriais 98

Electrochemical Impedance Spectroscopy -EIS 130

Eletrodo 13, 14, 15, 16, 18, 19, 20, 22, 24

Espectrofotometria 25, 26

Espectroscopia no Infravermelho por Transformada de Fourier - FT IR 109

Essential oils 48, 156, 157

Etanol 43, 50, 52, 120, 121, 126, 127, 184

Eutrofização 79

## **F**

Farmacocinéticos 2

Fármacos 12, 98, 106

Fertilizantes 76, 77, 81, 98

Fitoquímica 50, 52, 53, 54, 55

Flora 51, 150

Fósforo 76, 77, 78, 79, 80, 81, 82, 83

Fotocolorímetro 25, 27, 28, 31, 32, 33, 34, 35, 36, 37, 39

## **G**

Green diesel 108, 116

## **H**

Hidroalogenação 40, 42, 43

Hidrocarbonetos Policíclicos Aromáticos - HPAs 13, 14, 15, 23

High Performance Liquid Chromatography - HPLC 60, 66, 69, 73, 74

## **I**

Impacto ambiental 16, 144, 153

## **L**

Lantanídeos 160, 161, 162, 164, 165, 166, 167, 170, 171, 176, 180, 181, 183, 184, 185

Legislação ambiental 98

## **M**

Material particulado em suspensão 145

Medicamentos 1, 2, 3, 5, 7, 8, 9, 10  
Meio ambiente 13, 14, 23, 81, 98, 107, 120, 121, 146, 148, 152, 153  
Metais pesados 84  
Metais traços 98  
Metal Organic Frameworks - MOF's 58  
Métodos eletroanalíticos 14  
Micro-organismos 152  
Mineração 78, 144, 145, 153

## **N**

Nanoparticles - NP 156, 157, 158, 159, 186  
Normas Reguladoras de Mineração - NRM 145, 153

## **P**

Partículas totais em suspensão - PTS 145  
Pirólise 15, 107, 108, 109, 110, 111, 113, 114, 115, 116, 117, 118  
Planejamento fatorial 40, 41, 42, 43, 44, 45, 46, 48, 49  
Plantas medicinais 51, 56, 57  
Poluentes orgânicos 84, 98  
Poluição atmosférica 145  
Potencial carcinogênico 14

## **R**

Reação de Fenton 97, 99, 101  
Recursos hídricos 81, 98

## **S**

Solução tampão 14, 18  
Supressores químicos 144, 145, 146, 153  
Sustentabilidade 76, 82, 107, 149

## **T**

Taninos 50, 52, 53, 54, 56  
Terpeno 40, 42  
Toxicidade 5, 15, 16, 56, 184  
Troca iônica 84, 85, 147

## V

Voltametria 14, 16, 24

# O ensino e a pesquisa em **QU** **MICA**

[www.atenaeditora.com.br](http://www.atenaeditora.com.br) 

[contato@atenaeditora.com.br](mailto:contato@atenaeditora.com.br) 

[@atenaeditora](https://www.instagram.com/atenaeditora) 

[www.facebook.com/atenaeditora.com.br](https://www.facebook.com/atenaeditora.com.br) 

# 2

 **Atena**  
Editora

Ano 2021

# O ensino e a pesquisa em **QU** **MICA**

[www.atenaeditora.com.br](http://www.atenaeditora.com.br) 

[contato@atenaeditora.com.br](mailto:contato@atenaeditora.com.br) 

[@atenaeditora](https://www.instagram.com/atenaeditora) 

[www.facebook.com/atenaeditora.com.br](https://www.facebook.com/atenaeditora.com.br) 

# 2