

Francisco Odécio Sales
Karine Moreira Gomes Sales
(Organizadores)

Cultura, epistemologia e educação em ciências exatas e da terra



Atena
Editora
Ano 2021

Francisco Odécio Sales
Karine Moreira Gomes Sales
(Organizadores)

Cultura, epistemologia e educação em ciências exatas e da terra



Atena
Editora
Ano 2021

Editora chefe

Profª Drª Antonella Carvalho de Oliveira

Editora executiva

Natalia Oliveira

Assistente editorial

Flávia Roberta Barão

Bibliotecária

Janaina Ramos

Projeto gráfico

Camila Alves de Cremo

Daphynny Pamplona

Gabriel Motomu Teshima

Luiza Alves Batista

Natália Sandrini de Azevedo

Imagens da capa

iStock

Edição de arte

Luiza Alves Batista

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-Não-Derivativos 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 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 Gonçalo de Lima – Universidade Federal do Piauí
Prof. Dr. Takeshy Tachizawa – Faculdade de Campo Limpo Paulista



Cultura, epistemologia e educação em ciências exatas e da terra

Diagramação: Daphynny Pamplona
Correção: Yaidy Paola Martinez
Indexação: Amanda Kelly da Costa Veiga
Revisão: Os autores
Organizadores: Francisco Odécio Sales
Karine Moreira Gomes Sales

Dados Internacionais de Catalogação na Publicação (CIP)

C968 Cultura, epistemologia e educação em ciências exatas e da terra / Organizadores Francisco Odécio Sales, Karine Moreira Gomes Sales. – Ponta Grossa - PR: Atena, 2021.

Formato: PDF

Requisitos de sistema: Adobe Acrobat Reader

Modo de acesso: World Wide Web

Inclui bibliografia

ISBN 978-65-5983-756-4

DOI: <https://doi.org/10.22533/at.ed.564212012>

1. Ciências exatas e da terra. I. Sales, Francisco Odécio (Organizador). II. Sales, Karine Moreira Gomes (Organizadora). III. Título.

CDD 507

Elaborado por Bibliotecária Janaina Ramos – CRB-8/9166

Atena Editora
Ponta Grossa – Paraná – Brasil
Telefone: +55 (42) 3323-5493
www.atenaeditora.com.br
contato@atenaeditora.com.br



Atena
Editora
Ano 2021

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

A coleção “Cultura, epistemologia e educação em ciências exatas e da terra” é uma obra que objetiva uma profunda discussão técnico-científica fomentada por diversos trabalhos dispostos em meio aos seus 17 capítulos. Esse 1º volume abordará de forma categorizada e interdisciplinar trabalhos, pesquisas, relatos de casos e/ou revisões que nos transitam vários caminhos das Ciências exatas e da Terra, bem como suas reverberações e impactos econômicos e sociais a luz da epistemologia.

Tal obra objetiva publicizar de forma objetiva e categorizada estudos e pesquisas realizadas em diversas instituições de ensino e pesquisa nacionais e internacionais. Em todos os capítulos aqui expostos a linha condutora é o aspecto relacionado às Ciências Naturais, tecnologia da informação, ensino de ciências e áreas afins correlatos ao locus cultural.

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 por inovação, tecnologia, ensino de ciências e demais temas. Possuir um material que demonstre evolução de diferentes campos da engenharia, ciência e ensino de forma temporal com dados geográficos, físicos, econômicos e sociais de regiões específicas do país é de suma importância, bem como abordar temas atuais e de interesse direto da sociedade.

Deste modo a obra Cultura, epistemologia e educação em ciências exatas e da terra apresenta uma profunda e sólida fundamentação teórica bem com resultados práticos obtidos pelos diversos professores e acadêmicos que desenvolvem seu trabalho de forma séria e comprometida, apresentados aqui de maneira didática e articulada com as demandas atuais. Sabemos o quão importante é a divulgação científica, por isso evidenciamos também a estrutura da Atena Editora capaz de oferecer uma plataforma consolidada e confiável para estes pesquisadores exporem e divulguem seus resultados.

Francisco Odécio Sales
Karine Moreira Gomes Sales

SUMÁRIO

CAPÍTULO 1..... 1

A SHORT NOTE ON THE ELECTRON-POSITRON PAIR CREATION

Eduardo De Paiva

 <https://doi.org/10.22533/at.ed.5642120121>

CAPÍTULO 2..... 9

BREVES COMENTÁRIOS ACERCA DA GEOQUÍMICA DAS TERRAS PRETAS DE ÍNDIO (TPI's) NA AMAZÔNIA

Matheus Cavalcante Silva

Bianca Soares Costa

Fernanda Ravana da Conceição Silva

 <https://doi.org/10.22533/at.ed.5642120122>

CAPÍTULO 3..... 15

APRENDIZAGEM BASEADA EM PROBLEMAS NO CONTEXTO AROMAS: UMA PROPOSTA DE MATERIAL PARADIDÁTICO PARA O ENSINO DE FUNÇÕES ORGÂNICAS

Fernando Vasconcelos de Oliveira

Vanessa Candito

Mara Elisa Fortes Braibante

 <https://doi.org/10.22533/at.ed.5642120123>

CAPÍTULO 4..... 27

CAPTAÇÃO E ARMAZENAMENTO DA ÁGUA DA CHUVA EM ESCOLA DO CAMPO SITUADA NA REGIÃO DA BACIA HIDROGRÁFICA DO RIO JAURU-MT, ATRAVÉS DE PROJETO SUSTENTÁVEL - CISTERNA

Luiz Cláudio Almeida Martins

Rosiane Alexsandra dos Santos Costa

Solange Aparecida Arrolho da Silva

 <https://doi.org/10.22533/at.ed.5642120124>

CAPÍTULO 5..... 41

CARACTERIZAÇÃO DA ÁGUA DO MAR NO ENTORNO DE FAZENDA MARINHA NA ENSEADA DO BANANAL, ILHA GRANDE, ANGRA DOS REIS, RIO DE JANEIRO

Vanessa de Magalhães Ferreira

Tatiana Ribeiro Briglia

Bruno Saliba Souza Almeida

Gabriel Soares Cruz

Camila de Leon Lousada Borges

Gleici Natali Montanini dos Santos

Marcos Bastos Pereira

 <https://doi.org/10.22533/at.ed.5642120125>

CAPÍTULO 6..... 69

LICENCIAMENTO AMBIENTAL DE EMPREENDIMENTOS MINERÁRIOS EM ÁREAS

CÁRSTICAS NO MUNICÍPIO DE OUROLÂNDIA NO PERÍODO DE 2007 A 2014

Antonieta Antenora Italia Candia

Arlene Lula Moreira De Oliveira

 <https://doi.org/10.22533/at.ed.5642120126>

CAPÍTULO 7..... 81

EVAPOTRANSPIRAÇÃO E OS COEFICIENTES DE CULTURA DO CAUPI NO NORDESTE PARAENSE, BRASIL

Vivian Dielly da Silva Farias

Marcos José Alves de Lima

Hildo Giuseppe Garcia Caldas Nunes

Deborah Luciany Pires Costa

Denis de Pinho Sousa

Paulo Jorge de Oliveira Ponte de Souza

Vandeilson Belfort Moura

Sandra Andréa Santos da Silva

José Farias Costa

Maysa Lorrane Medeiros de Araújo

Dayse Drielly Souza Santana Vieira

 <https://doi.org/10.22533/at.ed.5642120127>

CAPÍTULO 8..... 94

DIAGNÓSTICO ENÉRGICO: UM ESTUDO DE CASO SOBRE O SISTEMA DE ILUMINAÇÃO NA FATEC FRANCO DA ROCHA

Carlos Eduardo Oliveira Santos

José Eduardo Soares de Almeida

Leonardo Augusto dos Santos

Matheus Lira de Almeida

Silvia Maria Farani Costa

Augusto de Toledo Cruz Junior

Valquiria Pereira Alcantara

 <https://doi.org/10.22533/at.ed.5642120128>

CAPÍTULO 9..... 110

FORMAÇÃO INICIAL DOCENTE EM GEOGRAFIA: A IMPORTÂNCIA DE SITUAR A ALFABETIZAÇÃO CARTOGRÁFICA NO CONTEXTO DA ALFABETIZAÇÃO ESPACIAL

Ronaldo Goulart Duarte

 <https://doi.org/10.22533/at.ed.5642120129>

CAPÍTULO 10..... 121

MATERIAL DE APOIO PARA ABORDAGEM DAS TRÊS LEIS DE KEPLER NO ENSINO MÉDIO

Gabriel Luiz Nalon Macedo

 <https://doi.org/10.22533/at.ed.56421201210>

CAPÍTULO 11..... 130

IMPACTO DO USO DA DINÂMICA DE FLUIDOS COMPUTACIONAL NO PROCESSO

ENSINO-APRENDIZAGEM APLICADO À FENÔMENOS DE TRANSPORTE

Vitor Pancieri Pinheiro
Carlos Friedrich Loeffler Neto
Natan Sian das Neves
Roger da Silva Rodrigues

 <https://doi.org/10.22533/at.ed.56421201211>

CAPÍTULO 12..... 139

METODOLOGÍA SUPERFICIE DE RESPUESTA: TRES APLICACIONES A CONJUNTOS DE DATOS REALES

René Castro Montoya
José Vidal Jiménez Ramírez
Mario Castro Flores
Ana Gabriela Osuna Páez

 <https://doi.org/10.22533/at.ed.56421201212>

CAPÍTULO 13..... 154

PERCEÇÃO DO TURISTA SOBRE HOSPITALIDADE: UM ESTUDO NA ROTA ECOLÓGICA ALAGOANA

Gildo Rafael de Almeida Santanata
Marielle Cristina Silva Mendonça
Ademar da Silva Paulino
Uilliane Faustino de Lima

 <https://doi.org/10.22533/at.ed.56421201213>

CAPÍTULO 14..... 163

REAÇÕES DE CETONAS E POLIÁLCOOIS PARTE 1:AUTO-ALDOLIZAÇÃO E CETALIZAÇÃO PROMOVIDAS PELO CATALIZADOR HIDROFÍLICO E AMORFO $\text{SiO}_2\text{-SO}_3\text{H}$, SOB IRRADIAÇÃO DE MICRO-ONDAS

Sandro Luiz Barbosa dos Santos
Stanlei Ivair Klein
Myrlene de Oliveira Ottone
Milton de Souza Freitas
Maria Luiza Pereira e Oliveira

 <https://doi.org/10.22533/at.ed.56421201214>

CAPÍTULO 15..... 172

SIMULAÇÃO DE COMPLEXOS FE(III) E CR(III) POR SIDERÓFOROS

Leonardo Konopaski Andreani
Sérgio Ricardo de Lázaro

 <https://doi.org/10.22533/at.ed.56421201215>

CAPÍTULO 16..... 181

PERCEPCIÓN DE LOS SINALOENSES EN LAS ELECCIONES DEL ESTADO DE SINALOA PARA GOBENADOR, DIPUTADOS FEDERALES Y PRESIDENTES MUNICIPALES EN 2015

René Castro Montoya

José Vidal Jiménez Ramírez

Mario Castro Flores

 <https://doi.org/10.22533/at.ed.56421201216>

CAPÍTULO 17..... 190

TEAM BASED LEARNING: UMA ESTRATÉGIA DE AVALIAÇÃO COLABORATIVA

Telma Vinhas Cardoso

 <https://doi.org/10.22533/at.ed.56421201217>

SOBRE OS ORGANIZADORES 206

ÍNDICE REMISSIVO..... 207

SIMULAÇÃO DE COMPLEXOS FE(III) E CR(III) POR SIDERÓFOROS

Data de aceite: 01/11/2021

Leonardo Konopaski Andreani

Universidade Estadual de Ponta Grossa,
Departamento de Química, Brasil

Sérgio Ricardo de Lázaro

Universidade Estadual de Ponta Grossa,
Departamento de Química, Brasil

RESUMO: Hidroxamatos são sideróforos produzidos tanto por bactérias quanto por plantas para captura de metais do tipo Fe utilizado em seu metabolismo. Todavia, esta captura é baseada em uma estrutura molecular do tipo complexo-metal para sua assimilação. O presente trabalho de simulação estrutural baseada na Teoria do Funcional da Densidade investigou a interação de quatro enantiômeros de hidroxamato com os íons Fe^{3+} e Cr^{3+} . A estes enantiômeros foram realizadas modificações em grupos químicos para estudar possíveis perturbações nas ligações Fe – O e Cr – O essenciais para um favorecimento de formação de complexos entre metal e ligantes hidroxamatos modificados. Os complexos mais estáveis foram os de estrutura D_1 , tanto para o Fe^{3+} quanto para o Cr^{3+} ; enquanto que, a maior energia de ligação foi encontrada para os complexos de Fe^{3+} .

PALAVRAS-CHAVE: DFT, B3LYP, Química computacional, sideróforo, ferro (III), cromo (III), ambiental, planta, agricultura

ABSTRACT: Hydroxamates are siderophores produced by both bacteria and plants to capture

Fe-type metals used in their metabolism. However, this capture is based on a complex-metal molecular structure for its assimilation. The present work of structural simulation based on Density Functional Theory investigated the interaction of four hydroxamate enantiomers with Fe^{3+} and Cr^{3+} ions. Modifications to these enantiomers were carried out in chemical groups to study possible perturbations in the Fe – O and Cr – O bonds, essential for favoring the formation of complexes between metal and modified hydroxamate ligands. The most stable complexes were those with a Δ_1 structure for both Fe^{3+} and Cr^{3+} ; while, the highest binding energy was found for the Fe^{3+} complexes.

KEYWORDS: DFT, B3LYP, computational chemistry, siderophore, iron (III), chrome (III), environment, plant, agriculture

INTRODUÇÃO

O Ferro é um importante elemento, sendo essencial em diversos processos biológicos, pois tem uma grande capacidade de aceitar ou doar elétrons a partir da interconversão do Fe^{3+} em Fe^{2+} . Os seres humanos obtêm Fe a partir da alimentação, sendo fundamental no organismo para o transporte de O_2 por meio da hemoglobina. No caso das plantas e micro-organismos a absorção de Fe do solo é dificultada devido a baixa solubilidade do Fe; Este problema é contornado utilizando-se de moléculas especializadas na captura de metais,

chamadas de sideróforos.¹

Sideróforos (do grego sideros = ferro e foros = transportador) possuem uma grande afinidade pelo Fe, e por meio delas o metal é solubilizado e transportado. A bactéria excreta o sideróforo no ambiente ao seu redor, formando um composto solúvel com o metal que em seguida é absorvido e transportado a região que onde há demanda de Fe.²

Sabendo a importância dos sideróforos para as plantas, uma aplicação, seria adicionar sideróforos no solo para que as plantas tenham maior absorção do metal, agindo como um suplemento para as plantas. Outra possibilidade de aplicação seria no sequestro de metais pesados em áreas contaminadas, devido a grande afinidade do sideróforo pelo metal, por meio da formação de quelatos (fitorremediação).^{3,4}

Uma categoria de sideróforos são os hidroxamatos, sendo estes o objeto de estudo do presente trabalho. A estrutura base do hidroxamato é uma carbonila ligada a uma cadeia lateral e a uma hidroxilamina conectada a um radical (figura 1). O complexo investigado apresenta três sideróforos ligados ao metal de transição (Fe, Cr). Para o estudo das propriedades estruturais e eletrônicas do complexo foi utilizado a Teoria do Funcional da Densidade (TDF ou DFT). Esta teoria pode ser entendida como uma reformulação da mecânica quântica, pois não é operada sob a função de onda (ψ) mas sim sobre a densidade eletrônica (ρ). Para representar um sistema na DFT é necessário um termo de troca e correlação (funcional) e um conjunto de funções para descrever os elétrons (conjuntos de bases).⁵

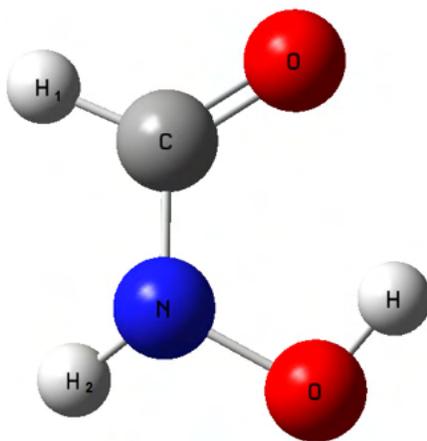


Figura 1. Estrutura do hidroxamato, ligante base dos complexos octaédricos de Fe^{3+} e Cr^{3+} , onde $\text{H}_{1,2} = \text{H}, \text{CH}_3, \text{C}_6\text{H}_5$ em diferentes combinações.

Na teoria DFT surge o termo de troca e correlação (*exchange-correlation*). Este termo representa as interações entre elétron-elétron, é possível descrever de forma aproximada o termo de diversas maneiras, esta descrição é o maior dos problemas da metodologia DFT,

existem diversos estudos para se encontrar o funcional que melhor descreva este termo para determinados sistemas. Um dos funcionais mais utilizados atualmente é o funcional B3LYP, que é descrito pela equação 1.^{6, 7, 8, 9}

$$E_{xc}(B3LYP) = (1 - \alpha)E_x(LDA) + \alpha E_x(HF) + b\Delta E_x(B88) + (1 - c)E_c(VWN3) + cE_c(LYP) \quad (1)$$

Os valores de a, b e c são 0,2; 0,72 e 0,81 respectivamente, estes são valores experimentais obtidos com o ajuste dos valores experimentais das energias de atomizações moleculares. O B3LYP utiliza-se de três parâmetros determinados por Becke, o último parâmetro mistura os termos de correlação de LYP com aqueles projetados por Vosko, Wilk e Nusair “VWN”.¹⁰

Em Química Computacional, Conjuntos de Base são um conjunto de funções matemáticas que representam combinações lineares de orbitais atômicos, e o comportamento da distribuição dos seus elétrons, ou seja, cada átomo em uma molécula precisa conter seu Conjunto de Base para ser simulado por método HF ou TFD. A partir das Equações de Roothaan-Hall, podemos construir os orbitais moleculares utilizando a combinação linear dos orbitais atômicos, e em seguida obter as propriedades do sistema. Um dos tipos de funções de base são as funções Gaussianas, estas funções têm um perfil melhor para realizar-se múltiplas operações matemáticas pelo computador em um curto espaço de tempo, comparado com os demais tipos de funções de base. A Base 6-31+G(d, p) é uma base difusa e com polarização, ou seja, esta base consegue descrever interações a longa distância de modo satisfatório, e as funções de polarização dos orbitais, com um custo computacional acessível.¹¹

METODOLOGIA COMPUTACIONAL

Utilizou-se do software comercial GAUSSIAN09 para as simulações realizadas, descreveu-se as propriedades dos sistemas a partir do funcional B3LYP, e todos os elétrons dos sistemas foram representados pelo conjunto de base 6-31+G(d, p). Foram realizadas simulações dos complexos de Fe³⁺ e Cr³⁺ com 3 ligantes hidroxamato em diferentes arranjos e conformações, em seguida realizou-se diferentes substituições para formação dos ligantes nos dois Hidrogênios terminais H1 e H2 (figura 1) pelos grupos químicos metil e fenil. A Tabela 1 mostra as respectivas substituições realizadas.¹²

Ligantes	Substituinte do H1	Substituinte H2
1	-H	-H
2	-CH3	-H
3	-H	-CH3
4	-C6H5	-H

5	-H	-C6H5
6	-CH3	-CH3
7	-CH3	-C6H5
8	-C6H5	-CH3

Tabela 1. Combinações de substituições para formação dos ligantes realizadas sobre o átomo de N e C.

Inicialmente as estruturas foram relaxadas diante da Energia Total do Sistema (E_{tot}), para a validação e obtenção da correção da Energia do ponto zero da estrutura (E_{zero}) de menor energia realizou-se o respectivo cálculo de frequência. Para o estudo das energias de ligação foi necessário realizar cálculos dos átomos de Fe^{3+} no estado duplete e Cr^{3+} no estado quadruplete. Também foi necessário o cálculo dos ligantes desprotonados em uma conformação onde a orientação dos oxigênios da ligação -cis.

RESULTADOS E DISCUSSÃO

Inicialmente, por meio do estudo da estrutura dos complexos notou-se a presença de atividade óptica por aplicação de simetria gerando um complexo Delta (Δ) e seu enantiômero Lambda (Λ). Todavia, existe a possibilidade de um segundo arranjo estrutural para novos isômeros (figura 2). Essas estruturas foram denominadas $\Delta 1/\Lambda 1$ e $\Delta 2/\Lambda 2$.

O complexo de $Fe^{3+} / Cr^{3+} \Delta 1$ (Fig. 1a) é enantiômero do complexo de $Fe^{3+} / Cr^{3+} \Lambda 1$ (Fig. 1b), já para o complexo de $Fe^{3+} / Cr^{3+} \Delta 2$ (Fig. 1c) o seu enantiômero é o complexo de $Fe^{3+} / Cr^{3+} \Lambda 2$ (Fig. 1d). A Energia total de $\Delta 1$ é igual a energia total de $\Lambda 1$ com um valor de -1997,0187 hartree, e a energia total do complexo $\Delta 2$ é igual ao de $\Lambda 2$ com um valor de -1997,0159 Hartree. Portanto, as estruturas mais estáveis são a de $\Delta 1/\Lambda 1$ apresentando uma diferença de energia de 0,0028 Hartree em relação ao complexo $\Delta 2$ e seu enantiômero $\Lambda 2$. As diversas propriedades de $\Delta 1$ e $\Delta 2$ são semelhantes podendo serem consideradas iguais. Portanto todos cálculos foram realizados utilizando-se como base os complexos $\Delta 1/\Lambda 1$. Os resultados para cargas baseadas no cálculo de Natural Bond Orbital (NBO) mostram que a distribuição de carga do átomo de Fe e C é mais localizada nos elementos mais eletronegativos (O, N), demonstrando uma maior polarização na ressonância em relação à característica do grupo substituinte.

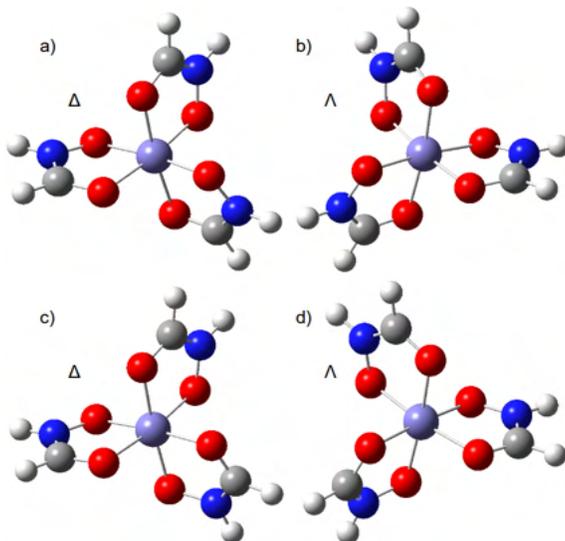


Figura 2. Possíveis isômeros com os ligantes hidroxamato e os metais Fe ou Cr em uma simetria octaédrica. As esferas nas cores púrpura, vermelha, azul, cinza e branco representam os átomos de Fe ou Cr, O, N, C e H; respectivamente.

Na Tabela 1 são apresentados os resultados de Energia total, orbitais de fronteira HOMO e LUMO e *Gap* para as estruturas enantioméricas simuladas. O *Gap* (E_{gap}) é definido como a Energia do orbital LUMO (E_{LUMO}) menos a Energia do Orbital HOMO (E_{HOMO}) como mostrado na Equação 2 abaixo:

$$E_{gap} = E_{LUMO} - E_{HOMO} \quad (2)$$

Tabela 1. Valores da Energia total do sistema (E_{tot}), em hartree, corrigidos pela energia do ponto zero, e os autovalores (hartree) relacionados aos orbitais de fronteira para os complexos de Fe^{3+} e Cr^{3+} . Os valores do *Gap* (eV) são predominantemente do canal de spin β . para o complexo de Fe^{3+} e ao canal de spin α para o complexo de Cr^{3+} .

Complexo de Fe^{3+}	E_{tot} (HOMO	LUMO	<i>Gap</i>
Δ_1	-1997,0187	-0,2033	-0,0734	3,53
Λ_1	-1997,0187	-0,2033	-0,0734	3,53
Δ_2	-1997,0159	-0,2001	-0,0766	3,36
Λ_2	-1997,0159	-0,2001	-0,0766	3,36
Complexo de Cr^{3+}	E_{tot} (HOMO	LUMO	<i>Gap</i>
Δ_1	-1777,8866	-0,2044	-0,0313	4,71
Λ_1	-1777,8866	-0,2044	-0,0313	4,71
Δ_2	-1777,8878	-0,2076	-0,0255	4,96
Λ_2	-1777,8878	-0,2076	-0,0255	4,96

Nenhuma das estruturas moleculares apresentou valores de frequência de vibração negativa, logo as estruturas são realmente a estrutura de menor energia. Podemos notar que as energias dos enantiômeros (Δ, Λ) são muito próximas, porém, é esperado mudança na atividade óptica. Notamos que os enantiômeros Δ_1, Λ_1 são os mais estáveis para o complexo de Fe com uma diferença de 1,78 kcal/mol entre o arranjo mais estável e o de maior energia (Tabela 1). Não notamos o mesmo para o complexo de Cr onde os enantiômeros 2 (Δ_2, Λ_2) são os de menor energia, com uma diferença de 0,74 kcal/mol (Tabela 1).

Tabela 2. Valores da Energia total do sistema (E_{tot}) corrigidos pela energia do ponto zero, energias dos orbitais de fronteira HOMO e LUMO para os ligantes desprotonados e *Gap* (eV).

Substituição nº	E_{tot} (Hartree)	HOMO (Hartree)	LUMO (Hartree)	<i>Gap</i> (eV)
s1	-244,4607	0,0179	0,1409	3,35
s2	-283,7465	0,0163	0,1254	2,97
s3	-283,7547	0,0198	0,1231	2,81
s4	-475,4567	-0,0107	0,0999	3,01
s5	-475,4587	-0,0036	0,0919	2,59
s6	-323,0346	0,0199	0,1168	2,63
s7	-514,7357	0,0004	0,0921	2,49
s8	-514,7415	-0,0048	0,0992	2,83

Com o objetivo de estudar a energia de ligação entre o metal e os diferentes ligantes com variados substituintes, foi necessário fixar uma única estrutura para que possamos comparar os efeitos dos ligantes, a estrutura escolhida foi a tanto para o Fe quanto Cr, devido a menor Energia total encontrada (Tabela 2).

Tabela 3. Valores da Energia total do sistema (E_{tot}) e energias de HOMO e LUMO, em hartree, obtidas das estruturas do complexo de Fe^{3+} (Δ_1) e do complexo de Cr^{3+} (Δ_1) com os diferentes ligantes, nenhum dos cálculos apresentou vibrações imaginárias. *Gap* (eV) de spin α para o complexo de Fe^{3+} e de spin β para o complexo de Cr^{3+} .

Combinação para Fe^{3+}	E_{tot}	HOMO	LUMO	<i>Gap</i>
1	-1997,0187	-0,2032	-0,0735	3,53
2	-2114,8904	-0,1931	-0,0639	3,52
3	-2114,9239	-0,1901	-0,0587	3,57
4	-2689,9801	-0,2018	-0,0747	3,46
5	-2690,0074	-0,1922	-0,0640	3,49
6	-2232,7843	-0,1797	-0,0481	3,58

7	-2807,8619	-0,1838	-0,0523	3,58
8	-2807,8677	-0,1863	-0,0573	3,51
Combinação para Cr3+	Etot	HOMO	LUMO	Gap
1	-1777,8866	-0,2044	-0,0313	4,71
2	-1895,7587	-0,1946	-0,0218	4,70
3	-1895,7917	-0,1904	-0,0174	4,71
4	-2470,8466	-0,2096	-0,0550	4,21
5	-2470,8750	-0,1931	-0,0509	3,87
6	-2013,6513	-0,1799	-0,0102	4,62
7	-	-	-	-
8	-2588,7348	-0,1869	-0,0332	4,18

Para obter o valor médio das ligações entre O e o M realizou-se o seguinte balanço de energia:

$$E_{\text{ligação}} = \frac{1}{6} [E_{\text{complexo}} - (3 * E_{\text{ligante}} + E_{\text{metal}})] \quad (3)$$

Onde E_{complexo} corresponde a E_{tot} do complexo de Fe ou Cr com os diferentes tipos de ligantes, E_{ligante} corresponde a E_{tot} dos ligantes desprotonados, E_{metal} a energia do cátion Fe^{3+} ou Cr^{3+} nos estados eletrônicos duplete e quadruplete, respectivamente. Com os valores de energia de cada componente, obteve-se os valores da energia de ligação ($E_{\text{ligação}}$) para cada complexo. A tabela 4 apresenta os valores das ligações médios entre M e O em kcal/mol.

Metal	Substituinte	$E_{\text{ligação}}$ M-O (kcal/mol)
Fe	1	-248,33
	2	-249,83
	3	-250,76
	4	-245,55
	5	-247,78
	6	-252,93
	7	-250,24
	8	-249,02
Cr	1	-230,53
	2	-232,06
	3	-232,94
	4	-227,60
	5	-229,94
	6	-235,02
	7	-
	8	-231,13

Tabela 4. Energias de ligação média entre o M e O nos diferentes complexos de Fe^{3+} e Cr^{3+} , valores obtidos aplicando-se a equação 3.

Analisando as energias de ligação para o Fe^{3+} podemos notar que a ligação de maior energia é a com o ligante 6 com um valor de -252,93 kcal/mol; enquanto que, a menor energia de ligação com esse metal foi com o substituinte 4 com -245,55 kcal/mol. De modo geral, os substituintes não afetaram significativamente o valor médio da energia de ligação, a diferença entre a energia de maior valor e menor é de 7,37 kcal/mol, comparando esta diferença de energia com a maior energia de ligação, o valor da diferença é de somente 2,9% da maior energia.

A ligação de maior energia para a ligação Cr – O foi calculada com o ligante 6, e a menor com o ligante 4 com valores de -235,02 e -227,60 kcal/mol respectivamente. Observamos que, as substituições dos ligantes não afetam diretamente a variação de energia de ligação entre os átomos de Cr e O, a energia da ligação tem um intervalo máximo de 7,42 kcal/mol, confrontado com a ligação de maior energia este valor é de 3,2%.

Vemos que o ligante 6, o qual consiste em um grupo metílico ligado ao C e outro ligado ao N na estrutura do hidroxamato, possibilita uma maior energia de ligação entre o hidroxamato em ambos os metais. A substituição 4 que consiste em um grupo fenil ligado ao N e um H ligado ao C, promove uma menor interação do hidroxamato com os metais quando comparado com os demais substituintes.

Podemos notar que independentemente do substituinte ligado aos átomos de C e N presentes na estrutura do hidroxamato, a ligação deste é mais efetiva com o Fe^{3+} do que com o Cr^{3+} , a média da energia de ligação do Fe^{3+} com o hidroxamato em todos os substituintes têm um valor de -249,31 kcal/mol, enquanto que, o Cr^{3+} tem valor de -231,32 kcal/mol. Assim, é previsto que o Fe^{3+} tem uma interação de 17,99 kcal/mol maior do que a interação do Cr^{3+} com o hidroxamato.

CONCLUSÃO

Concluimos que as estruturas moleculares para o hidroxamato se mostraram muito versáteis com quatro enantiômeros. As simulações indicam que o Fe^{3+} tem maior energia de ligação do que o Cr^{3+} para estes ligantes hidroxamatos.

AGRADECIMENTOS

As agências de fomento CAPES e CNPq.

REFERÊNCIAS

- 1- NEILANDS, J. B.. Siderophores: Structure and Function of Microbial Iron Transport Compounds. **Journal Of Biological Chemistry**, [s.l.], v. 270, n. 45, p.26723-26726, 10 nov. 1995.
- 2- PATRIARCA, E.J.; TATÈ, R.; IACCARINO, M. Key Role of Bacterial NH_4^+ metabolismo in *Rhizobium*-Plant Symbiosis. **Microbiology and Molecular Bioly Review**, Washington, v.66, p.203-222, 2002.
- 3- RAJKUMAR, Mani; AE, Noriharu; FREITAS, Helena. Endophytic bacteria and their potential to enhance heavy metal phytoextraction. **Chemosphere**, [s.l.], v. 77, n. 2, p.153-160, set. 2009.
- 4- BRAUD, A.; JEZEQUEL, K.; LEGER, M.A.; LEBEAU, T. Siderophore production by using free and immobilized cells of two pseudomonads cultivated in a médium enriched with Fe and/or toxic metals (Cr, Hg, Pb). **Biotechnology and Bioengineering**, new York, v.94, p.1080-1088, 2006.
- 5- BENITE, Anna Maria Canavarro; MACHADO, Sérgio de Paula; MACHADO, Bianca da Cunha. Sideróforos: uma resposta dos microorganismos. **Química Nova**, [s.l.], v. 25, n. 6, p.1155-1164, dez. 2002.
- 6- PERDEW, J. P.. Density-functional approximation for the correlation energy of the inhomogeneous electron gas. **Physical Review B**, [s.l.], v. 33, n. 12, p.8822-8824, 15 jun. 1986. American Physical Society (APS).
- 7- PARR, R. G.; YANG, W. **Density Functional Theory**. New York: Oxford University Press Inc., 1989.
- 8- BECKE, A. D.. Density-functional exchange-energy approximation with correct asymptotic behavior. **Physical Review A**, [s.l.], v. 38, n. 6, p.3098-3100, 1 set. 1988. American Physical Society (APS).
- 9- LEE, C.; YANG, W.; PARR, R. G. Development of the Colle-Salvetti correlationenergy formula into a functional of the electron density. **Phys. Rev B**.37: 785, 1988.
- 10- VOSKO, S. H.; WILK, L.; NUSAIR, M.. Accurate spin-dependent electron liquid correlation energies for local spin density calculations: a critical analysis. **Canadian Journal Of Physics**, [s.l.], v. 58, n. 8, p.1200-1211, ago. 1980. Canadian Science Publishing.
- 11- LEWARS, E.G. **Computational Chemistry**: Introduction to Theory and Applications of Molecular and Quantum Mechanics. 2ed. Springer, 2011.
- 12- FRISCH, M.J.; TRUCKS, G.W.; SCHLEGEL, H.B.; SCUSERIA, G.E.; ROBB, M.A.; CHEESEMAN, J.R.; et al. **Gaussian 09**, Revision B.01; 2009.

ÍNDICE REMISSIVO

SÍMBOLOS

1-3 dioxolanas 163

A

Agricultura 12, 48, 66, 93, 108, 122, 149, 172

Alfabetização espacial 5, 110, 111, 115, 117, 118

Alfabetização geográfica 110, 112, 114, 115, 118

Amazônia 4, 9, 10, 11, 12, 13, 14, 81, 83, 93

Aprendizagem baseada em problemas; 15

Aromas; 15, 16

Auto-aldolização 6, 163

Avaliação 7, 19, 29, 38, 82, 93, 109, 111, 156, 157, 159, 160, 190, 191, 194, 195, 198, 200, 201, 202, 204, 206

B

B3LYP 172, 174

C

Cetalização 6, 163, 166, 167

Cetonas protonadas 163

Cromo (III) 172

D

Década do oceano 42, 48

Demanda hídrica 82

DFT 172, 173

Diagnóstico energético 94, 96, 97, 98

Dinâmica de fluidos computacional 5, 130

Diseño y análisis de experimentos 139

E

Electron-positron pair 4, 1, 2, 5, 7

Ensino de Física 8, 121, 128, 129, 203

Ensino de química 15, 16, 23, 24, 25

Ensino e aprendizagem 130, 191

Estratificado 181, 184, 185, 187, 189

F

Fenômenos de transporte 6, 130, 131, 138

Ferro (III) 172

G

Geoquímica 4, 9, 12, 13

H

Hidrólise de cetais 163

História da física 121, 127

Hospitalidade 6, 154, 156, 160, 161

I

Iluminação artificial 94, 96

J

Johannes Kepler 121, 122, 124, 125, 128, 129

L

LED 94, 95, 96, 97, 101, 102, 103, 105, 107, 108, 109

Lisímetros 82, 83, 84, 85, 86, 93

M

Malacocultura 42, 43, 45, 46, 47, 49

Meio ambiente 33, 34, 35, 36, 38, 51, 64, 69, 70, 71, 76, 78, 94, 95, 97, 101, 102, 106, 154, 161

Metodología 6, 139, 140, 141, 153, 189

Metodologia ativa 23, 25, 190, 193, 202

Modelos 32, 82, 83, 97, 132, 135, 138, 139, 141

Movimento planetário 121, 123, 124, 125, 126, 127, 129

Muestreo 181, 182, 183, 184, 185, 186, 187, 189

O

Oceanografia 41, 42

P

Pair production 1, 2, 3, 6, 7, 8

Pensamento espacial 110, 111, 112, 114, 115, 117, 118, 119

Piscicultura marinha 42, 44, 47, 49, 63

Planejamento 27, 31, 95, 155, 161, 162, 192, 201, 206

Población 181, 183, 184, 185, 186, 187, 189

Posicionamento estratégico 154, 157

Propostas de aulas 121, 123, 124, 125, 126, 127, 128

Q

Química computacional 172, 174

S

Sideróforo 172, 173

Sílica sulfonada 163, 165

Superfície de resposta y pruebas de hipótesis 139

Sustentabilidade 10, 12, 13, 14, 27, 33, 34, 35, 38, 40, 42, 47, 48, 102, 155, 157, 159, 160

T

Tamaño de muestra 181, 183, 184, 185, 186, 189

Team based learning 7, 190, 192, 202

Terras pretas 4, 9, 10, 11, 12, 13, 14

Triplet pair production 1, 3, 6, 7, 8

U

Uso consciente 35

V

Vigna unguiculata L 82, 87

W

Walp. Penman-monteith 82

Cultura, epistemologia e educação em ciências exatas e da terra



www.atenaeditora.com.br 

contato@atenaeditora.com.br 

@atenaeditora 

www.facebook.com/atenaeditora.com.br 

Atena
Editora

Ano 2021

Cultura, epistemologia e educação em ciências exatas e da terra



www.atenaeditora.com.br 

contato@atenaeditora.com.br 

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

www.facebook.com/atenaeditora.com.br 

 **Atena**
Editora

Ano 2021