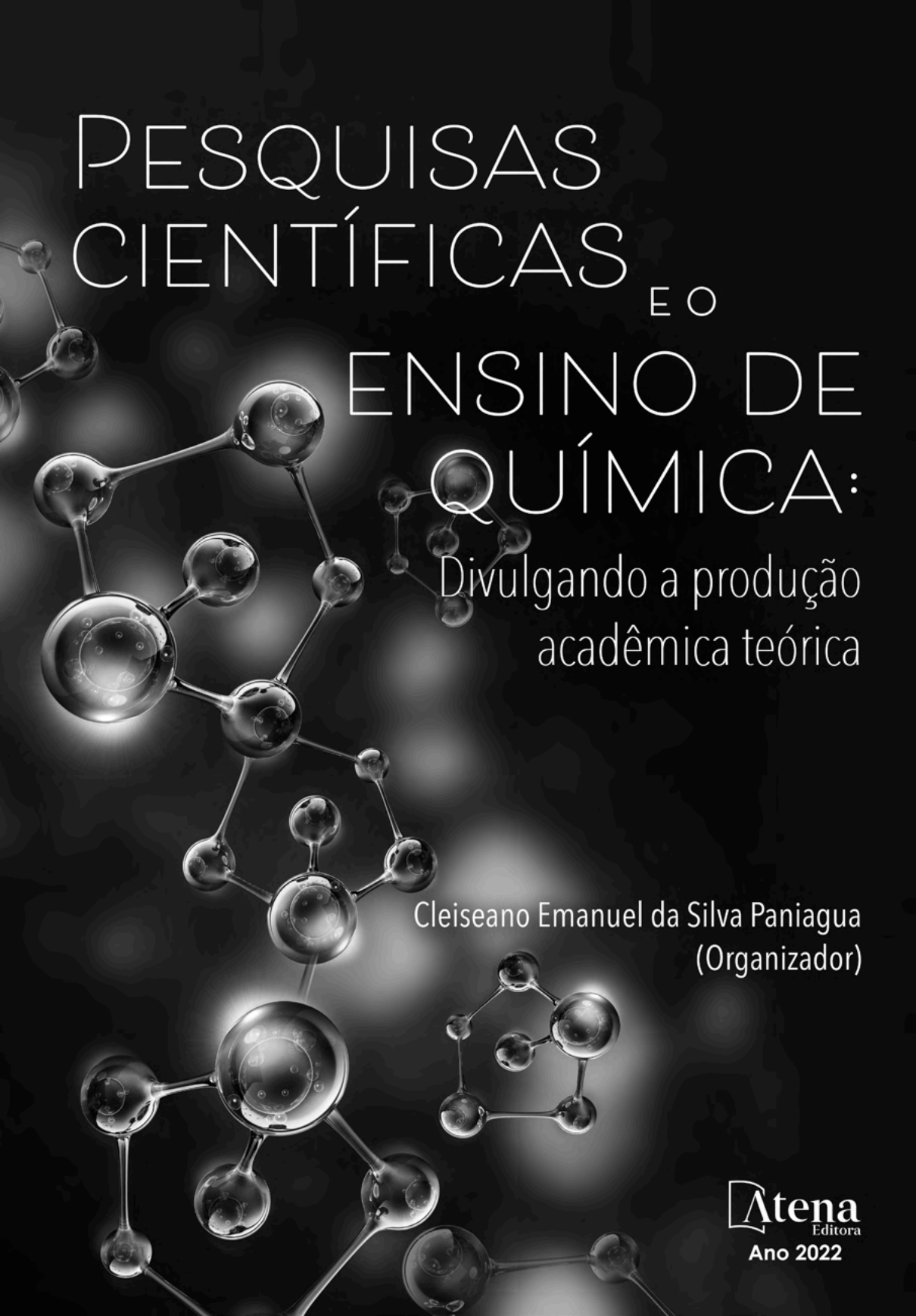


PESQUISAS  
CIENTÍFICAS E O  
ENSINO DE  
QUÍMICA:  
Divulgando a produção  
acadêmica teórica

Cleiseano Emanuel da Silva Paniagua  
(Organizador)

**Atena**  
Editora  
Ano 2022



PESQUISAS  
CIENTÍFICAS E O  
ENSINO DE  
QUÍMICA:  
Divulgando a produção  
acadêmica teórica

Cleiseano Emanuel da Silva Paniagua  
(Organizador)

**Atena**  
Editora  
Ano 2022

**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

2022 by Atena Editora

Copyright © Atena Editora

Copyright do texto © 2022 Os autores

Copyright da edição © 2022 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 Alana Maria Cerqueira de Oliveira – Instituto Federal do Acre

Profª Drª Ana Grasielle Dionísio Corrêa – Universidade Presbiteriana Mackenzie

Profª Drª Ana Paula Florêncio Aires – Universidade de Trás-os-Montes e Alto Douro

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 Bitencourt Campos – Universidade do Extremo Sul Catarinense  
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  
Prof. Dr. Miguel Adriano Inácio – Instituto Nacional de Pesquisas Espaciais  
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



# Pesquisas científicas e o ensino de química: divulgando a produção acadêmica teórica

**Diagramação:** Camila Alves de Cremo  
**Correção:** Bruno Oliveira  
**Indexação:** Amanda Kelly da Costa Veiga  
**Revisão:** Os autores  
**Organizador:** Cleiseano Emanuel da Silva Paniagua

## Dados Internacionais de Catalogação na Publicação (CIP)

P474 Pesquisas científicas e o ensino de química: divulgando a produção acadêmica teórica / Organizador Cleiseano Emanuel da Silva Paniagua. – Ponta Grossa - PR: Atena, 2022.

Formato: PDF

Requisitos de sistema: Adobe Acrobat Reader

Modo de acesso: World Wide Web

Inclui bibliografia

ISBN 978-65-5983-882-0

DOI: <https://doi.org/10.22533/at.ed.820220102>

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



**Atena**  
Editora  
Ano 2022

## 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: “Pesquisas científicas e o ensino de química: Divulgando a produção acadêmica teórica” é constituído por nove capítulos que foram organizados e divididos em três temáticas, a saber: *i)* ensino-aprendizagem e formação continuada de professores de química; *ii)* química orgânica e de produtos naturais; e *iii)* avaliação das propriedades do grafeno e sua potencialidade no desenvolvimento de novos materiais.

O primeiro tema é composto por três capítulos que procuraram avaliar: *i)* a importância da matemática no processo de ensino-aprendizagem de alunos ingressantes, veteranos, egressos e os próprios docentes do curso de licenciatura em química; *ii)* a prática docente e a formação continuada de professores a partir da implementação das diretrizes presentes BNCC e na Reforma do Ensino Médio e; *iii)* o relato de experiência de um professor em relação a importância do processo de formação continuada e a implementação do uso de Tecnologias de Informação e Comunicação (TICs) na proposição de metodologias ativas.

O segundo tema é constituído por cinco capítulos de livros que investigaram: a influência da altitude na qualidade do Café Conilon produzido no estado do Espírito Santo; avaliação físico-química do Eucalipto como potencial fonte de obtenção de energia renovável; estudo de prospecção científica da espécie *Annona muricata*; avaliação dos constituintes químicos das sementes de *Senna acuruensis Benth* e aplicação de benzofenonas e xantonas nitrificadas como antifúngico para *Candida spp.*

Por fim, a terceira temática é constituída de um único capítulo de livro que trata do processo de passivação aplicado a nanoporos de grafeno para o desenvolvimento de novos compostos ou materiais.

Nesta perspectiva, a Atena Editora vem trabalhando com o intuito de estimular e incentivar os pesquisadores brasileiros e de outros países a publicarem seus trabalhos com garantia de qualidade e excelência em forma de livros e capítulos de livros que são disponibilizados de forma gratuita no site da Editora e em outras plataformas digitais.

Cleiseano Emanuel da Silva Paniagua




## SUMÁRIO

### **CAPÍTULO 1..... 1**

O ENSINO BASEADO NA RESOLUÇÃO DE PROBLEMAS E SUAS CONTRIBUIÇÕES PARA A PRÁTICA DOCENTE NO ENSINO DAS CIÊNCIAS NO CONTEXTO DA BNCC E DA REFORMA DO ENSINO MÉDIO

Andréia Severina da Silva

Roberto Araújo Sá


 <https://doi.org/10.22533/at.ed.8202201021>

### **CAPÍTULO 2..... 11**

A IMPORTÂNCIA DA MATEMÁTICA PARA APRENDIZAGEM EM QUÍMICA

Eder Alonso Castro


Ítalo Eduardo Fernandes Armond

 <https://doi.org/10.22533/at.ed.8202201022>

### **CAPÍTULO 3..... 33**

RELATO DE EXPERIÊNCIA DO PROCESSO DE FORMAÇÃO INICIAL E CONTINUADA DE UM PROFESSOR DE QUÍMICA: APRESENTAÇÃO, HISTÓRICO, DESAFIOS E PERSPECTIVAS NA CARREIRA DOCENTE

Cleiseano Emanuel da Silva Paniagua

 <https://doi.org/10.22533/at.ed.8202201023>

### **CAPÍTULO 4..... 44**

ANÁLISE DE VOLÁTEIS DE CAFÉ CONILON CULTIVADOS EM DIFERENTES ALTITUDES


Gabriel Vitoriano Braga

Vanessa Moreira Osório

Alice Jadjischi Bernardino

Maria Isadora Pereira Lima

Karla Morera Vieira

 <https://doi.org/10.22533/at.ed.8202201024>

### **CAPÍTULO 5..... 52**

CARACTERIZAÇÃO FÍSICO-QUÍMICA DA BIOMASSA TORRIFICADA DE *Eucalyptus grandis* Hill ex-Maiden, SUBMETIDA A DUAS TAXAS VARIÁVEIS DE AQUECIMENTO


André Luiz Canan

Aline Bavaresco dos Santos

Maiara Aguiar

Alexandre Leseur dos Santos

Adriana Ferla de Oliveira


 <https://doi.org/10.22533/at.ed.8202201025>

### **CAPÍTULO 6..... 63**

PROSPECÇÃO CIENTÍFICA E TECNOLÓGICA DA ESPÉCIE *Annona muricata*

Márcia Denise Alves Veras


Joana Darc Rodrigues Moura  
Gerardo Magela Vieira Júnior  
Mariana Helena Chaves

 <https://doi.org/10.22533/at.ed.8202201026>

**CAPÍTULO 7..... 72**

**CONSTITUINTES QUÍMICOS DAS SEMENTES DE *Senna acuruensis* Benth.  
IDENTIFICADOS POR CG-EM**


Rodrigo Ferreira Santiago  
Luanda Ferreira Floro da Silva  
Lucivania Rodrigues dos Santos  
Elcilene Alves de Sousa  
Gerardo Magela Vieira Júnior  
Mariana Helena Chaves

 <https://doi.org/10.22533/at.ed.8202201027>

**CAPÍTULO 8..... 85**

**AUMENTO DA ATIVIDADE CONTRA *Candida* spp. POR NITRAÇÃO DE BENZOFENONAS  
E XANTONAS**


Júnio Gonçalves da Silva  
Bianca Lana de Sousa  
Liseth Suárez Osorio  
Dayana Alves Rodrigues  
Maria Cecília Fernandes Dias  
Gabriela Milane Furlani  
Naiara Chaves Silva  
Amanda Latércia Tranches Dias  
Marcelo Henrique dos Santos

 <https://doi.org/10.22533/at.ed.8202201028>

**CAPÍTULO 9..... 94**

**PASSIVAÇÃO DE BORDA EM NANOPOROS DE GRAFENO: UM ESTUDO DE CASO  
USANDO CÁLCULOS DE PRIMEIROS PRINCÍPIOS**

Letícia Finger Basso  
Vagner Alexandre Rigo  
Fernando José Antônio

 <https://doi.org/10.22533/at.ed.8202201029>

**SOBRE O ORGANIZADOR..... 109**

**ÍNDICE REMISSIVO ..... 110**

## PASSIVAÇÃO DE BORDA EM NANOPOROS DE GRAFENO: UM ESTUDO DE CASO USANDO CÁLCULOS DE PRIMEIROS PRINCÍPIOS

Data de aceite: 10/01/2022

Data de submissão: 15/12/2021

### Leticia Finger Basso

Universidade Tecnológica Federal do Paraná  
Cornélio Procópio – Paraná  
<http://lattes.cnpq.br/6038775369306111>

### Vagner Alexandre Rigo

Universidade Tecnológica Federal do Paraná  
Cornélio Procópio – Paraná  
<http://lattes.cnpq.br/8134733370926343>

### Fernando José Antônio

Universidade Tecnológica Federal do Paraná  
Cornélio Procópio – Paraná  
<http://lattes.cnpq.br/2833172211868473>

**RESUMO:** A grafite e o grafeno são materiais considerados promissores no desenvolvimento de novos compostos e dispositivos de filtragem molecular, sendo que nanoporos de grafeno de reduzidas dimensões são considerados os mais favoráveis para dessalinização da água. Este estudo emprega a Teoria do Funcional da Densidade para encontrar as propriedades estruturais do grafite e também avaliar a passivação de borda por átomos de hidrogênio mais favorável energeticamente para um nanoporo 12,6 Å de diâmetro. Na grafite, a distância entre carbonos em uma mesma camada foi 1,42610 Å, enquanto a distância entre as camadas foi 3,58446 Å, resultados que diferem 0,43% e 7% dos dados experimentais, respectivamente. Para o nanoporo de grafeno

com 12,6 Å de diâmetro, os resultados mostraram que a presença de dois hidrogênios passivando um carbono da borda é mais estável que apenas um hidrogênio por aproximadamente 3 eV. Esse resultado revela que a maior estabilidade energética ocorre na presença de apenas ligações  $\sigma$  na borda, comparado com aquela com ligação  $\pi$ , sendo que essa geometria pode afetar a eficiência da nanofiltragem de nanoporos.

**PALAVRAS-CHAVE:** Grafite, Grafeno, Nanoporo, Nanociência.

### EDGE PASSIVATION IN GRAPHENE NANOPORES: A CASE STUDY USING FIRST-PRINCIPLES CALCULATIONS

**ABSTRACT:** Graphite and graphene are considered promising materials for the development of new compounds and molecular filtration devices, where graphene nanopores of small dimensions are considered the most favorable for water desalination. This study employs The Density Functional Theory to find the structural properties of graphite and also obtain the most energetically favorable edge passivation for a 12.6 Å diameter nanopore. In graphite, the intralayer distance between carbons is 1.42610 Å, while the distance between adjacent layers is 3.5845 Å. Those results differ by 0.43% and 7% from the experimental data, respectively. For the 12.6 Å diameter graphene nanopore, the results showed that the presence of two hydrogens passivating an edge carbon is more stable than just one hydrogen by approximately 3 eV. These findings reveal that the energetic stability occurs in the presence of only  $\sigma$ -bonds at the edge, compared to  $\pi$ -bond, and such results can affect

the filtering properties of nanopores.

**KEYWORDS:** Graphite, Graphene, Nanopore, Nanoscience.

## 1 | INTRODUÇÃO

A pesquisa e o desenvolvimento de novos materiais baseados em carbono mostraram significativos avanços ao longo das últimas décadas, sendo que as descobertas alavancaram, em muitos casos, o desenvolvimento de novos produtos, seja por permitir novas funcionalidades ou a substituição de matérias-primas por compostos de menor custo, que em muitos casos também se mostraram mais eficazes. Como exemplo pode-se citar biomateriais e materiais biocompatíveis (DE MOURA, et al 2021), o desenvolvimento de polímeros mais leves e resistentes (TOMIN, et al 2022).

A vasta versatilidade do carbono em formar ligações resulta em uma grande diversidade de materiais baseados neste elemento químico. O número de compostos derivados da química do carbono é de tão variado que existe toda uma área dedicada ao seu estudo: a Química Orgânica. Merece destaque que materiais com propriedades completamente distintas podem ser formados apenas por carbono, como é o caso da grafite e do diamante. A única diferença entre esses materiais é como os átomos de carbono estão dispostos na rede cristalina e como isso afeta o compartilhamento dos elétrons entre eles (CALLISTER JR., 2016). Também merece destaque nanomateriais com propriedades únicas, formados apenas por carbono, como é o caso dos nanotubos de carbono (SHOUKAT, 2021) e do grafeno (GEIM, 2007). Tais compostos recebem uma atenção crescente no âmbito da pesquisa científica e desenvolvimento de novos materiais e podem ser utilizados pelo profissional de ensino para motivar o estudo de alunos de Ciências dos Materiais, Física, Química e Química Orgânica.

Materiais como a grafite, o grafeno e nanotubos de carbono têm ganhado notoriedade na pesquisa científica. Entretanto, o uso de experimentos de bancada se mostra economicamente custoso no contexto do ensino de química. Exemplos de aplicações ligadas ao cotidiano podem ser de grande utilidade. Por exemplo, mais recentemente se mostrou que o grafeno contendo nanoporos representa estruturas interessantes para dessalinização da água (MORTAZAVI, et al, 2020), sendo que os nanoporos menores, com diâmetro de 12,6 Å, são os mais eficazes para remoção do sal. Entretanto, a literatura não mostra qual é a passivação de hidrogênio mais estável para a geometria. Sabendo que a passivação de borda, com um ou dois átomos de hidrogênio, poderá afetar as propriedades de nanofiltragem, este problema foi abordado como um exemplo de aplicação. Desta forma, este trabalho apresenta o uso de Teoria do Funcional da Densidade (DFT, do Inglês, *Density Functional Theory*) para obtenção das propriedades estruturais do grafite e obtenção da passivação de borda mais estável para um nanoporo de grafeno.

As informações obtidas representam um exemplo de aplicação, que pode ser

adotado para mostrar o emprego da teoria para estudantes de iniciação científica que desejam se familiarizar com o tema, bem como para outras finalidades onde os discentes tenham conhecimento prévio em Mecânica Quântica, Química e Matéria Condensada. A estrutura, propriedades e principais aplicações do grafite e grafeno foram revisadas. Os aspectos elementares de teoria são apresentados, seguido dos resultados. Os cálculos foram realizados no Centro de Computação Científica e Tecnológica da UTFPR-CP, que oferta recursos computacionais de amplo e fácil acesso para tal finalidade (Portal UTFPR, n.d.).

## 2 | REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

O material grafite é um cristalino e apresenta uma estrutura laminar formada por átomos de carbono. Os átomos das camadas estão dispostos em estrutura hexagonal, lembrando o formato de um favo de mel. O empilhamento A-B das camadas de grafite, visto na figura 1, representa a forma de maior estabilidade. Nessa estrutura os átomos de uma camada estão localizados sobre o topo de um átomo ou sobre o centro de um hexágono da camada vizinha. Dentro de uma mesma camada, cada átomo está ligado a outros três por ligações covalentes. Entretanto, os planos de átomos vizinhos são conectados por ligações fracas, do tipo *van der Waals*. O fraco acoplamento entre os planos da grafite possibilita o fácil desfolhamento de uma camada da estrutura, o que favorece o uso desse material como lubrificante. Tal propriedade também faz com que o material seja um bom isolante elétrico e térmico na direção perpendicular das camadas, embora seja um ótimo condutor ao longo dos planos que formam a rede hexagonal (CHUNG, 2002).

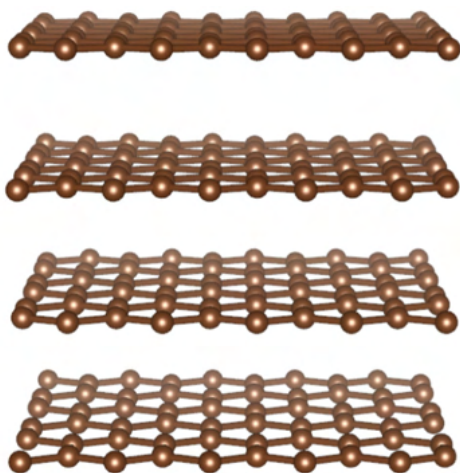


Figura 1: Vista lateral da estrutura da grafite em que as esferas marrons representam os átomos de carbono.

Fonte: Autoria própria

O grafeno é um sólido bidimensional composto por uma única camada de grafite, como ilustrado na figura 2. Por apresentar apenas um átomo de espessura, onde cada átomo de carbono está ligado a outros três por ligações covalentes. Trata-se do nanomaterial mais estreito possível que se pode obter com o carbono. Esse plano de átomos foi isolado experimentalmente pelos pesquisadores Andre Geim e Konstantin Novoselov em 2004, utilizando fita adesiva sobre a grafite (GEIM, 2007, OLABI, et al, 2021). Tal método é bastante simples de ser aplicado, sendo conhecido como desfolhamento. De forma geral, atualmente existem diversos meios para se produzir o grafeno, porém, ainda existem desafios para se obter grandes quantidades dele mantendo a reprodutibilidade das amostras.

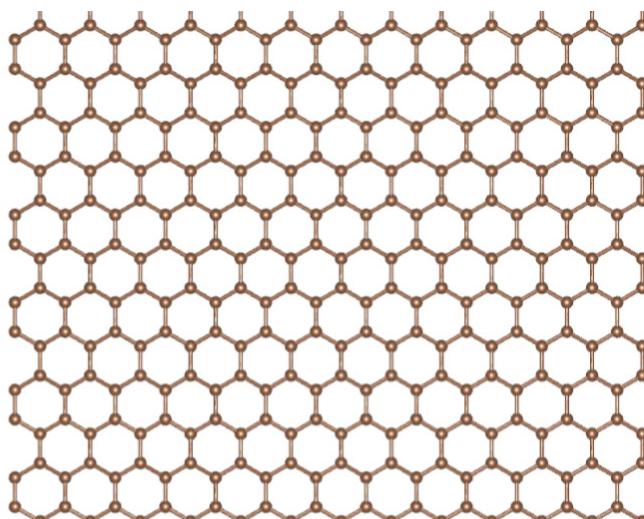


Figura 2: Vista superior da estrutura do grafeno com átomos de carbono representados pelas esferas marrons.

Fonte: Autoria própria

O grafeno é um material extremamente flexível, transparente, apresenta ótima condutibilidade de elétrica (até  $2 \times 10^4$  S/cm), alta mobilidade eletrônica ( $2 \times 10^5$   $\text{cm}^2/\text{V}\cdot\text{s}$ ) e condutividade térmica (até 5000 W/m·K em temperatura ambiente), além de possuir alta resistência mecânica (VIEIRA SEGUNDO, et al, 2016). O grafeno tem sido muito estudado tanto por experimentos em bancada quanto por meios teóricos e computacionais, visando aplicações voltadas para a medicina (WU, et al, 2015), para a engenharia (RAJI, et al, 2016), em componentes eletrônicos (PALACIOS, et al, 2010; RIGO, et al, 2009, 2011), para a formação de compósitos visando a elevação da resistência mecânica de materiais (NEGRETI, 2016), como revestimento na indústria aeroespacial (IQBAL, et al, 2018), para se obter lentes planas resilientes e ultrafinas com aplicações na indústria aeroespacial, química e biológica (CAO, et al, 2019) e também como elemento de filtragem através de

nanoporos (MORTAZAVI, et al, 2020).

Os dispositivos de filtração feitos com grafeno são interessantes para diversas aplicações, tais como dessalinização da água (MORTAZAVI, et al, 2020), remoção de contaminantes de águas potáveis e pluviais (BARKER, et al, 2020), remoção de agentes contaminantes em reservatórios ou tanques de combustível de aparelhos de alta precisão, como veículos espaciais, entre outras (RUIZ, et al, 2015). Nesse sentido, a literatura mostra que o uso de nanoporos na estrutura do grafeno representa um método capaz de realizar a filtração molecular, removendo o sal de soluções aquosas (MORTAZAVI, et al, 2020). Tais defeitos na estrutura podem filtrar as misturas desejadas na escala molecular, ou seja, filtrando molécula por molécula. Foram empregadas simulações de Dinâmica Molecular para estudar a dessalinização da água por meio de nanoporos em grafeno (MORTAZAVI, et al, 2020), sendo que a figura 3 apresenta uma estrutura de um nanoporo empregado para esta finalidade. Os autores testaram nanoporos com diâmetros 12,6 Å, 14,39 Å, 16,72 Å e 19,08 Å, demonstrando que o nanoporo de menor abertura (12,6 Å) apresentou as melhores propriedades de separação do sal da mistura aquosa. Destaca-se que trabalhos como esse podem ter um apelo social muito significativo, pois, se estima que de 2 a 7 bilhões de pessoas irão sofrer com problemas relacionados à falta de água potável em um futuro não muito distante.

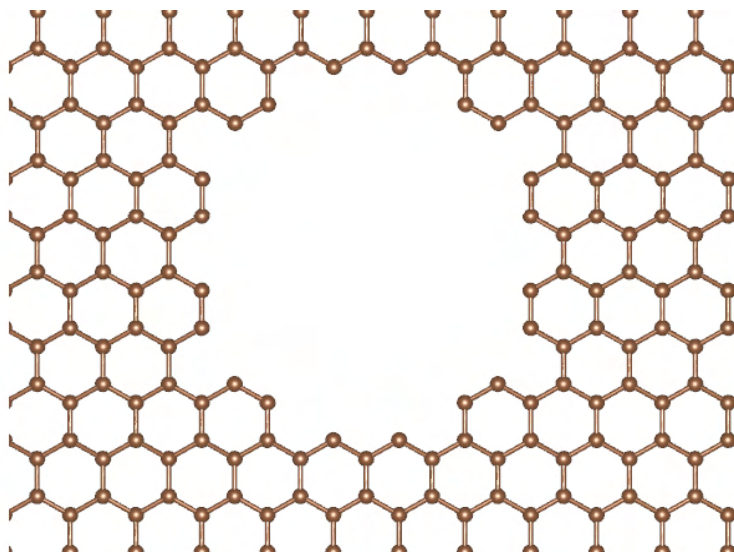


Figura 3: Nanoporo em grafeno considerado para nanofiltragem e dessalinização de água. Os átomos de carbono representados pelas esferas marrons.

Fonte: Autoria própria, adaptado de (MORTAZAVI, et al, 2020)

### 3 | METODOLOGIA

Empregou-se a Teoria do Funcional da Densidade (DFT, do Inglês, *Density Functional Theory*) para determinar as propriedades estruturais do grafite. Esta metodologia é baseada em dois teoremas de Hohenberg e Kohn (HOHENBERG, et al, 1964), onde o primeiro mostra que a energia do estado fundamental é um funcional único da densidade eletrônica. Por sua vez, o segundo enuncia que para a densidade do estado fundamental, o funcional da densidade é igual ao estado fundamental. Assim, os dois teoremas mostram ser possível fazer da densidade eletrônica a variável central do problema e não mais a função de onda, como previsto na equação de Schrödinger. Conseguir um equacionamento matemático para implementar os teoremas foi um feito subsequentemente no desenvolvimento da metodologia. Neste sentido, Kohn e Sham deram um importante passo para a aplicabilidade da DFT em cálculos teóricos envolvendo materiais (KOHN , et al, 1965).

A figura 4 apresenta esquematicamente o método de minimização de Kohn e Sham (KS), sendo que nele as equações são resolvidas de forma autoconsistente, como representado no fluxograma. O ciclo autoconsistente de KS se inicia com um valor tentativa para a densidade eletrônica. Na segunda etapa, ocorre a construção do potencial de KS, onde é contabilizada a contribuição do potencial externo ( $V$ ), da interação Coulombiana clássica ( $V_H$ ) e do termo de troca e correlação ( $V_{XC}$ ). O próximo passo envolve a obtenção da função de onda de partícula única para o elétron sujeito ao potencial ( $V_S$ ). Se salienta que nesta etapa se considera a energia cinética do elétron não interagente na equação, em adição à  $V_S$ , sendo que os termos relativos à interação elétron-elétron são deslocados para o termo de troca e correlação, que precisa ser aproximado (MARTIN, 2008). Desta forma, ocorre a divisão do problema em dois subsistemas: um interagente e outro não interagente. Neste último, o elétron é considerado como um corpo isolado não interagente, sendo que a parcela de informação relativa à contribuição do restante do sistema fica contabilizada no potencial que atua nesse elétron. Assim, é resolvida uma equação para cada elétron não interagente do sistema, independentemente, sendo a contribuição do restante do sistema sobre esse elétron levada em conta no termo que descreve o potencial externo (CAPELLE, 2006; MARTIN, 2008). Sem formulação exata, o termo de troca e correlação necessita ser aproximado, sendo empregada neste estudo a forma de Perdew, Burke e Ernzerhof (PBE) (PERDEW, 1996; MARTIN, 2008).



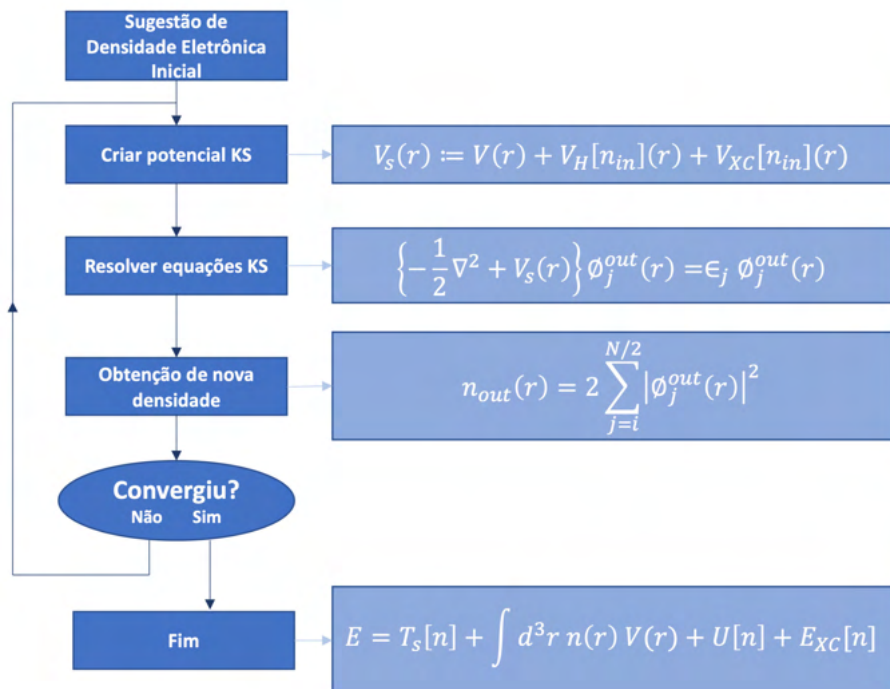


Figura 4: Fluxograma que representa o ciclo autoconsistente da Teoria do Funcional da Densidade.

Fonte: Autoria própria

Com as funções de onda de partícula única ( $\phi$ ) obtêm-se uma nova densidade, sendo então comparada com o valor inicial. Caso a diferença seja menor que um valor pequeno, definido como critério de convergência, se encerra o ciclo autoconsistente. Caso contrário, parte-se para mais um passo no ciclo de KS, utilizando o último valor da densidade eletrônica. Por fim, uma vez obtida a convergência, pode-se determinar a energia total do sistema.

Pela própria formulação da DFT, as funções de onda auxiliares de partícula única  $\phi_j$  não fornecem os níveis de energia do sistema interagente. Entretanto, as funções  $\phi_j$  podem fornecer resultados qualitativos muito úteis, ou mesmo compatíveis com dados experimentais, especialmente quando aplicadas correções ou nível de teoria adequado. Por outro lado, dados de energia total e diferenças de energia total podem ser empregados para estudos comparativos entre diferentes estruturas e fases de materiais, revelando as geometrias mais favoráveis do ponto de vista energético com elevada acurácia.

Por ser uma aproximação que utiliza a densidade local e seu gradiente, a formulação de PBE não permite a descrição dos termos de interação não locais, como é o caso das interações fracas de coesão, como as de *van der Waals*. Assim, optou-se por utilizar correções de forças de dispersão segundo a formulação de Grimme para este estudo

(GRIMME, et al, 2010).

Empregou-se o pacote computacional *Quantum-Espresso* para realização dos cálculos (GIANNOZZI, *et al.*, 2009, 2017, 2020). Tal implementação emprega ondas planas para representar os elétrons descritos no sistema e também trabalha no espaço real e recíproco para obter os termos de energia ao longo do processo de minimização de KS, elencados na figura 4. A precisão associada com as integrais no espaço recíproco e com o número de ondas planas empregado é definida pelo número de pontos utilizados no espaço recíproco (pontos  $k$ ) e energia de corte para a onda plana mais energética empregada, conforme descrito na seção de resultados.

O cálculo da energia de coesão das estruturas dos nanoporos de grafeno foi calculada com respeito à átomos isolados, por meio da equação:

$$E_C = E_T - n_C E_C - n_H E_H, \quad (1)$$

onde  $E_T$  é a energia total da folha de grafeno com nanoporo, e representam o número total de átomos de carbono e hidrogênio presentes no nanoporo, respectivamente, e  $E_C$  e  $E_H$  a energia total de um átomo de carbono e hidrogênio isolado, respectivamente.

#### 4 | DESENVOLVIMENTO E RESULTADOS

A estrutura cristalina da grafite foi construída como uma célula unitária hexagonal, com quatro átomos de carbono, conforme é apresentado na figura 6. Os vetores  $a$ ,  $b$  e  $c$ , que definem a célula unitária do sistema, também estão mostrados na imagem.

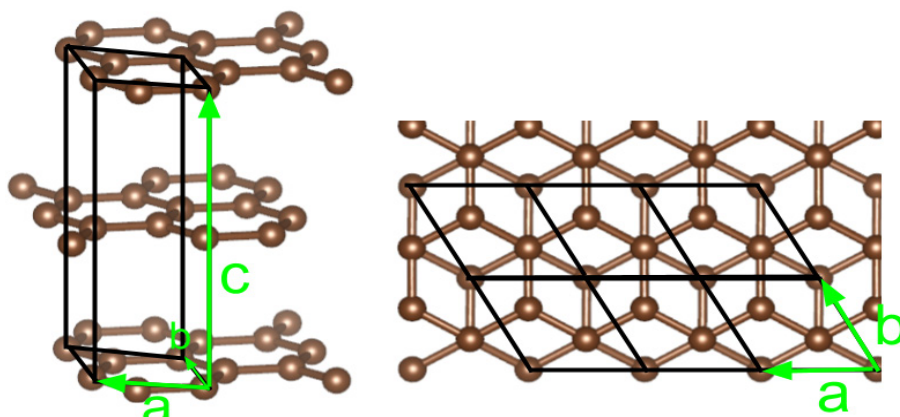


Figura 5: À esquerda: célula unitária hexagonal da grafite em vista lateral. À direita: vista superior (ao longo do vetor  $c$ ) do grafite. As esferas marrons representam os átomos de carbono, sendo que os vetores  $a$ ,  $b$  e  $c$ , em verde, definem a célula unitária.

Fonte: Autoria própria

Antes da realização de um cálculo de otimização da estrutura propriamente dita foi

necessário estabelecer o número  $k$  de pontos necessários para garantir a precisão desejada para as integrais no espaço recíproco. Este estabelece o quantitativo de pontos empregados para realização dos cálculos de integração que envolvem os termos de energia descritos no espaço recíproco. A otimização foi necessária para poupar recursos computacionais, pois, depois de um dado número de pontos não há uma melhora na precisão do resultado, que tende a uma constante. Assim, o número de pontos escolhido para realizar as simulações deve ser o menor possível para que a precisão dos resultados esteja no intervalo desejado.

A figura 6 apresenta a força que atua na componente cartesiana  $\hat{i}$  de um átomo de carbono do grafeno em função do número de pontos usados na simulação. Considerando que o critério de convergência empregado nas forças é de  $1 \times 10^{-3}$  Ry/Bohr, faz sentido usar nas simulações um número  $k$  de pontos que forneça uma variação de força abaixo deste valor.

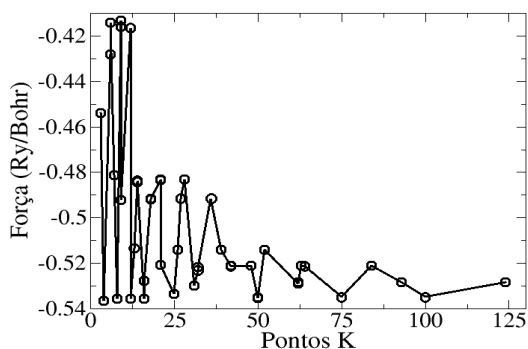


Figura 6: Força em um átomo de carbono do grafeno ao longo da componente cartesiana  $\hat{i}$  em função do número de pontos.

Fonte: Autoria própria

No contexto da implementação computacional empregada (GIANNOZZI, et al, 2009, 2017, 2020), os elétrons do sistema são descritos por ondas planas (que são funções oscilatórias, descritas matematicamente por exponenciais complexas). Uma descrição que empregue poucas ondas planas pode descrever o sistema de forma pouco precisa, embora possa ser mais rápida do ponto de vista computacional. Assim, se faz necessário definir qual deve ser o número de ondas planas empregadas na descrição dos elétrons. No código computacional utilizado, isso pode ser feito de maneira única para todos os elétrons de todos os átomos, por meio do parâmetro que especifica a energia cinética da onda plana mais energética do sistema, conhecida como energia de corte. A figura 7 apresenta a convergência da força que atua em uma direção cartesiana de um átomo do grafeno em função da energia de corte.

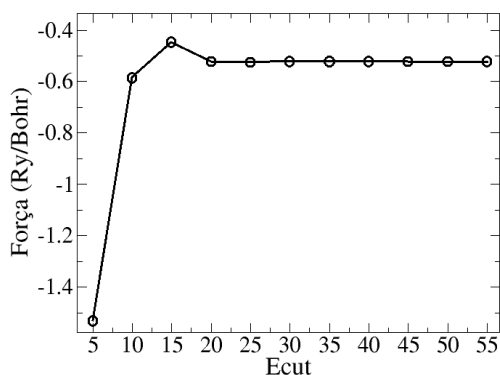


Figura 7: Força em um átomo de carbono do grafeno ao longo da componente cartesiana  $\hat{i}$  em função da energia de corte.

Fonte: Autoria própria

As simulações realizadas mostram que a célula mínima do grafeno, como vista na figura 5, poderá ser descrita empregando especificando um número de pontos dado por  $k_x = k_y = 10$  e  $k_z = 3$  para a simulações com o grafite e  $k_z = 1$  com o grafeno. Tais resultados retornam a estabilização da força próxima de  $-0,52846$  Ry/Bohr. Também, nota-se que uma energia de corte de 30 Ry é suficiente, pois, resultou na estabilização da força na região supracitada. Com estes dados, pôde-se realizar simulações para este sistema na precisão estabelecida com o critério de otimização de forças.

A estrutura hexagonal do grafite com quatro átomos, vista na figura 5, foi empregada para encontrar o parâmetro de rede ótimo para a estrutura. Por meio da variação do comprimento dos vetores que formam a célula unitária,  $\mathbf{a}$ ,  $\mathbf{b}$  e  $\mathbf{c}$ , e proporcional posição dos átomos em torno da região de equilíbrio, determinou-se a energia total do sistema para cada dimensão dos vetores. A figura 8 mostra a energia total em função do módulo do parâmetro de rede  $a$  para cada valor de  $c/a$ .

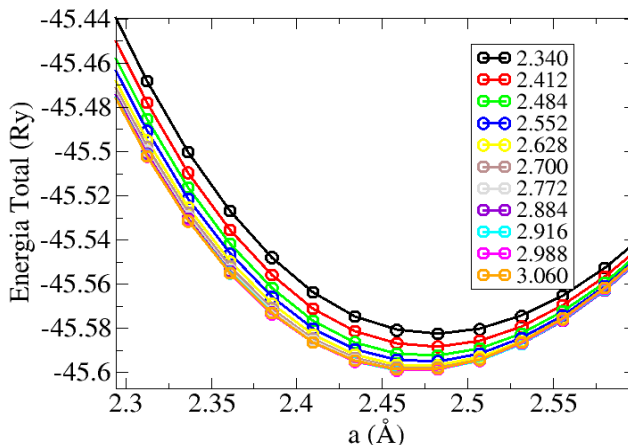


Figura 8: Energia total em função do parâmetro de rede  $a$ . As linhas indicam os valores de  $c/a$  considerados.

Fonte: Autoria própria

Foi realizado um ajuste quadrático para a região próxima do mínimo de energia em função do parâmetro de rede de cada curva, como é possível observar na figura 9. Os valores obtidos com tal otimização foram  $a = b = 4,66778$  Bohr ( $2,47008$  Å) e  $c/a = 2,9023$  (que fornece  $c = 13,54730$  Bohr ou  $7,16892$  Å), que são os pontos que possuem menor energia total. Esses são os parâmetros de rede de equilíbrio para o grafite obtidos. Se verifica que esta estrutura apresenta uma distância entre os átomos de carbono vizinhos em um mesmo plano de  $d_{C-C} = 1,42610$  Å, sendo o valor experimental  $1,42$  Å (CHUNG, 2002), apontando para uma diferença percentual relativa de apenas  $0,43\%$ , aproximadamente.

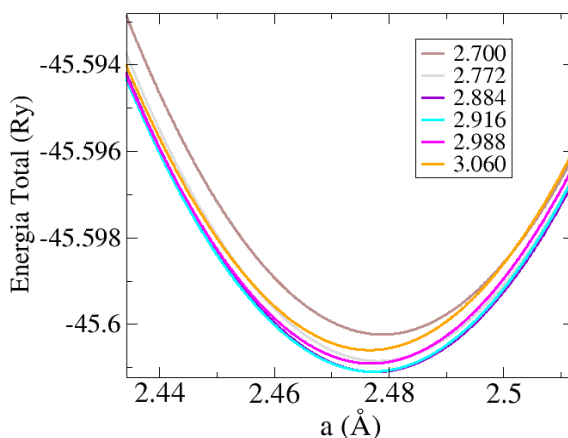


Figura 9: Ajuste quadrático da Energia Total em função do parâmetro de rede  $a$  em torno do mínimo. As diferentes curvas representam valores de  $c/a$ .

Fonte: Autoria própria

A distância de separação entre planos vizinhos do grafite no empilhamento A-B aferida experimentalmente é de 3,35 Å (CHUNG, 2002). Em comparação, a distância entre planos adjacentes obtida neste trabalho foi 3,58446 Å, que apresenta uma diferença percentual relativa de aproximadamente 7% com o experimento. Tal diferença é significativamente mais elevada do que aquela aferida para  $d_{C-C}$  e já era esperada, pois, as interações de van der Waals existentes entre os planos são descritas com menos precisão pela DFT. Vale ressaltar que neste trabalho se empregou a correção de Grimme para interações de dispersão, conhecida como DFT-D3 (GIANNOZZI, et al, 2020).

Nanoporos de pequeno diâmetro podem apresentar uma maior proximidade dos átomos que passivam as ligações carbono-carbono quebradas na borda, se comparado com uma borda estendida. Dessa forma, testou-se configurações com um e dois átomos de hidrogênio passivando um átomo de carbono na borda do nanoporo. Estas possibilidades apresentam ligações químicas  $\sigma$  e  $\pi$  na borda do nanoporo, respectivamente. Assim, para avaliar a estabilidade dos sistemas, considerou-se duas estruturas: (1) geometria na qual todas as ligações de carbono rompidas para formação do nanoporo foram passivadas por um átomo de hidrogênio (presença de ligação  $\pi$ ) e (2) geometria com um átomo de carbono da borda do nanoporo passivado por dois átomos de hidrogênio (presença de ligação  $\sigma$ , apenas). A figura 10 (a) e (b) apresenta a estrutura (1) e (2) do nanoporo, respectivamente. Pode-se notar que a estrutura (2) mostra a ligação C–C de borda com um comprimento de aproximadamente 1,43 Å, mais próximo do carbono da fase diamante, com ligações  $\sigma$ .

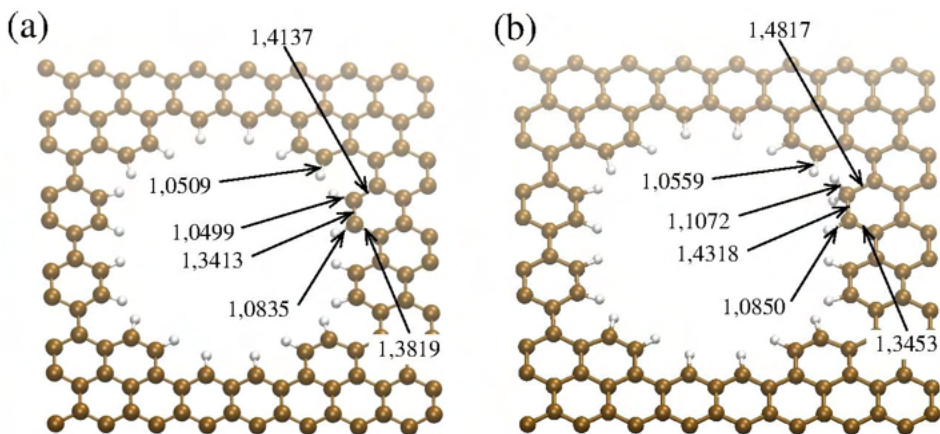


Figura 10: (a) Nanoporo com átomos de carbono de borda passivados com um átomo de hidrogênio. (b) Nanoporo com um átomo de carbono passivado com dois átomos de hidrogênio. As distâncias de ligação apontadas nas imagens estão em Å.

Fonte: Autoria própria

Calculou-se a energia de formação das duas estruturas com a equação (1), o que levou à conclusão que a estrutura (2) apresenta energia de formação 3,02 eV menor que a

estrutura(1), indicando que a presença de carbonos com apenas ligações  $\sigma$  na borda é um configuração favorável energeticamente para nanoporos de pequeno diâmetro.

## 5 | CONCLUSÃO

Os resultados obtidos para a geometria da grafite estão em excelente acordo com a literatura, revelando o grau de precisão da teoria empregada. A distância entre as camadas da grafite computados possui uma diferença percentual relativa de 5,42% em comparação com resultados de Primeiro Princípios considerando todos os elétrons (KARLICKÝ, et al, 2015). A diferença é de 7% em comparação com resultados experimentais (CHUNG, 2002). Por outro lado, a distância de ligação entre os átomos de carbono internas a um plano da grafite apresenta uma diferença de aproximadamente 0,4% em relação ao dado experimental (CHUNG, 2002). Finalmente, foi obtida a geometria e a energia de formação para dois nanoporos com 12,6 Å de diâmetro, onde a passivação de um átomo de carbono da borda com um ou dois átomos de hidrogênio foi considerada (passivação de borda com ligação  $\pi$  ou  $\sigma$ , respectivamente). Os resultados mostraram que a presença de dois hidrogênios é favorável energeticamente no nanoporo de diâmetro 12,6 Å.

## REFERÊNCIAS

BARKER, D., et al. **Filter function of graphene oxide: Trapping perfluorinated molecules**. The Journal of Chemical Physics, v. 152, n. 2, p. 024704, 2020.

CALLISTER JR., D. G. R. W. D. **Ciência e Engenharia de Materiais uma introdução**. [S.l.]: Livros Técnicos e Científicos Editora Ltda., 2016.

CAO, G., et al. **Resilient graphene ultrathin flat lens in aerospace, chemical, and biological harsh environments**. ACS Applied Materials & Interfaces, v. 11, n. 22, p. 20298–20303, 2019.

CAPELLE, K. **A bird's-eye view of density-functional theory**. Brazilian Journal of Physics, v. 36, n. 4A, 2006.

CHUNG, D. D. L. **Review graphite**. JOURNAL OF MATERIALS SCIENCE, 2002.

DE MOURA, A. P., et al. **Structural and mechanical characterization of polyurethane-CaCO<sub>3</sub> composites synthesized at high calcium carbonate loading: An experimental and theoretical study**. Journal of Composite Materials, 2021. Disponível em <<https://doi.org/10.1177/0021998321996414>>.

GEIM, A. K.; NOVOSELOV, K. S. **The rise of graphene**. Nature Materials. Vol. 6, pp. 183-191, 2007.

GIANNOZZI, P., et al. **Advanced capabilities for materials modelling with QUANTUM ESPRESSO**. Journal of Physics: Condensed Matter, v. 29, n. 46, p. 465901, 2017. Disponível em: <<http://stacks.iop.org/0953-8984/29/i=46/a=465901>>.

GIANNOZZI, P., et al. **QUANTUM ESPRESSO: a modular and open-source software project for quantum simulations of materials**. Journal of Physics: Condensed Matter, v. 21, n. 39, p. 395502 (19pp), 2009. Disponível em: <<http://www.quantum-espresso.org>>.

GIANNOZZI, P., et al. **Quantum ESPRESSO toward the exascale**. The Journal of Chemical Physics, v. 152, n. 15, p. 154105, 2020.

GRIMME, S.; ANTONY, J.; EHRlich, S.; KRIEG, H. **A consistent and accurate ab initio parametrization of density functional dispersion correction (DFT-D) for the 94 elements H-Pu**. J. Chem. Phys. 132, 154104, 2010. Disponível em <<https://doi.org/10.1063/1.3382344>>.

HOHENBERG, P.; KOHN, W. **Inhomogeneous electron gas**. Phys. Rev., American Physical Society, v.136, p.B864–B871, Nov 1964. Disponível em:<<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.136.B864>>.

IQBAL, S. S., et al. **Effect of graphene for ablation study of advanced composite materials for aerospace applications**. In: Advanced Materials – XV. [S.l.]: Trans Tech Publications Ltd, 2018. (Key Engineering Materials, v. 778), p. 118–125.

KARLICKÝ, F., et al. **Interplay between ethanol adsorption to high-energy sites and clustering on graphene and graphite alters the measured isosteric adsorption enthalpies**. The Journal of Physical Chemistry C, v. 119, n. 35, p. 20535–20543, 2015. Disponível em: <<https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.5b06755>>

KOHN, W.; SHAM, L. J. **Self-consistent equations including exchange and correlation effects**. Phys. Rev., American Physical Society, v. 140, p. A1133–A1138, Nov 1965. Disponível em:<<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.140.A1133>>.

MARTIN, R. M. **Electronic structure: Basic theory and practical methods**. Cambridge Univ. Press. Cambridge, 2008.

MORTAZAVI, V.; MOOSAVI, A.; NOURI-BORUJERDI, A. **Enhancing water desalination in graphene-based membranes via an oscillating electric field**. Desalination, v. 495, p. 114672, 2020. ISSN 0011-9164.

NEGRETI, M. A. de P. **Obtenção e caracterização de compósitos poliméricos com óxido de grafeno reduzido**. Dissertação (Mestrado) — Escola Politécnica da Universidade de São Paulo, 2016

OLABI, A., et al. **Application of graphene in energy storage device – a review**. Renewable and Sustainable Energy Reviews, v. 135, p. 110026, 2021. ISSN 1364-0321.

PALACIOS, T.; HSU, A.; WANG, H. **Applications of graphene devices in RF communications**. IEEE communications magazine, Institute of Electrical and Electronics Engineers, 2010.

PERDEW, J. P.; BURKE, K.; ERNZERHOF, M. **Generalized Gradient Approximation Made Simple**. Phys. Rev. Lett., American Physical Society, v. 77, p. 3865-3868, 1996. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.77.3865>>.



PORTAL UTFPR. **Centro de Computação Científica e Tecnológica da UTFPR-CP (CCCT-CP)**. Disponível em: <http://portal.utfpr.edu.br/pesquisa-e-pos-graduacao/laboratorios-multiusuarios/laboratorios/centro-de-computacao-cientifica-e-tecnologica-da-utfpr-cp-ccct-cp>. Acesso em: 12 de dezembro. 2020.

RAJI, A.-R. O., et al. **Composites of Graphene Nanoribbon Stacks and Epoxy for Joule Heating and Deicing of Surfaces**. ACS Applied Materials & Interfaces, v. 8, n. 5, p. 3551–3556, 2016.

RIGO, V. A., et al. **Electronic, structural, and transport properties of Ni-doped graphene nanoribbons**. Phys. Rev. B, American Physical Society, v. 79, p. 075435, Feb 2009.

RIGO, V. A., et al. **Mn dimers on graphene nanoribbons: An ab initio study**. Journal of Applied Physics, v. 109, n. 5, p. 053715, 2011.

RUIZ, O. N., et al. **Graphene oxide-based nanofilters efficiently remove bacteria from fuel**. International Biodeterioration & Biodegradation, v. 97, p. 168–178, 2015. ISSN 0964-8305.

SHIN, Y., et al. **Highly Selective Supported Graphene Oxide Membranes for Water-Ethanol Separation**. Scientific Reports, v. 9, n. 1, p. 2251, fev. 2019. ISSN 2045-2322.

SHOUKAT, S.; KHAN, M. I. **Carbon nanotubes: a review on properties, synthesis methods and applications in micro and nanotechnology**. Microsystem Technologies, v. 27, p. 4183-4192, 2021.

TOMIN, M.; KMETTY, Á. **Polymer foams as advanced energy absorbing materials for sports applications—A review**. Journal of Applied Polymer Science, v. 139, p. 51714, 2022.

VIEIRA SEGUNDO, J. E. D., et al. **Gráfico: Uma revisão sobre propriedades, mecanismos de produção e potenciais aplicações em sistemas energéticos**. Revista Eletrônica de Materiais e Processos, v. 11, n. 2 (2016) 54–57 ISSN 1809-8797.

WU, S.-Y.; AN, S. S. A.; HULME, J. **Current applications of graphene oxide in nanomedicine**. International journal of nanomedicine, v. 10 Spec Iss, n. Spec Iss, p. 9–24, 2015. ISSN 1178- 2013.

ZHU, L.; WANG, J.; DING, F. **The great reduction of a carbon nanotube's mechanical performance by a few topological defects**. ACS Nano, v. 10, p. 6410–6415, 2016.

## SOBRE O ORGANIZADOR

**CLEISEANO EMANUEL DA SILVA PANIAGUA** - Técnico em química pelo Colégio Profissional de Uberlândia (2008), Bacharel em Química pela Universidade Federal de Uberlândia (2010), Licenciado em Química pela Universidade de Uberaba (2011) e em Ciências Biológicas pela Faculdade Única (2021). Especialista em Metodologia do Ensino de Química e em Docência do Ensino Superior pela Faculdade JK Serrana em Brasília (2012), especialista em Ensino de Ciências e Matemática pelo Instituto Federal do Triângulo Mineiro (2021). Mestre em Química pela Universidade Federal de Uberlândia (2015), com ênfase em desenvolvimento de bioadsorvente para remoção dos íons As(V), Sb (III) e Se (IV) em diferentes matrizes aquáticas. Doutor em Química pela Universidade Federal de Uberlândia (2018), com ênfase em Processos Oxidativos Avançados [fotocatálise heterogênea ( $\text{TiO}_2/\text{UV-A}$  e  $\text{TiO}_2/\text{Solar}$ ,  $\text{H}_2\text{O}_2/\text{UV-C}$ ) para remoção de contaminantes de interesse emergente (CIE) em diferentes matrizes aquáticas. Realizou o primeiro estágio Pós-Doutoral (de maio de 2019 a junho de 2021) na Universidade Federal de Uberlândia com ênfase em aplicação de novos agentes oxidantes empregando radiação solar para remoção de CIE em efluentes provenientes de estação de tratamento de esgoto. Realizou seu primeiro pós-doutorado (Junho de 2020 a maio de 2021) no Instituto de Química da UFU. Atualmente realiza seu segundo pós-doutorado (julho de 2021 - atual) na UFU na mesma linha de pesquisa, cursa licenciatura em Física na Faculdade Única (Setembro de 2021 à novembro de 2022), e pós-graduação *lato sensu* em Análise Instrumental Avançada na Faculdade Unilevyva. Possui 12 anos de experiência como técnico em química no Instituto Federal de Goiás, tendo atuado como responsável por análises de parâmetros físico-químicos e biológicos de águas e efluentes provenientes de estação de tratamento de esgoto. Atualmente, vem atuando nas seguintes linhas de pesquisa: (i) Desenvolvimento de novas metodologias para tratamento e recuperação de resíduos químicos gerados em laboratórios de instituições de ensino e pesquisa; (ii) Estudos de monitoramento de CIE; (iii) Desenvolvimento de novas tecnologias avançadas para remoção de CIE em diferentes matrizes aquáticas; (iv) Aplicação de processos oxidativos avançados ( $\text{H}_2\text{O}_2/\text{UV-C}$ ,  $\text{TiO}_2/\text{UV-A}$  e foto-Fenton e outros) para remoção de CIE em efluentes provenientes de estação de tratamento de esgoto para fins de reutilização; (v) Estudo e desenvolvimento de novos bioadsorventes para remediação ambiental de CIE em diferentes matrizes aquáticas; (vi) Educação Ambiental e; (vii) processos de alfabetização e letramento científico na área de Ciência da Natureza, em especial biologia e química.

## ÍNDICE REMISSIVO

### A

Alcalóides 73

Alfabetização científica 38

Angiospermas 73

*Annona muricata* 63, 64, 65, 66, 67, 69, 70, 71

Antifúngica 86, 88, 89, 90, 91

Anti-inflamatória 63, 64, 66, 73

Antimicrobiana 63, 87, 91

Antioxidante 63, 64, 66, 67, 69, 71, 73

Antiulcerogênica 64, 73

Antraquinonas 64, 73

Aperfeiçoamento 3, 5, 91

Aprendizagem 1, 2, 3, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 16, 17, 19, 22, 24, 25, 27, 29, 30, 31, 32, 35, 36, 37, 38, 39, 40, 41, 42

Atividades biológicas 63

### B

Base Nacional Comum Curricular (BNCC) 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 9, 13, 16, 17, 18, 32

Benzofenonas 85, 86, 87, 89, 90, 91

Biocompatíveis 95

Biomassa 52, 53, 54, 55, 56, 57, 58, 59, 60, 61, 62

Biomateriais 95

### C

Caatinga 73

Café conilon 44, 45, 46, 47, 49

Carbono fixo 52, 53, 54, 55, 56, 57, 58, 59, 60

Celulose 53, 54, 69

Cibercultura 39

Ciências da natureza 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 9, 11, 14, 15, 16, 17, 18, 40

Citotóxica 63, 64, 66, 73

Combustão 53, 56, 57

Combustíveis fósseis 52

Compostos fenólicos 48, 64

Conhecimento científico 2, 6, 14, 36, 39  
Contexto 1, 2, 3, 4, 6, 7, 8, 11, 16, 21, 32, 35, 37, 38, 39, 64, 66, 87, 91, 95, 102  
Cromatografia em Camada Delgada (CCD) 74, 87  
Cromatografia Gasosa acoplada à Espectrometria de Massas (CG-EM) 46, 72  
Cumarinas 64

## D

Densidade básica 52, 53, 55, 56, 59  
Desenvolvimento tecnológico 14, 36  
Discente 12, 16, 33, 35, 36  
Docente 1, 2, 3, 4, 6, 7, 9, 10, 11, 12, 16, 19, 20, 30, 33, 36, 43

## E

Ensino-aprendizagem 35, 37, 38, 39, 40, 41, 42  
Ensino tradicional 7, 33  
Espécie endêmica 72, 73  
Ésteres 65, 72, 74, 75, 76, 77, 78, 82  
Esteróides 73  
*Eucalyptus* 52, 53, 54, 56, 57, 58, 59, 61, 62

## F

Ferramentas tecnológicas na educação 33  
Fitofármacos 64  
Flavonóides 73  
Formação continuada de professores 1, 2, 3, 4, 7, 9, 10  
Furanos 44, 48, 49  
Furfural 44, 47, 48, 49

## G

Gaseificação 53  
Grafeno 94, 95, 96, 97, 98, 101, 102, 103, 107, 108  
Grafite 94, 95, 96, 97, 99, 101, 103, 104, 105, 106

## H

Hemicelulose 53, 54  
Hepatoprotetora 73

## L

Lactonas 64, 65, 73

Leveduras 85, 86, 88, 90, 91

Lignina 53, 54

Lipofilicidade 87

## M

Matemática 5, 11, 12, 13, 16, 17, 18, 19, 20, 21, 22, 23, 24, 25, 26, 28, 29, 30, 31, 32, 33, 35, 41, 109

Metodologias inovadoras 38, 39

Microextração em fase sólida pelo modo *headspace* (HS-SPME) 46

## N

Nanofiltração 94, 95, 98

Nanoporos 94, 95, 98, 101, 105, 106

Nitração 85, 86, 87, 89, 91

## O

Organização curricular 3

## P

Passivação 94, 95, 106

Pirólise 52, 53, 62

Potencial toxicológico 64

Prática pedagógica 4, 43

Projetos políticos pedagógicos 37

## Q

Química 1, 2, 3, 6, 7, 9, 11, 12, 13, 14, 15, 16, 17, 18, 19, 20, 21, 22, 23, 24, 25, 26, 28, 29, 30, 31, 32, 33, 34, 35, 37, 38, 39, 41, 43, 44, 45, 46, 47, 50, 52, 53, 54, 55, 60, 61, 64, 65, 68, 71, 82, 83, 84, 85, 89, 90, 95, 96, 97, 109

## R

Reação de Mallard 45

## S

*Senna acuruensis* Benth 72

## T

Tecnologias de Informação e Comunicação 38


Tecnologias de Informação e Comunicação (TICs) 43

## **V**

Voláteis 44, 45, 46, 47, 48, 50, 52, 54, 55, 56, 57, 59, 60, 87, 88


## **X**


Xantona 85, 87, 89, 91




# PESQUISAS CIENTÍFICAS E O ENSINO DE QUÍMICA: Divulgando a produção acadêmica teórica


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

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

@atenaeditora 

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

  
Ano 2022



# PESQUISAS CIENTÍFICAS E O ENSINO DE QUÍMICA: Divulgando a produção acadêmica teórica

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

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

@atenaeditora 

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

  
Ano 2022