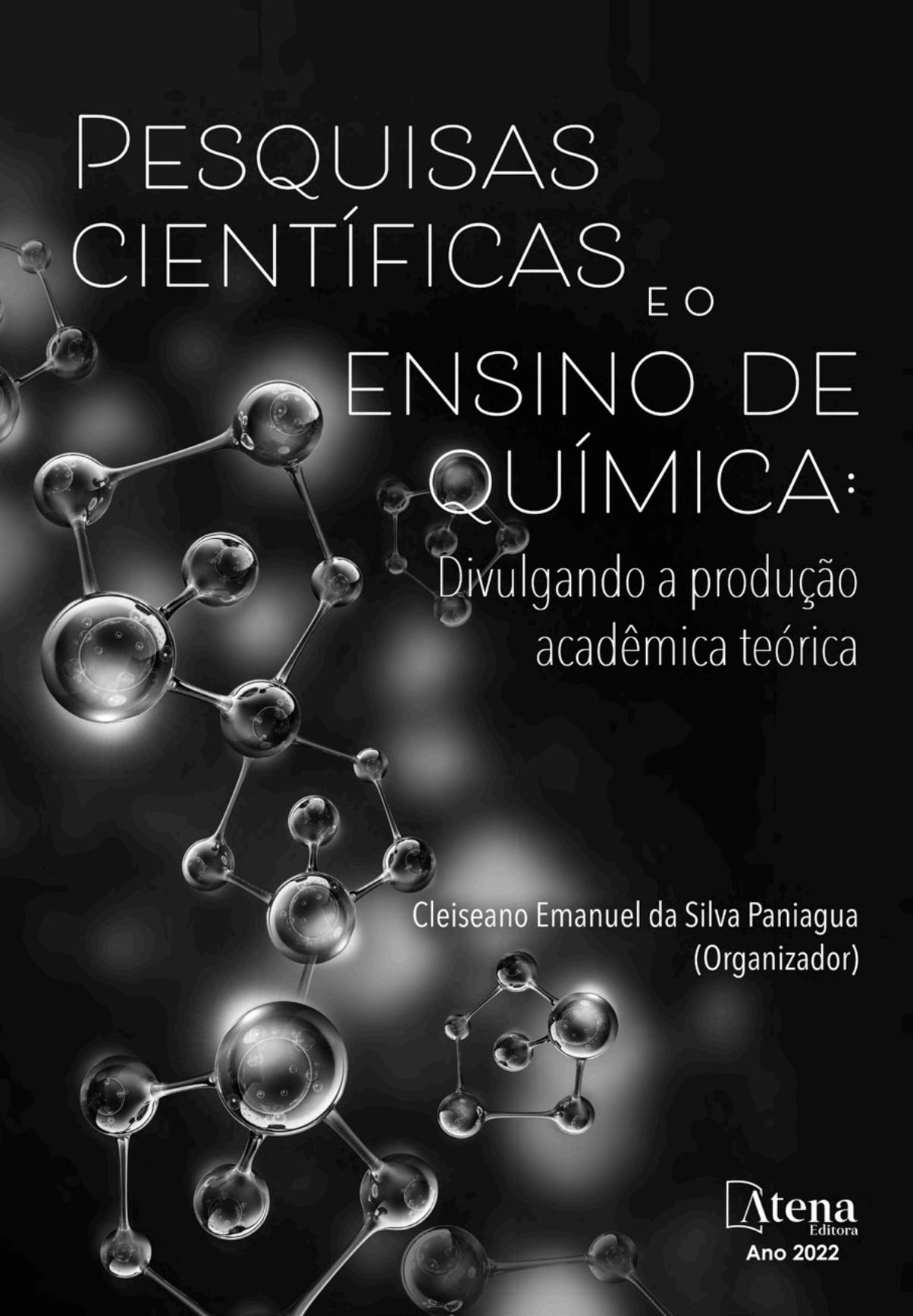


PESQUISAS
CIENTÍFICAS E O
ENSINO DE
QUÍMICA:
Divulgando a produção
acadêmica teórica

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-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 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
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

CAPÍTULO 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

Data de aceite: 10/01/2022

Data de submissão: 22/10/2021

Andréia Severina da Silva

Sistema Educacional Radar - SER
Bezerros - PE

<http://lattes.cnpq.br/0023797117528763>

Roberto Araújo Sá

Universidade Federal de Pernambuco – UFPE /
Centro Acadêmico do Agreste -CAA
Recife - PE

<http://lattes.cnpq.br/0448408582167245>

RESUMO: Este artigo, faz parte de um trabalho de pesquisa o qual será apresentado parte da revisão de literatura de natureza qualitativa a partir de estudos e investigações científicas sobre a temática formação de professores e a prática docente diante da implementação da BNCC e da Reforma do Ensino Médio. Tem como objetivo, apresentar a Metodologia de Ensino e Aprendizagem Baseada na Resolução de Problemas como método de ensino e aprendizagem para a área de Ciências da Natureza/Química. O artigo apresenta também a formação continuada de professores, como um espaço importante de reflexão sobre a teoria e prática na sala de aula, potencializando o desenvolvimento de competências mais complexas e transdisciplinares, visando trabalhar o ensino das ciências mais contextualizado, em uma dimensão investigativa. Procurou-se apresentar uma exposição dos documentos

que regem a BNCC e a REM, com o objetivo de compreender suas ações e na sequência apresentou-se a Metodologia Baseada da Resolução de Problemas com a finalidade de contribuir com a prática docente no processo de ensino e aprendizagem, proporcionando o desenvolvimento da autonomia e do protagonismo do estudante.

PALAVRAS-CHAVE: Ensino de Ciências, Resolução de Problemas, BNCC, REM.

TEACHING BASED ON PROBLEM SOLVING AND ITS CONTRIBUTIONS TO TEACHING PRACTICE IN SCIENCE EDUCATION IN THE CONTEXT OF THE BNCC AND THE HIGH SCHOOL REFORM

ABSTRACT: This article is part of a research work which will be presented as part of the literature review of qualitative nature from studies and scientific research on the theme of teacher training and teaching practice in the implementation of the BNCC and the High School Reform. It aims to present the Methodology of Teaching and Learning Based on Problem Solving as a method of teaching and learning for the area of Natural Sciences/Chemistry. The article also presents the continuing education of teachers, as an important space for reflection on theory and practice in the classroom, enhancing the development of more complex and transdisciplinary skills, aiming to make science teaching more contextualized in an investigative dimension. It was sought to present an exposure of the documents that govern the BNCC and the REM, in order to understand their actions and in the sequence was presented the Methodology Based on Problem Solving in

order to contribute to teaching practice in the teaching and learning process, providing the development of autonomy and student protagonism.

KEYWORDS: Science Teaching, Problem Solving, BNCC, REM.

1 | INTRODUÇÃO

A formação inicial e continuada dos professores de ciências da natureza e suas tecnologias, (Química, Física, Biologia), assim como suas práticas pedagógicas, na última década tem sido motivo de preocupação, surgindo inúmeras propostas de reestruturação no processo de ensino aprendizagem, incentivando assim uma série de pesquisas em nível de mestrado e doutorado nas universidades brasileiras.

Atualmente, está sendo discutidos assuntos relacionados às políticas públicas educacionais nacionais voltadas à Educação Básica, que têm se debruçado a compreender os desdobramentos da Base Nacional Comum Curricular (BNCC) e da Reforma do Ensino Médio (REM). Essas duas políticas públicas regem a Educação Básica brasileira.

A Base Nacional Comum Curricular - BNCC, norteia a criação de novos currículos e estabelece os conhecimentos a serem considerados e as competências e as habilidades a serem desenvolvidas pelos educandos durante a educação básica, buscando quebrar a linearidade de um ensino conteudista, favorecendo a reflexão, e posterior implementação, de práticas metodológicas que possibilitem o desenvolvimento destas habilidades no processo de ensino e aprendizagem, tais como avaliar os riscos e os benefícios quanto ao uso do conhecimento científico e tecnológico no contexto social, econômico, político e ambiental (BRASIL, 2018).

Ao que diz respeito à área de conhecimento Ciências da Natureza e suas Tecnologias, área que está vinculado a disciplina de Química, a BNCC trata a investigação como forma de engajamento dos estudantes na aprendizagem de processos, práticas e procedimentos científicos e tecnológicos, promove o domínio de linguagens específicas, bem como sua capacidade de refletir, argumentar, propor soluções e enfrentar desafios pessoais e coletivos (BRASIL, 2018). O estudo da Química, nessa perspectiva, envolve a participação da juventude em processos de investigação de problemas e fenômenos presentes no seu dia-a-dia a fim de formular respostas que envolvem aspectos sociais, econômicos, políticos, entre outros, exercendo, desse modo, sua cidadania.

A partir dessas ponderações, é importante refletir sobre a formação continuada de professores frente a BNCC e a REM. E como uma proposta que vise trabalhar o ensino de Química de modo mais contextualizado, em uma dimensão investigativa, considerando os apontamentos e orientações da BNCC, está a metodologia de ensino orientada para a Aprendizagem Baseada na Resolução de Problemas (ABRP).

Neste contexto, este artigo propõem a inserção do ensino baseado na resolução de problemas como proposta para a prática docente de professores de ciências da natureza

a partir da formação continuada de professores, considerando o contexto e orientações da BNCC e da REM.

Essa proposta metodológica de ensino aponta para uma educação que mescla a teoria e a prática, proporcionando o desenvolvimento da autonomia e do protagonismo do estudante. Em concordância com a BNCC e a REM, a abordagem de Resolução de Problema no Ensino das Ciências da Natureza/Química, além do aprendizado de seus conteúdos conceituais buscará formar cidadãos capazes de solucionar problemas, tanto os dos indivíduos como os da sociedade, proporcionando uma abertura para novas visões de mundo.

Quanto à classificação da natureza, a pesquisa terá uma abordagem Qualitativa, e buscará se debruçar acerca da interpretação de fenômenos e dos significados. Isso porque essa pesquisa, buscará inserir na formação continuada de professores o ensino baseado na resolução de problemas e suas contribuições para a prática docente de professores. A análise dos dados acontecerá através da análise de conteúdo, a qual organiza-se em diferentes fases, a fim de que se possa conferir significação aos dados coletados.

2 | FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA

2.1 Formação continuada e prática de professores de ciências da natureza/química

Discutir a formação de professores é uma tarefa que vai além da modificação da organização curricular, isto por si só não romperá com a visão simplista do ato de ensinar e o racionalismo técnico que caracteriza grande parte da formação profissional dos docentes. [...] “É preciso situar a nossa reflexão para além das clivagens tradicionais sugerindo novas maneiras de pensar a problemática da formação de professores [...]” (NÓVOA, 1997, p. 23).

Pesquisadores têm se debruçado no estudo da formação de professores, entre tantos temas, Carvalho e Gil-Pérez (1993); Nóvoa (1992 e 1997); Schön (1997); Pérez Gómez (1997); Maldaner (2006), Araújo et al. (2016) para colaborar com o entendimento do significado de formação docente.

Diante das mudanças que se apresenta no cenário atual da educação brasileira, com a implementação da BNCC e da REM, trazemos para esse debate a importância de se pensar sobre a formação continuada de professores que se faz necessária para o desenvolvimento profissional do professor. A BNCC apresenta no trecho que se refere de currículos a importância da formação continuada de professores para sua implementação, a qual orienta:

criar e disponibilizar materiais de orientação para os professores, bem como manter processos permanentes de formação docente que possibilitem contínuo aperfeiçoamento dos processos de ensino e aprendizagem (BRASIL, 2018 p. 17).

Garcia (1992) define o termo formação continuada de professores, como um conjunto de atividades desenvolvidas pelos professores em exercício com objetivo formativo, as quais visam o desenvolvimento pessoal e profissional docente a fim de prepará-los para a realização das incumbências da prática docente presentes e/ou que possam surgir no contexto profissional.

Todavia, a formação continuada passa a ser um dos pré-requisitos básicos para a transformação do professor e do ensino, pois é através do estudo, da pesquisa, da reflexão, do constante contato com novas concepções e metodologias, proporcionado pelos programas de formação continuada, que se faz a mudança. Desse modo, torna-se mais fácil o professor aprimorar sua prática pedagógica se ele tiver a oportunidade de vivenciar novas experiências, novas pesquisas, novas formas de ver e pensar o ensino.

Nesse contexto, o que queremos aqui destacar é a necessidade de compreendermos a formação continuada de professores como sendo inerente à própria prática docente. Atividade essa que assume proporções significativas em função de cada vez mais nos depararmos com mudanças no sistema de ensino. Desse modo, se faz necessário analisar as propostas da BNCC e da REM, com também as possibilidades, dificuldades e limitações, visando as necessidades das novas metodologias de ensino e de formação continuada para sua implementação.

2.2 Base Nacional Comum Curricular e a Reforma do Ensino Médio no Ensino de Ciências da Natureza e suas Tecnologias

Atualmente, a educação nas escolas do Brasil vem enfrentando grandes mudanças no currículo escolar, e mais do que nunca, pesquisas relacionadas às políticas públicas educacionais nacionais voltadas à Educação Básica têm se debruçado a compreender os desdobramentos dos documentos oficiais que regem a Educação Básica brasileira.

Recentemente o governo lançou a BNCC - Base Nacional Comum Curricular, liderado pelo Ministério da Educação (MEC), um documento normativo que estabelece um conjunto de competências e habilidades para todos os alunos da Educação Básica do país (BRASIL, 2018). A versão final homologada da BNCC para o Ensino Médio, com a inclusão da Lei nº 13.415/17, antiga Medida Provisória (MP) 746/2016, foi disponibilizada em 19 de dezembro de 2018.

A BNCC é um documento que determina os conhecimentos essenciais do currículo escolar que todos os alunos da Educação Básica devem aprender, ano a ano, independentemente do lugar onde moram ou estudam. Na versão de 2018, os docentes deverão preparar suas aulas com base nas competências e habilidades descritas no documento, onde os estudantes deverão desenvolver dez competências gerais, e em cada área, competências e habilidades específicas. As aprendizagens essenciais definidas na BNCC devem:

concorrer para assegurar aos estudantes o desenvolvimento de dez

competências gerais, que consubstanciam, no âmbito pedagógico, os direitos de aprendizagem e desenvolvimento. Na BNCC, competência é definida como a mobilização de conhecimentos (conceitos e procedimentos), habilidades (práticas, cognitivas e socioemocionais), atitudes e valores para resolver demandas complexas da vida cotidiana, do pleno exercício da cidadania e do mundo do trabalho (BRASIL, P.8 2018).

Segundo a BNCC, focar o ensino a partir das competências gerais de aprendizagem, indica que deve aprender seguindo as tipologia do ensino, “saber” (considerando a constituição de conhecimentos, habilidades, atitudes e valores), o “saber fazer” (considerando a mobilização desses conhecimentos, habilidades, e do “ser” (atitudes e valores para resolver demandas complexas da vida cotidiana, do pleno exercício da cidadania e do mundo do trabalho).

Complementando a BNCC o Ministério de Educação lança a Reforma do Novo Ensino Médio. A Reforma do Novo Ensino Médio – REM, é uma política pública educacional que corresponde a uma mudança na estrutura do Ensino Médio. Nesta nova proposta, os estudantes poderão escolher a área de conhecimento a ser aprofundada. Uma parte do Ensino Médio será comum a todas as escolas regidas pela BNCC e outra direcionada à área de interesse dos estudantes, através dos itinerários formativos e as únicas disciplinas obrigatórias nos três anos do Ensino Médio, de acordo com a REM, serão Matemática e Língua Portuguesa.

Essa nova estrutura já está presente na BNCC (2018), as disciplinas específicas estão contidas nas áreas, a saber: Linguagens e suas Tecnologias; Matemática e suas Tecnologias; Ciências da Natureza e suas Tecnologias; Ciências Humanas e Sociais Aplicadas. Já Matemática e Língua Portuguesa dispõem de um subtópico próprio. Gonçalves (2017) manifesta uma preocupação quanto às escolhas das disciplinas em questão, pois “parece que a preocupação do governo está centrada na preparação dos estudantes para a realização dos testes padronizados” (GONÇALVES, 2017, p. 137), em vez de auxiliar na formação crítica e emancipatória dos estudantes.

No ensino médio diurno a carga horária mínima no novo ensino médio passa a ser pelo menos 3000 horas. Destas devem ser 1800 horas para a formação geral básica (60% do currículo), que garanta os direitos e objetivos de aprendizagem, expressos em competências e habilidades, nos termos da BNCC e, no mínimo, 1200 horas para os itinerários formativos (40% do currículo). Para atender a essa nova demanda do currículo para o Ensino Médio, as escolas precisam se organizar para um ensino em tempo integral, pois, anteriormente, a carga horária anual para o Ensino Médio era de oitocentas horas. Segundo Felício (2012):

a educação integral deve ser capaz de responder a uma multiplicidade de exigências, ao mesmo tempo em que deve objetivar a construção de relações na direção do aperfeiçoamento humano, o que comporta na oferta de possibilidades para que o indivíduo possa evoluir, plenamente, em todas as suas dimensões (cognitiva, corpórea, social, cultural, psicológica, afetiva,

Todavia, os currículos das licenciaturas precisarão se ajustar as novas orientações e as instituições formadoras de professores vão carecer de investimentos para que os cursos de formação inicial e os cursos de formação continuada se adêquem à BNCC.

Tendo em vista as possíveis repercussões dessas políticas nos cursos de formação de professores e na Educação Básica de modo geral, nos debruçamos sobre as possíveis implicações da BNCC e REM no ensino das ciências / Química. Na BNCC (2018) à disciplina de Química, apresenta uma nova aparência, pois agora as componentes curriculares estão contidas nas áreas, sem apresentar um subtópico próprio, como nas versões anteriores.

Na definição das competências específicas e habilidades da área de Ciências da Natureza e suas Tecnologias foram privilegiados conhecimentos conceituais considerando a continuidade à proposta do Ensino Fundamental, sua relevância no ensino de Física, Química e Biologia e sua adequação ao Ensino Médio. Dessa forma, a BNCC da área de Ciências da Natureza e suas Tecnologias propõe um aprofundamento nas temáticas Matéria e Energia, Vida e Evolução e Terra e Universo (BRASIL, 2018, p. 548).

Ao que diz respeito à área da Química, a BNCC trata da importância do ensino desta ciência para os nossos alunos do Ensino Médio, para que estes desenvolvam sua criticidade podendo reconhecer como a Química influencia suas vidas, a sociedade e o mundo no qual estão inseridos. O estudo da Química, nessa perspectiva, envolve a participação dos jovens e adultos em processos de investigação de problemas e fenômenos presentes no seu dia-a-dia a fim de formular respostas que envolvem aspectos sociais, econômicos, políticos, entre outros, exercendo, desse modo, sua cidadania (BRASIL 2018). A área de Ciências da Natureza e suas Tecnologias apresenta três competências específicas, no Ensino Médio, sendo que cada uma detém um conjunto de habilidades,

Os professores das disciplinas de Ciências da Natureza tem sido cada vez mais forçado a repensar sua prática docente, sua formação continuada a fim de renovar as formas de ensino em busca de ações que motive o aluno a ter interesse pelo estudo das ciências. Diante desse contexto, acreditamos que a Metodologia do Ensino e Aprendizagem Baseada na Resolução de Problemas é uma alternativa que pode auxiliar o professor neste desafio.

De acordo com a autora, Amado (2015):

o ensino com situação-problema deve despertar no aluno o levantamento de questões e a procura de soluções através da promoção de atividades de investigação, como uma abordagem orientada para a investigação, por partir de questões (levantadas preferencialmente pelos alunos após apresentação do cenário) e envolver a procura de soluções (pág. 710).

Ao analisar a terceira competência e suas habilidades descritas na BNCC, no que se refere ao ensino das ciências. O texto apresenta a Investigação de Situações-Problemas, a avaliação e aplicações do conhecimento científico e tecnológico e suas implicações no

mundo, se um modo que utilize procedimentos e linguagens próprias das Ciências da Natureza, para propor soluções que considerem demandas locais, regionais e/ou globais (BRASIL, 2018, p. 553).

Nesse contexto, observa-se a presença da metodologia de Ensino e Aprendizagem Baseada na Resolução de Problemas, como um processo que pode orientar e contribuir para a prática docente de modo a potencializar a aprendizagem, engajamento dos estudantes e o processo de construção de significados em aulas de química, como também vem contribuir com a implementação da BNCC e da REM.

2.3 Ensino e Aprendizagem baseados na Resolução de Problemas

O Ensino e Aprendizagem baseado na Resolução de Problemas é uma metodologia de ensino centrado no aluno que os permiti ir do conhecido para o desconhecido e ao resolvê-lo\conhecer o desconhecido propicia uma maior autonomia no ensino e na aprendizagem. Neste caso, esta metodologia de ensino pode ser uma ação que proporcione e desenvolva competências e habilidade essências para a aprendizagem das Ciências da Natureza e para o exercício da cidadania.

O Ensino e a Aprendizagem Baseada na Resolução de Problemas, originou-se segundo Leite e Afonso (2001, p. 254) na década de sessenta, nos currículos de Ciências da Saúde, nos Estados Unidos e Canadá, devido à insatisfação sentida com o ensino tradicional. Designada em inglês por Problem-Based Learning (PBL), em português, Aprendizagem Baseada na Resolução de Problemas (ABRP).

No Brasil no que se refere o Sistema Educacional, reconhece-se a necessidade e a importância da solução de problemas como metodologia de ensino para compreender conteúdos curriculares do ensino.

Nesse sentido a metodologia de Resolução de Problemas está centrada em uma metodologia ativa e mesmo que na BNCC, não mencione diretamente o uso de metodologias ativas, ela propõe, de maneira geral, que "sejam realizadas no ensino de Ciências da Natureza, atividades investigativas como elemento central na formação dos estudantes, questões desafiadoras, problemas e proposição de intervenções" (BRASIL,2018 p. 854), o que corrobora com a proposta metodológica de Ensino e Aprendizagem Baseada na Resolução de problemas e quando associadas ao ensino de Ciências da natureza/Química, pode favorecer o entendimento e a construção de novos conceitos, e também contribuir para o conhecimento científico.

De acordo com a BNCC, (2018, p.7), no Ensino Médio, espera-se uma "diversificação de situações-problema, incluindo aquelas que permitam aos jovens a aplicação de modelos com maior nível de abstração e de propostas de intervenção em contextos mais amplos e complexos".

Neste contexto incluir e potencializar o Ensino e Aprendizagem Baseada na Resolução de Problemas na formação continuada de professores e na prática docente

se faz necessário diante das mudanças educacionais, visto que, essa metodologia, oferece um caráter investigativo, sendo esta uma característica primordial no processo de aprendizagem.

Estudos realizados pelas autoras Leite e Afonso (2001 p. 256, 257), sugerem uma organização do ensino orientado para a um Ensino e Aprendizagem Baseada na Resolução de Problemas em quatro fases: a Seleção do contexto; a formulação de problemas pelos alunos; a resolução dos problemas propostos, e a síntese e avaliação do processo.

1ª fase - seleção do contexto. Deve ser baseado em situações reais, constituir um desafio e não deve incluir respostas ou conclusões a eventuais questões formuladas pelos alunos Leite e Afonso (2001). A partir do tema curricular selecionado pelo professor se constrói um esquema conceitual. Esta etapa requer a utilização de pesquisas em matérias bibliográficas (artigos, jornais, revistas, internet, noticiários, etc.). O contexto problemático constitui, assim, o ponto de partida para a aprendizagem e, como tal, tem que ser adequado ao nível etário dos alunos e fortemente motivador. Neste momento o professor deve orientar nas questões que os alunos poderão levantar a partir do contexto para decidir se este permite o desenvolvimento de competências preconizadas nas orientações curriculares para o tema selecionado.

2ª fase - Formulação do Problema. Desenvolvimento do problema pelos alunos a partir do contexto selecionado, individualmente e/ou em grupo. Cabe ao professor neste momento a tarefa de promover uma clareza no problema formulado a considerar para efeitos de resolução pelos alunos, A experiência e conhecimento do professor desempenham um papel fundamental nesta tomada de decisões Leite e Afonso (2001). Neste momento também são criadas as hipóteses com as possíveis soluções para responder o problema. As questões e hipóteses formuladas são discutidas com a turma e com o professor, sendo primeiramente analisada a sua relevância, seguindo-se a seleção e cronologia em termos de resolução.

3ª fase - Resolução de Problemas. Os alunos colocam o plano de ação com vista à resolução dos problemas. Esta ação inclui a distribuição de tarefas caso seja realizado em grupo. É uma fase que pode ser longa, dependendo das etapas a serem executadas para resolver o problema. O professor desempenha o papel de orientador do trabalho dos alunos. A implementação do plano de ação permite encontrar soluções para os problemas (caso existam) e deve repetir-se até que se esgotem todos os problemas. Periodicamente reflete-se, em conjunto, sobre as informações recolhidas até ao momento Leite e Afonso (2001).

4ª e última fase - Síntese e Avaliação do Processo - os alunos fazem a síntese da informação recolhida juntamente com o professor, buscando verificar se todos os problemas foram resolvidos ou não tiveram soluções, com a síntese final dos conhecimentos conceituais, procedimentais e atitudinais Neste momento alunos reformulam os conhecimentos prévios, organizam as novas aprendizagens e constroem o produto final para ser apresentado à

turma. Por último, avaliam todo o processo de aprendizagem, (Leite & Afonso; 2001).

Uma das fases cruciais de um ensino orientado para a aprendizagem baseada na resolução de problemas consiste na formulação de questões pelos alunos. ou seja, questões capazes de originar investigação e desenvolver competências cognitivas elevadas. Só assim, poderão constituir um ponto de partida para uma aprendizagem significativa e de nível conceptual elevado. Para obter “boas” respostas é preciso saber fazer-se “boas” perguntas.

Outro aspecto, também referenciado por Palma e Leite (2006), assenta no facto da formulação de questões em grupo de conduzir a questões de nível mais elevado do que individualmente. Assim, estas autoras apontam para a necessidade de analisar as questões formuladas, para conhecimento de todos, e subsequente seleção daquelas de nível mais elevado. Nesse sentido, o verdadeiro objetivo final da aprendizagem da solução de problemas é fazer com que o aluno adquira o hábito de proporem-se problemas e de resolvê-los como forma de prender. (POZO 1998, P. 15). Isto permite a aquisição de novos conhecimentos através da sua própria aprendizagem e incentiva os estudantes a aprenderem de forma autónoma e participativa, a partir de problemas e situações reais.

3 | CONSIDERAÇÕES FINAIS

Consideramos que um curso de formação continuada de professores sobre a abordagem de ensino baseado na resolução de problemas pode fornecer elementos teóricos e metodológicos que podem contribuir para a estruturação e desenvolvimento de um processo de ensino e aprendizagem de ciências da natureza voltado para a abordagem didática de resolução.

Entendemos que esta abordagem de ensino pode orientar e contribuir para a prática docente de modo a potencializar a aprendizagem, engajamento dos estudantes e o processo de construção de significados em aulas de química no ensino médio e também contribuir com a implementação da REM.

REFERÊNCIAS

AMADO, M. V. **Educação Social: Diálogos entre a formação e a profissionalidade** Aprendizagem baseada na resolução de problemas (ABRP) na formação contínua de professores de ciências, v. 17, n.º 56, 2021.

BARDIN, L. **Análise de conteúdo**. São Paulo: Edições 70, 2011.

BRASIL. Lei 13.415, de 16 de fevereiro de 2017. **Reforma do Ensino Médio**. Brasília, 2017. Disponível em:2018.

BRASIL. Ministério da Educação. **Base Nacional Comum Curricular**. Brasília,

CARVALHO, A. M. P. & GIL PEREZ, D. **Formação de professores de Ciências**. São Paulo: Cortez, 1993. 120 p.

FELÍCIO, H. M. S. **Análise curricular da escola de tempo integral na perspectiva da educação integral**. E- Curriculum, São Paulo, v. 8, n. 1, p. 1- 18, 2012.

GARCIA, C. M. A formação de professores: novas perspectivas baseadas na investigação sobre o pensamento do professor. In: NÓVOA, A. (Coord.) **Os professores e a sua formação**. Tradução de Graça Cunha, Cândida Hespana, Conceição Afonso e José A. S. Tavares. Lisboa: Dom Quixote, 1992.

GIL, A. C. **Como elaborar projetos de pesquisa**. 4ed. São Paulo: Atlas, 2002.

GONÇALVES, S. R. V. Interesses mercadológicos: E o “novo” ensino médio. Retratos da Escola, Brasília, v. 11, n. 20, p. 131-145, 2017.

IMBERNÓN, F. **Formação continuada de professores**. Trad. Juliana dos Santos Padilha. Porto Alegre: Artmed, 2010.

LEITE, L.; A. **Aprendizagem baseada na resolução de problemas**. Características, organização e supervisão. Boletim das Ciências, 48, p. 253-260, 2001.

NÓVOA, A., **Formação de professores e profissão docente**. Em: NÓVOA, A. (org) Os professores e sua formação. Lisboa: Publicações Dom Quixote, 1997.

OLIVEIRA, L. A. **Coisas que todo professor de português precisa saber: a teoria na prática**. São Paulo: Parábola Editorial, 2010.

PALMA, C., & LEITE, L. (2006). **Formulação de questões, educação em ciências e aprendizagem baseada na resolução de problemas**: Um estudo com alunos portugueses do 8º ano de escolaridade. Congreso Internacional Aprendizaje Basado en Problemas (PBL - ABP), Perú, 2006.

POZO, Juan Ignacio. **A solução de Problemas: aprender a resolver, resolver para aprender**. Porto Alegre: Artmed, 1998.

CAPÍTULO 2

A IMPORTÂNCIA DA MATEMÁTICA PARA APRENDIZAGEM EM QUÍMICA

Data de aceite: 10/01/2022

Eder Alonso Castro

Instituto Federal de Ciência e Tecnologia de
Brasília – IFB
Brasília - DF
<http://lattes.cnpq.br/4867177953384343>

Ítalo Eduardo Fernandes Armond

Instituto Federal de Ciência e Tecnologia de
Brasília – IFB
Brasília – DF
<http://lattes.cnpq.br/5659309675817773>

RESUMO: O estudo aqui apresentado é resultado de um trabalho de iniciação científica que faz a análise da influência da matemática para a aprendizagem em química a partir da percepção dos licenciandos no contexto de sua formação inicial. Visa identificar quais as interferências da aprendizagem em matemática para o estudo da química e para tal, contou com a participação de estudantes ingressantes no curso de licenciatura em química do Instituto Federal de Ciência e Tecnologia de Brasília IFB, Campus Gama, no ano de 2019. Teve a participação voluntária dos estudantes em responder questionários que foram aplicados em diferentes momentos de sua formação durante o período de um ano e meio. Além dos ingressantes foram ouvidos, também estudantes veteranos e docentes da área de química no intuito de comparar suas respostas e identificar as relações estabelecidas. É uma pesquisa de intervenção realizada dentro de um contexto no qual os pesquisadores também estão

envolvidos. Os instrumentos foram organizados e aplicados em momentos distintos da pesquisa que também contou com um aprofundamento bibliográfico para refletir sobre a relação da química com a matemática na formação de professores por meio de estudo das diretrizes de formação de professores e das propostas de ensino de ciências da natureza em evidência. O fato de a pesquisa ter sido realizada em meio à pandemia provocada pela Covid19, fez com que algumas das hipóteses iniciais fossem alteradas, mesmo assim, as análises apresentam resultados surpreendentes no desenvolver da pesquisa, dentre eles o de que a profundidade dos estudos de matemática no curso de licenciatura excede aquilo que realmente será utilizado pelo docente em sua prática diária.

PALAVRAS-CHAVE: Relação Matemática e Química; Formação de Professores de química; Interdisciplinaridade.

THE IMPORTANCE OF MATHEMATICS FOR LEARNING IN CHEMISTRY

ABSTRACT: The study presented here is the result of a scientific initiation work that analyzes the influence of mathematics for learning in chemistry from the perception of undergraduates in the context of their initial training. It aims to identify the interferences of learning in mathematics for the study of chemistry and, for this purpose, it had the participation of students entering the chemistry degree course at the Federal Institute of Science and Technology of Brasília IFB, Campus Gama, in 2019. It had the voluntary participation of students in answering

questionnaires that were applied at different moments of their training during a period of one and a half year. In addition to the newcomers, veteran students, and professors in the field of chemistry were also heard to compare their answers and identify the established relationships. This is an intervention research carried out within a context in which researchers are also involved. The instruments were organized and applied at different moments of the research, which also included a deeper bibliography to reflect on the relationship between chemistry and mathematics in teacher education through the study of teacher education guidelines and science teaching proposals in the nature in evidence. The fact that the research was carried out during the pandemic of Covid19, made that some of the initial hypotheses were changed. Moreover, the analyzes show surprising results in the development of the research, among them: the fact that the depth of mathematics studies in the licentiate course exceeds what will be, in fact, used by the teacher in their daily and real practice.

KEYWORDS: Mathematics and Chemistry relation; Chemistry teachers' training; Interdisciplinary.

1 | INTRODUÇÃO

Esse texto é fruto de um estudo realizado durante os anos de 2019 a 2021 no Instituto Federal de Ciência e Tecnologia de Brasília – IFB, como trabalho de iniciação científica no convênio entre o IFB e a Fundação de Apoio à Pesquisa do Distrito Federal – FAPDF. O trabalho foi desenvolvido em diversas etapas durante o período de um ano e meio. No último ano, contou com o financiamento da FAPDF que contribuiu muito, para que houvesse maior dedicação do bolsista, nesse processo de coleta, análise e processamento dos dados.

Durante três semestres os estudantes ingressantes no primeiro semestre de 2019, no curso de licenciatura em química do IFB, Campus Gama, foram acompanhados em seu desenvolvimento nas componentes curriculares da área de matemática. O objetivo geral desta pesquisa foi compreender a importância da Matemática para a formação do professor de Química. Neste sentido, traçamos como objetivos específicos: Analisar o discurso dos ingressantes do Curso em licenciatura em química frente a correlação Matemática - Química a partir da perspectiva sociocultural; Acompanhar o desenvolvimento matemático dos ingressantes na licenciatura em química, por um ano e meio; Averiguar conteúdos de Química do Ensino Médio que mais exigem conhecimento matemático por parte do discente e dos docentes; Entrevistar licenciandos veteranos do curso com intuito de identificar em sua trajetória de formação docente inicial o papel da matemática; Entrevistar docentes de química e identificar suas impressões acerca da relação matemática e química.

O estudo é caracterizado como pesquisa qualitativa de intervenção, na qual os pesquisadores vão intervindo no processo de desenvolvimento dos sujeitos levando-os a uma reflexão sobre seu desenvolvimento acadêmico. Os objetivos foram sendo trabalhados paralelamente, enquanto se fazia a pesquisa bibliográfica, também elaborou-se os instrumentos e sua aplicação na pesquisa de campo de forma concomitante, pois os

momentos específicos de aplicação de cada um dos questionários eram fundamentais para identificar as percepções dos sujeitos acompanhados no processo de investigação.

Ao todo foram aplicados cinco questionários, três para os ingressantes (o primeiro logo no início do semestre (2019/1) o segundo ao concluírem a primeira componente de matemática e o terceiro quando concluíram a segunda componente de matemática), um para os veteranos e um para docentes de química.

Após a elaboração da pesquisa de campo, análise e discussão dos dados coletados identificamos que muitas hipóteses iniciais foram validadas, dentre elas vale citar as dificuldades encontradas pelos estudantes da licenciatura nas componentes de matemática. Mas, mesmo nesta hipótese, identificamos que o ensino remoto, provocado pela pandemia da Covid19, interferiu diretamente nos resultados, quando comparamos as impressões dos ingressantes com as dos veteranos.

Outra hipótese que não conseguimos comprovar é a de que o alto número de reprovações dos licenciandos nas componentes de matemática levam ao número excessivo de evasões existente no curso. Mais uma vez, a pandemia pode ter interferido neste dado, pois o fato de o curso ter sido ofertado de forma remota, também provocou muitas desistências em virtude de ser uma atividade não presencial.

Dentre as conclusões mais evidentes constata-se que, na medida em que os conteúdos de matemática vão avançando no curso de licenciatura em química a nota dos estudantes vai caindo na média e que, mesmo com tais dificuldades, a maioria dos estudantes reconhece a importância do domínio de conteúdos matemáticos para a compreensão de alguns conceitos específicos da química.

2 | ENSINO DE QUÍMICA E A FORMAÇÃO DE PROFESSORES

Neste tópico apresentaremos uma revisão bibliográfica acerca da literatura que aborda o ensino de química numa perspectiva histórica da educação brasileira. A Química é, relativamente, um componente curricular novo. Em relação a outros componentes curriculares, a química, a física e a biologia, enquanto componentes específicos, foram as últimas a serem incluídas na matriz curricular da educação básica. Esta inclusão ainda nos dias de hoje é questionada, tanto que na proposta da Base Nacional Comum Curricular - BNCC (2017), de certa forma, esta especificidade deixou de ser exclusiva.

2.1 Ensino da Química na Educação Básica

Discutiremos aqui três grandes concepções sobre o ensino de química e suas variações: A proposta dos Parâmetros curriculares nacionais; A proposta da BNCC e o Currículo em Movimento do Distrito Federal.

2.1.1 Parâmetros Curriculares Nacionais

Como sabemos, a educação básica, após a Lei de Diretrizes e Bases da Educação Nacional - LDB - 9394/96, divide-se em educação infantil, ensino fundamental I e II e ensino médio. Até o ensino Fundamental II os conteúdos de química estão inseridos nos conteúdos da componente “Ciências da Natureza”. Somente no ensino médio é que a Química aparece como um componente curricular específico.

Como forma de regulamentar os conteúdos a serem ensinados em cada componente curricular no ano de 1999 foram lançados os Parâmetros Curriculares Nacionais - PCN que apresentam os conteúdos, habilidades e competências mínimas esperados para cada nível de ensino. No caso do Ensino Médio temos os PCN+, que foram lançados em 2002, com uma linguagem específica para orientar sistemas de ensino, escolas e docentes acerca dos conhecimentos de cada uma das componentes curriculares. De acordo com este documento:

A química pode ser um instrumento da formação humana que amplia os horizontes culturais e a autonomia no exercício da cidadania, se o conhecimento químico for promovido como um dos meios de interpretar o mundo e intervir na realidade, se for apresentado como ciência, com seus conceitos, métodos e linguagens próprios, e como construção histórica, relacionada ao desenvolvimento tecnológico e aos muitos aspectos da vida em sociedade (BRASIL, 2002, p. 87).

A partir dessa concepção apresentada pelos PCN, identificamos que a proposta do ensino de química nos remete à aplicação prática na vida do estudante. Enfatizando que a Química no Ensino Médio deve possibilitar a compreensão tanto dos processos científicos específicos da área, quanto da construção de um conhecimento científico em suas aplicações ambientais, sociais, políticas e econômicas. Ampliando a capacidade de compreensão do mundo e da vida cotidiana, contribuindo, assim, para a formação de um cidadão crítico e pleno.

Esta concepção apresentada nos PCN corrobora com o que está expresso na LDB quando define em seu art. 22:

A Educação Básica tem por finalidade desenvolver o educando, assegurando-lhe a formação comum indispensável para o exercício da cidadania e fornecer-lhe meios para progredir no trabalho e em estudos posteriores.

Neste sentido, o ensino de química proposto para o ensino médio deve ser aquele que proporcione ao estudante uma melhor compreensão de sua realidade, uma introdução ao mundo da pesquisa científica e a ampliação de sua criticidade.

2.1.2 Currículo em Movimento do Distrito Federal

A partir da proposta dos PCN a Secretaria de Educação do Distrito Federal - SEDF, criou para sua rede algumas diretrizes de ação que foram formalizadas no documento

Currículo em Movimento (2014).

Assim este currículo tem como eixos integradores entre os diversos conhecimentos a ciência, a tecnologia, a cultura e o mundo do trabalho. Além desses eixos integradores de conhecimentos previstos pelas DCNEM (Diretrizes Curriculares Nacionais para o Ensino Médio), em uma perspectiva de educação integral, no sentido amplo do termo, este currículo foi concebido a partir de três eixos transversais: Educação para a Diversidade, Cidadania e Educação em e para os Direitos Humanos e Educação para a Sustentabilidade. (DISTRITO FEDERAL, 2014. p.13)

O currículo de Ensino Médio da SEDF caracteriza-se pela organização dos conteúdos em dimensões curriculares interdisciplinares e a matriz curricular ficou dividida em catorze dimensões, por área do conhecimento, definidas a partir da perspectiva geral da Pedagogia dos Multiletramentos, aplicado às quatro áreas de conhecimentos.

No caso das Ciências da natureza encontramos os seguintes Multiletramentos: 1ª Multiletramentos, ciência, cultura e ética; 2ª Multiletramentos, tecnologia, informação e criatividade; 3ª Multiletramentos, lógica, análise e representação; 4ª Multiletramentos, natureza, transformação e sociedade (DISTRITO FEDERAL, 2014).

Os conteúdos a serem trabalhados em cada uma das componentes da área (Química, Física e Biologia) encontram-se espalhados para que sejam trabalhados de forma interdisciplinar em cada um dos três anos do Ensino Médio. Mas, mesmo com essa configuração, a SEDF não desconfigura a separação por disciplina ou componente curricular, ou seja, há um desenho para que o trabalho seja interdisciplinar, mas cada disciplina permanece intocada.

Quando se refere aos “Multiletramentos, ciência, cultura e ética” o texto esclarece que: Os conteúdos trabalhados nesta dimensão partem de uma perspectiva de que as Ciências da Natureza não são neutras. Dessa forma, é necessária a construção de diálogos éticos em prol da sustentabilidade no enfrentamento de questões que se apresentem na realidade dos estudantes, como situações problematizadoras... (DISTRITO FEDERAL, 2014. p. 50)

Com este enfoque o ensino de ciências deixa de ter o foco nos resultados científicos e passa a olhar os processos de elaboração pelos quais as ciências passam e suas consequências para a vida cotidiana.

A segunda área “Multiletramentos, tecnologia, informação e criatividade” tem o foco na formação da consciência crítica.

...Para isso, é importante que se entendam a tecnologia e a informação como recursos presentes no cotidiano do indivíduo, em constante e rápida transformação, tornando-se conhecimentos valiosos para as condições humanas de criatividade. (DISTRITO FEDERAL, 2014. p. 52)

Este enfoque apresenta a tecnologia como uma poderosa ferramenta de transformação da sociedade e como tal um importante elemento aguçador da criatividade dos estudantes.

Na terceira área “Multiletramentos, lógica, análise e representação” identificamos a correlação com outras componentes curriculares como é o caso da matemática.

...Nesse contexto, a representação assume, nas Ciências da Natureza, o papel de construir modelos simbólicos dos diversos fenômenos, contribuindo para a percepção da ciência no âmbito dos Multiletramentos. Além disso, a lógica, a análise e a representação devem atuar em conjunto, pois a natureza não age biológica, física e quimicamente de maneira isolada, o que exige uma visão interdisciplinar das ciências. (DISTRITO FEDERAL, 2014. p. 54)

A relação com os conteúdos específicos da matemática aparece na capacitação do uso do raciocínio lógico, da análise e da representação simbólica dos fenômenos naturais. Assim a interdisciplinaridade extrapola a área de ciências e necessita dos conhecimentos matemáticos como formas de explicação e entendimentos dos fenômenos estudados. O quarto Multiletramento “natureza, transformação e sociedade”, ressalta que o estudante deve ser o centro do processo pedagógico.

...Além disso, esses três elementos vivem em constante transformação e, desse modo, é preciso que o trabalho pedagógico docente propicie que o estudante construa uma visão crítica sobre os processos de interação entre natureza, ser humano e sociedade. Nessa perspectiva, ações pedagógicas multiletradas contribuem para desvelar a ideologia erigida nas diversas representações do que se considera “sustentabilidade”. (DISTRITO FEDERAL, 2014. p. 56)

Nota-se que na terceira e quarta dimensão de multiletramento, exige uma necessidade de domínios mínimos de conteúdos matemáticos. Dessa forma, mais uma vez a interdisciplinaridade encontra-se presente neste documento, fazendo com que os docentes procurem focar sua ação na aprendizagem discente com vistas à transformação da sociedade. Esta relação Matemática/química será explorada nos próximos tópicos de nosso texto.

2.1.3 Base Nacional Curricular Comum

A Base Nacional Curricular Comum - BNCC, é um documento de caráter normativo, lançado pelo Conselho Nacional de Educação e homologado pelo MEC em 2017, que define o conjunto orgânico e progressivo de aprendizagens essenciais que todos os alunos devem desenvolver ao longo das etapas e modalidades da Educação Básica, de modo que tenham assegurados seus direitos de aprendizagem e desenvolvimento, em conformidade com o que preceitua o Plano Nacional de Educação - PNE (BRASIL, 2017).

Nesse sentido, espera-se que a BNCC ajude a superar a fragmentação das políticas educacionais, enseje o fortalecimento do regime de colaboração entre as três esferas de governo e seja balizadora da qualidade da educação. Assim, para além da garantia de acesso e permanência na escola, é necessário que sistemas, redes e escolas garantam um patamar comum de aprendizagens a todos os estudantes, tarefa para a qual a BNCC é instrumento fundamental. (BRASIL, 2017, p.8)

A BNCC foi estruturada no formato de competências e habilidades a serem alcançadas pelos estudantes nas diferentes etapas da educação básica. Traz um elemento inovador que é o trabalho por meio de áreas de conhecimento e não por componentes curriculares ou disciplinas como era a organização da educação até então.

Nesse sentido, no ensino médio, serão consideradas disciplinas, ou componentes curriculares independentes, apenas a Matemática e a Língua Portuguesa. Os outros conteúdos deverão ser abordados por áreas do conhecimento sendo assim organizados: Área de Linguagens e suas Tecnologias (Português, Educação física, Artes e Inglês); Área de Humanas e Sociais Aplicadas (Filosofia, Sociologia, História e Geografia); Área de Ciências da Natureza e suas Tecnologias (Física, Química e Biologia).

A BNCC elenca 10 competências gerais para o ensino médio, apresentaremos aqui aquelas que entendemos ter uma relação direta com o ensino de ciências da natureza e com química. A competência nº 2, por exemplo, faz um apelo à formação para a pesquisa.

Exercitar a curiosidade intelectual e recorrer à abordagem própria das ciências, incluindo a investigação, a reflexão, a análise crítica, a imaginação e a criatividade, para investigar causas, elaborar e testar hipóteses, formular e resolver problemas e criar soluções (inclusive tecnológicas) com base nos conhecimentos das diferentes áreas. (BRASIL, 2017, p.9)

O exercício da curiosidade e a capacitação para iniciação científica devem estar presentes desde o início do ensino médio. Vale ressaltar que esta competência não é exclusividade da área das ciências da natureza, mas deve estar presente nas outras linguagens também. Por outro lado, ela define outra forma de ensinar ciências, que seria a negação do ensino das “ciências de resultados” e a aprendizagem da “construção do saber científico”.

A competência nº 7 da BNCC para o ensino médio, envolve, mais diretamente, a área de pesquisa científica com foco na visão e socioambiental.

Argumentar com base em fatos, dados e informações confiáveis, para formular, negociar e defender ideias, pontos de vista e decisões comuns que respeitem e promovam os direitos humanos, a consciência socioambiental e o consumo responsável em âmbito local, regional e global, com posicionamento ético em relação ao cuidado de si mesmo, dos outros e do planeta. (BRASIL, 2017, p.9)

A BNCC propõe que a área de Ciências da Natureza deva contribuir com a construção de uma base de conhecimentos contextualizada, que tem como objetivo preparar os estudantes para fazer julgamentos, tomar iniciativas, elaborar argumentos e apresentar proposições alternativas, bem como fazer uso criterioso de diversas tecnologias.

O desenvolvimento dessas práticas e a interação com as demais áreas do conhecimento favorecem discussões sobre as implicações éticas, socioculturais, políticas e econômicas de temas relacionados às Ciências da Natureza, assim como a de outras áreas. E que nos remetem a uma proximidade ao que preconizava nos PCN+ quando propunha

maior aproximação das componentes da área de Ciências da Natureza, Matemática e suas tecnologias.

Nesta concepção Biologia, Física, Química e, indiretamente a Matemática, fazem parte de uma área do conhecimento, não devem mais ser abordadas como conteúdos distintos, mas como elementos correlacionados que se unem ao desvendar o mundo em suas dimensões naturais. São ciências que têm em comum a investigação da natureza e dos desenvolvimentos tecnológicos, que compartilham linguagens para a representação e sistematização do conhecimento de fenômenos ou processos naturais e tecnológicos. As componentes dessa área compõem a cultura científica e tecnológica que, como toda cultura humana, é resultado e instrumento da evolução social e econômica. Nesta proposta, não podemos mais falar de interdisciplinaridade, pois as disciplinas não existem mais.

2.2 Relação da Química com a Matemática

No ensino médio, em modelos anteriores ao que propõe a BNCC, a organização por disciplinas ou componentes curriculares apresenta as ciências da natureza de formas distintas ao menos em três grandes conteúdos: química, física e biologia. Embora façam abordagens distintas, estes três grandes temas das ciências da natureza dependem muito de conhecimentos matemáticos para realizar suas demonstrações.

É muito comum os estudantes do ensino médio e, até do superior, não perceberem essa inter-relação entre os conhecimentos das diferentes áreas. Na verdade, essa divisão é realizada com o propósito de melhor identificar os conteúdos específicos para que ao juntar todos os conhecimentos o indivíduo possa ter uma formação completa. Embora isso seja o esperado, nem sempre é possível.

Como exemplo podemos pensar a seguinte situação: para o entendimento dos conteúdos aplicados como Estequiometria, Cálculos Proporcionais da Química, Cálculo de massas, Gases, entre outros é necessário que o estudante domine conteúdos específicos da Matemática tais como: divisão, multiplicação, soma, proporção, regra de três, porcentagem, equação do 1º grau (BARBOSA, 2016).

Essa inter-relação entre as áreas (Matemática-Química) está expressa em muitos livros didáticos como o de Canto e Peruzzo (2006, p.12) descreve que “no decorrer deste curso, você perceberá que, muitas vezes, a Química utiliza conceitos de outras áreas, principalmente da Matemática e da Física.” Este tipo de observação tem como objetivo estabelecer a relação entre as áreas de conhecimento.

Na resolução de um problema prático, é necessário que a Química atue em conjunto com outras ciências. É importantíssimo salientar que nenhum processo nesse campo será possível se os conceitos básicos da Química não forem bem compreendidos. São esses conceitos que formam o alicerce de todo o conhecimento químico atual e que envolve todas as aplicações que o livro traz sobre o cotidiano. (CANTO e PERUZZO, 2006, p.13)

Diante dos esclarecimentos do autor entende-se que, mesmo para compreender

conceitos básicos de química é necessário que se compreenda conceitos de outras ciências que serão complementados uns pelos outros.

Segundo Barboza (2016) a matemática e a química são disciplinas importantes para o homem e seu desenvolvimento, e as duas áreas enfrentam problemas na aprendizagem por parte dos alunos. Acredita que trabalhar as duas componentes de forma integrada pode ser um modo de atrair a atenção dos estudantes, mostrando a ligação existente entre elas e dando sentido para aprendê-las. Essa prática pode proporcionar aprendizagens significativas, relacionando as duas áreas e a compreensão do conteúdo como um todo.

Embora existam algumas iniciativas nesta linha de trabalho, o ensino de química ainda é realizado de forma muito isolada e bastante abstrata. Neste sentido, nossa pesquisa visa analisar como os estudantes da licenciatura em química percebem a relação dos conhecimentos matemáticos para a aprendizagem em química.

2.3 Ensino Superior e formação de professores de química

A formação de professores é uma arte que requer diversas interpretações. No Brasil esta é uma área bastante complexa, principalmente pela desvalorização da profissão docente. Quando pensamos em uma área distinta como a química, esta formação de professores pode ser ainda mais complexa pelo fato de abranger conteúdos de difícil aprendizagem com a capacitação necessária para o exercício da docência.

Formar um professor de Química exige que, ao final do curso de graduação, o licenciado garanta bom conhecimento sobre Química e sobre como se ensinar Química, o que envolve muitos aspectos, pois para se ensinar algo de modo significativo é preciso transitar muito bem pela área da Química e pela área de Ensino de Química (NARDI, 2009, p. 45)

Nesse sentido, a formação de professores assume uma dupla função que pode ser resumida em capacitação técnica e capacitação didática. A capacitação técnica está associada ao saber química e a didática ao saber ensinar química. Para se alcançar tais objetivos é necessário que os cursos de formação inicial de professores “promovam novas práticas e novos instrumentos de formação, como estudos de caso e práticas, estágios de longa duração, memória profissional, análise reflexiva, problematizações etc.” (Almeida; Biajone, 2007, p. 293).

O Ministério da Educação reconhece o despreparo dos licenciados recém-egressos das faculdades, quanto ao modo de ensinar. “Em outras instituições de ensino superior, o problema da formação docente resulta de uma formação frequentemente livresca, em que a distância entre teoria e prática docente se agrava pelo baixo domínio disciplinar.” (BRASIL, 2018, p.139).

Como já abordamos acima, a formação dos professores de química necessita também de fazer essa relação entre a matemática e a química. Neste sentido os currículos de formação de professores de química apresentam uma certa quantidade de componentes curriculares específicos da área de matemática.

Essa realidade muitas vezes é vista pelo licenciando como um empecilho para sua formação. Ou seja, muitos estudantes da licenciatura acabam desistindo do curso ou se desmotivando pelo fato de não conseguir apreender com sucesso os conteúdos de matemática e, muitas vezes, por não conseguir relacionar esses conteúdos com aqueles da área específica de química.

2.4 Evasão no Curso de Licenciatura em química do IFB

De acordo com de Souza et al (2018), a evasão nos cursos de ensino superior é um problema percebido no mundo todo, muitas pesquisas abordam este tema e apontam diferentes causas para tal fenômeno. No curso de licenciatura em Química do IFB Campus Gama essa realidade não é diferente. Conforme o Projeto Pedagógico de Curso - PPC:

O curso iniciou suas atividades no primeiro semestre de 2012, oferecendo aulas nos períodos matutino e noturno, abrindo 40 vagas em ambos os turnos para a formação de licenciados em Química. Atualmente, o curso é ofertado no período integral (matutino/vespertino) com entrada anual totalizando um ingresso de 40 novos alunos por ano. (IFB, 2020, p. 6)

Ante o exposto o curso de química do IFB tem uma entrada anual de 40 estudantes, mas ao finalizar o ciclo de 4 anos tem um número muito pequeno de egressos. Esta constatação nos remete ao questionamento do porquê ocorre tanta evasão no curso.

A evasão pode ser ocasionada por diversos motivos, muitas vezes sendo a distância e localidade do instituto até a residência do licenciando, a falta de identificação com a metodologia adotada pelos professores da instituição, a necessidade de trabalhar e a falta de socialização com os colegas de turma (FREDANHAGEM, 2014; SOUZA et al, 2018).

Outra causa apontada em diversos estudos é a dificuldade com as áreas de exatas.

Os cursos da área de exatas possuem a natureza de terem um grande número de reprovações, desistências e permutações para outros cursos, isto faz com que haja uma grande demanda de profissionais para um número ainda pequeno de formandos, assim, quando tratamos das licenciaturas, muitas vezes esta demanda tem que ser atendida por profissionais formados em outras áreas daquela que irão ministrar e, isto é algo bastante comum de se observar nas escolas brasileiras. (SOUZA; NUNES; AGUIAR, 2018, p.1)

A necessidade de profissionais é muito maior do que a oferta de licenciados no mercado de trabalho. Em regiões mais afastadas de grandes centros há uma falta constante de docentes, principalmente na área de exatas. Este fato se dá em virtude da não valorização da profissão docente e da dificuldade de acesso à formação específica. A ausência de atração pela profissão docente, é um fator que leva muitos licenciandos a desistirem do curso nas Instituições de Ensino Superior, fato que provoca um alto índice de evasão (MORAES, 2020).

A situação nacional se repete no Distrito Federal, quando constatamos que

Os números de casos de evasão ocorridos no IFB não diferem de números

apresentados em outras instituições. Podem ser considerados alarmantes como nos demais casos que preocupam todos os estados do país, bem como classificados na ordem geral dos problemas sociais e políticos brasileiros. (FREDENHAGEM, 2014, p. 53)

Nosso foco neste estudo é identificar qual a influência que a matemática pode ter, na contribuição da evasão escolar, no caso do curso de química do IFB. Informalmente percebemos que muitos estudantes desistem do curso logo nos primeiros semestres quando se deparam com as reprovações nas componentes de matemática (pré-cálculo, cálculo I e II, etc...) que fazem parte dos pré-requisitos para dar continuidade aos estudos da licenciatura em química.

3 | METODOLOGIA

A pesquisa se define como Pesquisa- Intervenção o que segundo Luria (2010) é um trabalho no qual o pesquisador visa analisar os sujeitos em seus próprios ambientes cotidianos, visto que, a pesquisa não pode ser isolada de um contexto. Para isso, o autor defende que o pesquisador: adapte-se à cultura local, trace entrevistas nos ambientes comuns dos pesquisados, realize atividades plausíveis para os estudantes e se interponha nas falas dos sujeitos a fim de entender os níveis de abstração dos envolvidos, isto inclusive até propondo caminhos adequados de pensamento e percebendo a adaptação a novas respostas.

A Análise Longitudinal do Discurso dos ingressantes no curso e acompanhamento do desenvolvimento desses, quanto à linguagem e relação Matemática-Química, realizar-se-á por meio de questionários aplicados em diferentes momentos da formação de uma turma de ingressantes no curso de licenciatura em química do IFB no ano de 2020.

O primeiro questionário inicialmente foi aplicado enquanto os estudantes estavam no primeiro semestre do curso, cursando a componente de Pré-cálculo. Este questionário possui questões objetivas que indagam sobre: noções de interesse dos discentes pela Matemática e Química, um levantamento sobre as notas deles nessas disciplinas e em ramos correlatos durante o Ensino Médio e a coleta das notas no Exame Nacional do Ensino Médio. As questões abertas, deste questionário, têm como objetivo a sondagem se o estudante adentrou no curso pelo real interesse da Licenciatura em Química e qual a noção inicial dos alunos quanto à relação Matemática-Química.

Foram realizados mais dois questionários cujo objetivos estavam voltados às notas da primeira prova e segunda prova na componente pré-cálculo, assim como, para a verificação de correlação entre Matemática e Química. Foi uma oportunidade de analisar se havia coerência entre as notas que os estudantes tinham no Ensino Médio e as notas que alcançaram em pré-cálculo (Ensino Superior). Ao mesmo tempo que procurou-se levantar dados sobre como a instituição superior (IFB) colaborou, ou não, para a melhoria de desempenho dos estudantes.

A segunda etapa de aplicação de questionários foi realizada no final do primeiro semestre, momento em que os estudantes já haviam experienciado a componente, pré-cálculo, e tiveram noção das aplicabilidades da matemática. Um terceiro questionário foi aplicado, quando os sujeitos já haviam vivenciado duas das componentes (pré-cálculo e Cálculo I). Este mesmo questionário foi aplicado aos veteranos e realizada a comparação entre as respostas dos veteranos com as dos calouros.

Na terceira etapa elaborou-se um questionário para os docentes de química com o intuito de atender ao objetivo seis. As respostas dos docentes ajudaram a compreender a relação da matemática com a química e como a falta de pré-requisitos matemáticos interfere diretamente na aprendizagem em química.

4 | RESULTADOS FINAIS E DISCUSSÃO

Apresentamos e discutimos aqui os resultados obtidos nos cinco questionários aplicados durante tempo em que este projeto foi realizado. Para objetivar a discussão apreentaremos algumas das questões e não os questionários em sua integra.

4.1 Dados do Primeiro Questionário

Este questionário foi aplicado aos estudantes ingressantes no primeiro semestre de 2019. Dos questionários distribuídos tivemos a devolução de apenas dezenove respondentes. Ressaltamos que foi exatamente três semanas depois do início das aulas desse semestre se deu início ao isolamento social provocado pela pandemia do Covid19. Este fato interferiu diretamente na pesquisa pelo fato de não ter sido possível acompanhar as aulas desses ingressantes como era previsto no projeto inicial.

Ao serem questionados se ao escolherem o curso de Licenciatura em Química tinham noção da quantidade de componentes curriculares da área de matemática, tais como: pré-cálculo, cálculo I e II, estatística, álgebra linear e equações diferenciais, obtivemos os seguintes resultados:

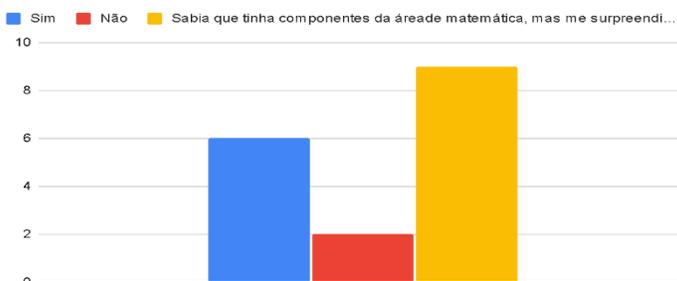


Gráfico 1

Fonte: Pesquisa de campo

Dos 18 respondentes apenas dois afirmam não ter conhecimento da quantidade de componentes específicos da área de matemática no curso de licenciatura em química. Seis afirmam saber da quantidade de componentes e a grande maioria, nove estudantes, afirmam que embora soubessem se surpreenderam com a quantidade componentes específicos da área de matemática.

Outra pergunta que achamos relevante trazer para discussão foi a que questionava se os ingressantes conseguem comparar os conteúdos estudados em matemática no curso de licenciatura com os conteúdos de matemática da Educação Básica.

Nas respostas identificamos que a maioria dos respondentes conseguem fazer uma relação direta entre os conteúdos dos dois níveis de ensino. Apenas quatro, dos dezoito respondentes, ou seja, cerca de vinte por cento, não consegue estabelecer esta relação direta.



Gráfico 2

Fonte: Pesquisa de campo

A inferência que podemos fazer deste dado é que os estudantes da licenciatura de química são oriundos de diferentes escolas, e distintos sistemas de ensino. Esta diversidade apresenta diferentes abordagens curriculares e isso se reflete nos diferentes níveis de conhecimento quando o estudante ingressa no ensino superior.

Ao serem questionados sobre seu desempenho na área de matemática desde o ensino médio, o Exame Nacional do Ensino Médio (ENEM) e pré-cálculo, identificamos os seguintes aspectos:

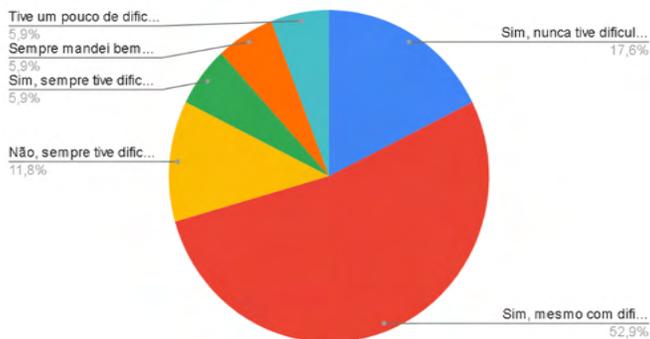


Gráfico 3

Fonte: Pesquisa de campo

A grande maioria dos respondentes afirmam que mesmo com dificuldade estão conseguindo acompanhar os conteúdos de pré-cálculo. Das outras respostas identificamos que aqueles que não tinham dificuldade na área, ou os que apresentavam algum tipo de dificuldade, continuam com o mesmo desempenho na componente. Essas discrepâncias ocorrem em função do que foi inferido na questão anterior, diferentes formações ocorridas na educação básica, associadas às diferenças individuais nos níveis de aprendizagem. Alguns estudantes apresentam maior facilidade e outros maior dificuldade em determinadas áreas de conhecimento.

Na questão sobre a relação entre os conteúdos de matemática e sua interferência na aprendizagem de química, constatou-se que a grande maioria dos estudantes identificam que existe uma integração entre as duas áreas que fazem com que a aprendizagem se torne mais significativa.



Gráfico 4

Fonte: Pesquisa de campo

Apenas um dos dezoito respondentes afirma que somente em alguns momentos percebe a relação entre os conhecimentos das duas áreas.

4.2 Dados do Segundo Questionário

O segundo questionário foi aplicado assim que terminou o primeiro semestre e teve como finalidade identificar se as impressões iniciais dos ingressantes continuavam as mesmas após a conclusão da componente curricular pré-cálculo. Neste questionário tivemos um número bem menor de respondentes, apenas oito estudantes. Atribuímos essa baixa em virtude de o questionário ter sido enviado via plataforma Google Formulários e com o panorama da pandemia a grande maioria dos estudantes estarem saturados de fazer atividades online, sendo que este questionário se configuraria como mais uma atividade. Vale ressaltar que estes respondentes não são, necessariamente, os mesmos que responderam às questões anteriores.

Ao serem questionados sobre sua nota final na componente pré-Cálculo obtivemos os seguintes dados: não houve, entre os oito respondentes nenhuma nota dez, assim como também não houve nenhuma nota abaixo de cinco. Ou seja, os respondentes ficaram com notas finais medianas na componente pré-cálculo. Três dos respondentes ficaram com excelentes notas, entre nove e nove pontos nove, quatro ficaram aprovados com notas entre sete e oito e apenas um dos respondentes ficou com uma nota abaixo de sete, mas mesmo assim, foi aprovado, uma vez que a média para a provação neste curso é seis.

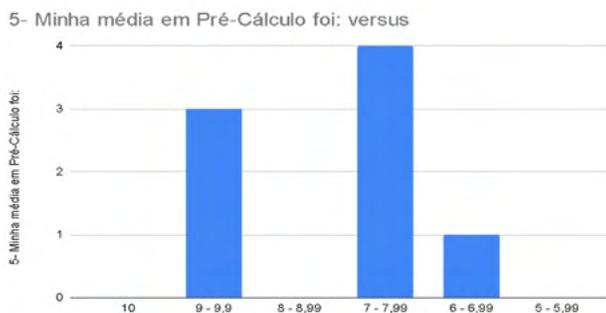


Gráfico 5

Fonte: Pesquisa de campo

Podemos inferir, que entre estes oito respondentes estejam aqueles que apresentam maior facilidade na aprendizagem em matemática, isso fez com que os mesmos tivessem um aproveitamento favorável nessa componente.

Ao serem questionados sobre a relação existente entre a componente pré-cálculo e as componentes de química com as quais tiveram contato no primeiro semestre, obtivemos o seguinte resultado:

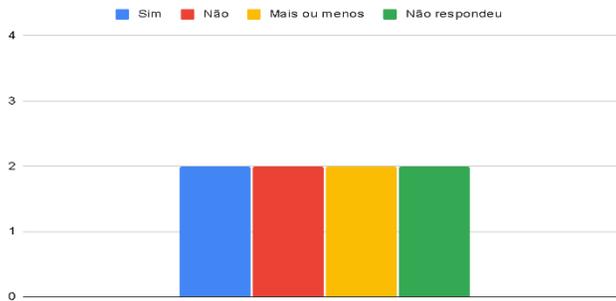


Gráfico 6

Fonte: Pesquisa de campo

Identificamos que houve uma média nas respostas, ou seja, cada dois estudantes apresentaram a mesma resposta. Desse gráfico podemos inferir que aos menos cinquenta por cento dos respondentes, os que responderam sim e os que responderam mais ou menos, conseguem estabelecer relações entre os conteúdos de química e matemática. Enquanto que os outros cinquenta por cento não estabelecem nenhum tipo de relação.

4.3 Dados do Terceiro Questionário

O terceiro questionário foi aplicado ao final do segundo semestre da turma, quando os estudantes já havia concluído mais um componente da área de matemática, cálculo. Este questionário teve nove respondentes, vale ressaltar que estes respondentes não são, necessariamente, os mesmos que responderam às questões anteriores..

Uma das questões que achamos importante trazer para a discussão é a que arguia sobre a média que cada estudante havia alcançado na componente de Cálculo I foi:

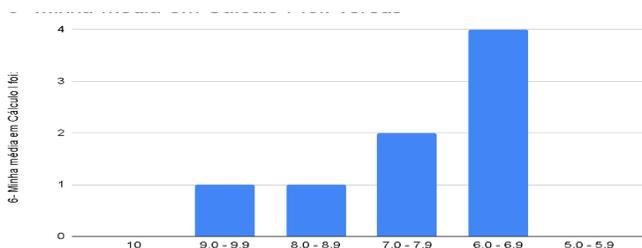


Gráfico 7

Fonte: Pesquisa de campo

Identificamos nestas respostas que houve uma grande diferença em relação ao gráfico 5 que apresentava as médias de pré-cálculo. Podemos inferir que o aproveitamento desses respondentes, em relação aos que responderam o questionário anterior foi bastante

inferior. Aqui identificamos que quase cinquenta por cento ficou com uma nota inferior a sete, embora todos tenham sido aprovados na componente, o aproveitamento está bem inferior ao componente anterior.

Uma das inferências apresentadas aqui é que no componente pré-cálculo há uma espécie de revisão dos conteúdos aprendidos no ensino médio, enquanto que no cálculo já existem conteúdos novos que são importantes para as aprendizagens que se seguem. Ressaltamos, também que a situação de ensino remoto facilitou determinadas aprendizagens, oportunizando revisões de conteúdos por meio de aulas gravadas e de listas de exercícios que eram compartilhadas entre os estudantes, proporcionando diversas facilidades que na modalidade presencial não são comuns de ocorrer, como poderemos constatar no próximo gráfico.

Ao serem questionados sobre o formato não presencial das aulas, em virtude da pandemia, até que ponto as plataformas utilizadas como o Youtube e o NEAD (plataforma de Educação a Distância do IFB) ajudaram no processo de aprendizagem obtivemos as seguintes respostas:

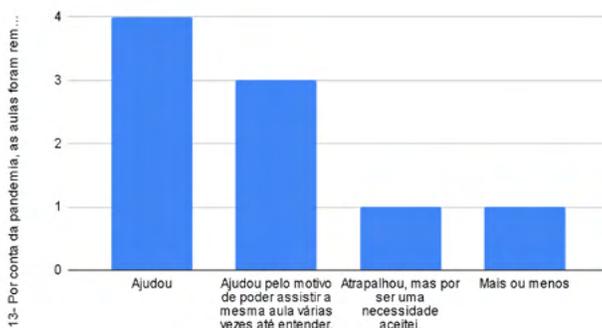


Gráfico 8

Fonte: Pesquisa de campo

Setenta e oito por cento dos respondentes afirmam que o uso das plataformas ajudou na aprendizagem, enquanto que apenas dois respondentes afirmam que tenha atrapalhado de alguma forma.

Este dado reforça o que afirmamos acima que o ensino remoto, de certa forma, facilitou algumas aprendizagens, e ao mesmo tempo algumas aprovações nesses componentes da área de exatas. Pois, nesta modalidade os professores foram forçados a reduzir objetivos das componentes curriculares, trabalhar com conteúdos mais essenciais e se adequar às condições atípicas provocadas pela pandemia.

4.4 Dados do Quarto Questionário

O quarto questionário foi aplicado no mês de julho de 2021 aos veteranos do curso de licenciatura e química do Instituto Federal de Brasília IFB, Campus Gama. O questionário foi realizado na plataforma do Google Formulários e enviada aos diversos grupos de redes sociais dos estudantes. Após um mês de diversas solicitações conseguimos o retorno de dezesseis respondentes.

Dos estudantes veteranos que retornaram os questionários temos estudantes que ingressaram em desde o ano de 2012 até 2018.

Semestre/Ano de ingresso	1/2012	2/2012	2/2013	1/2015	1/2016	1/2017	1/2018
Estudantes	1	1	1	2	1	3	7

Tabela 1

Fonte: Pesquisa de campo

Ao analisar a tabela 1, identificamos que a maioria dos estudantes estão fora do fluxo do curso, quer dizer, que em função de reprovações em componentes curriculares que são pré-requisitos, a maioria dos estudantes deixam de frequentar suas turmas regulares e ficam, cursando disciplinas que não exigem os pré-requisitos daquelas nas quais eles reprovaram.

Esta tabela demonstra, também, que a maioria dos respondentes já eram para estar graduados, pois, se o curso de licenciatura em química tem a duração de cinco anos (dez semestres), em tese, só eram para estar ainda matriculados os ingressantes no ano de 2016. Identificamos que cinco dos respondentes estão nesta situação. Os outros onze, embora estejam dentro do período regular, nada garante que estejam no fluxo de suas turmas.

Foi perguntado aos veteranos se os mesmos gostavam muito de matemática no período em que cursavam o ensino médio e as respostas obtidas são as que seguem.

Concordo Plenamente	Concordo parcialmente	Não concordo nem discordo	Discordo parcialmente	Discordo Plenamente
4	7	1	2	2

Tabela 2

Fonte: Pesquisa de campo

Dessa tabela podemos inferir que mais de sessenta por cento dos respondentes gostavam de matemática quando cursavam o ensino médio. Apenas dois se posicionam em discordar totalmente da afirmativa de gostar muito de matemática durante a educação

básica.

Quando questionados sobre as dificuldades em cálculo na faculdade identificamos que a maioria, também apresentou certa dificuldade na componente.

Concordo Plenamente	Concordo parcialmente	Não concordo nem discordo	Discordo parcialmente	Discordo Plenamente
7	4	2	1	2

Tabela 3

Fonte: Pesquisa de campo

Esta tabela demonstra que, mesmo os que gostavam da componente matemática, tiveram algum tipo de dificuldade nas componentes de cálculo na faculdade. Desse dado podemos inferir que as dificuldades de aprendizagem, na área de exatas, não estão atreladas apenas às facilidades ou ao gostar de determinado conteúdo. Mas, se configuram em função da complexidade e do nível de abstração que os conteúdos de cálculo requerem.

Ao se posicionarem frente à afirmativa: “Eu não entendo porque há tantas disciplinas de matemática no curso de química”, as respostas dos veteranos apresentam uma tabela bastante interessante. Enquanto dez dos respondentes discordam plenamente da afirmativa, cinco concordam ao menos em parte. Isso representa que muitos estudantes ainda não compreendem a relação e a necessidade da aprendizagem em matemática para a aprendizagem em química.

Concordo Plenamente	Concordo parcialmente	Não concordo nem discordo	Discordo parcialmente	Discordo Plenamente
2	3	0	5	10

Tabela 4

Fonte: Pesquisa de campo

Outros cinco respondentes discordam parcialmente. O que podemos inferir desse grupo que discorda parcialmente é que os mesmos, embora vejam a importância da matemática para a aprendizagem em química, avaliam que a quantidade de conteúdos da área de matemática pode estar exagerada para um curso de licenciatura em química.

Ao serem questionados se já haviam reprovado em alguma componente durante o curso quatorze, dos dezesseis respondentes, afirmam que sim. Sendo que desses, quase, oitenta e oito por cento, reprovaram em algum componente da área de matemática. Ante o exposto, concluímos que os veteranos passaram por mais dificuldades do que os calouros nas componentes de matemática.

4.5 Dados do Quinto Questionário

Este último questionário foi aplicado a professores do ensino médio que atuam na componente química. O questionário foi elaborado na plataforma Google Formulários e divulgado entre grupos de professores que atuam em diversas instituições, a maioria delas instituições públicas do Distrito Federal. Ao todo conseguimos obter respostas de 19 professores.

Das questões realizadas escolhemos analisar aqui aquela que mais atende a nossos objetivos iniciais que é o de identificar a relação entre matemática e química. No caso dos docentes esta questão foi aberta, então passaremos a descrever as respostas de cada um deles. Com o intuito de não identificar os docentes denominamos as respostas como P1, P2, P3... e assim, sucessivamente.

Como você descreve a relação entre Química e Matemática?

P1, 9, 10 e 15. Soluções, cinética, equilíbrio químico, distribuição eletrônica, cálculos estequiométricos, estudo de gases, termoquímica, eletroquímica.

P2, 14 e 19. Cálculo estequiométrico, Equilíbrio, pH.

P3 e 12. A físico-química de modo geral: estequiometria, concentrações de soluções, termoquímica, cinética, equilíbrio, balanceamento de reações, toda aplicação de fórmulas, atomística.

P4. Grandezas Químicas, cálculos estequiométricos, meia vida, radioatividade, funções químicas, reações químicas, equilíbrio químico...

P5 e 11. Em todo o ensino de química é necessário, mas na termodinâmica, na química inorgânica na parte de cálculos estequiométricos entre outros...

P6. Cálculos de massa, balanceamento, soluções, concentração, diluições, termodinâmica, ligações químicas, polaridade.

P7 e 13. Cálculo estequiométrico, média ponderada de isótopos, equilíbrio químico, cinética...

P8, 16, 17 e 18. A Matemática é extremamente importante para alguns tópicos da Química como estequiometria, cálculos de concentração e relações de proporção. (Fonte: Pesquisa de campo)

Em todas as falas dos docentes identificamos a necessidade de conhecimento matemáticos para a aprendizagem em química. Tais apontamentos dos docentes corroboram com os autores como Barbosa (2016) e Canto e Peruzzo (2006) afirmam a aprendizagem em química exige que o estudante domine conteúdos específicos da matemática e também da física. Isto porque a química atua em conjunto com as outras ciências e para compreender seus conceitos básicos é necessário dominar conceitos básicos de outras ciências.

5 | CONSIDERAÇÕES FINAIS

Como conclusão do primeiro questionário podemos inferir que a maioria dos respondentes apresenta bons prerrequisitos e por isso não encontram muitas dificuldades

no primeiro componente da área de matemática.

Os dados obtidos nas respostas dos ingressantes nos leva a afirmar que metade dos respondentes não conseguem ver relação entre a química e a matemática estudada no primeiro semestre da licenciatura em química, é bom deixar claro que estamos tratando aqui de um grupo seletivo, um grupo que tem boas notas em matemática e que, de certa forma, está aberto à aprendizagem pelo fato de gostarem do que estão fazendo.

Identificamos, também, que o ensino remoto, de certa forma, facilitou algumas aprendizagens, e ao mesmo tempo algumas aprovações nos componentes da área de matemática. Nesta modalidade os professores reduziram os objetivos das componentes curriculares, focando conteúdos mais essenciais e este fato promoveu maior número de aprovações do que em semestres anteriores.

Ao serem questionados se já haviam reprovado em alguma componente na área de matemática durante o curso, a maioria dos veteranos afirmaram que sim. Concluímos que os veteranos passaram por mais dificuldades do que os calouros nas componentes de matemática.

Esse dado pode estar associado às facilidades produzidas pelo estudo remoto ou por situações provocados pelos últimos processos seletivos que têm exigido uma nota mais alta na classificação do ENEN para o ingresso no curso de licenciatura em química. Mas, estas são apenas suposições e hipóteses que não puderam ser comprovadas nesta pesquisa.

Ao confrontarmos os dados dos licenciandos, com as respostas dos professores que atuam na educação básica identificamos que a correlação de dependência entre os conhecimentos matemáticos e o sucesso na aprendizagem em química é fato. Uma das questões que foi levantada na fala dos licenciandos é a de que, talvez, o maior problema esteja no nível de exigência dos conhecimentos matemáticos, proposto no plano de curso da licenciatura. Ou seja, será que um licenciado em química necessita ter um conhecimento tão aprofundado da área de matemática? Até que ponto esse conhecimento vai auxiliar na transição didática dos conteúdos de química na educação básica? Estas, talvez sejam, questões motivadoras de um outro estudo.

REFERÊNCIAS

BALICA, M. E. de P.; LEITE, L. R.; JULIÃO, M. S. da S. *Fatores Associados à Evasão dos Licenciandos em Química de uma Universidade Pública Cearense*. **South American Journal of Basic Education**, Technical and Technological, [S. l.], v. 7, n. 1, p. 33–62, 2020. Disponível em: <<https://revistas.ufac.br/index.php/SAJEBTT/article/view/3330>>. Acesso em: 15 julho. 2021.

BARBOZA, A. K. A. A (Inter) *Relação da Matemática e a Química: Uma Visão Pontual De Alunos Do 1º Ano Do Ensino Médio*. **Trabalho de Conclusão de Curso** (Especialização em Ensino de Ciências e Matemática Para Séries Finais: Ensino Fundamental - 6º Ao 9º Ano) - Instituto Latino-Americano de Ciências da Vida e da Natureza, Universidade Federal da Integração Latino-Americana, Foz do Iguaçu. 2016.

BRASIL. **Parâmetros Curriculares Nacionais do Ensino Médio PCN+**. SEMTEC. Brasília, MEC. 2002. Disponível em: <http://portal.mec.gov.br/seb/arquivos/pdf/ciencian.pdf> consulta realizada em 01 de junho de 2021.

_____. **BASE NACIONAL COMUM CURRICULAR - Ensino Médio**, Brasília, MEC, 2017. Disponível em <http://basenacionalcomum.mec.gov.br/> consulta realizada em 10 de junho de 2021.

CANTO, E. L.; PERUZZO, F. M. **Química na abordagem do cotidiano**. São Paulo: Moderna, 2006.

DISTRITO FEDERAL. **CURRÍCULO EM MOVIMENTO DA EDUCAÇÃO BÁSICA ENSINO MÉDIO**. Brasília: GDF, 2014. disponível em: http://www.cre.se.df.gov.br/ascom/documentos/subeb/cur_mov/5_ensino_medio.pdf consulta realizada em 25 de maio de 2021.

FERNANDEZ, C. *Formação de Professores de Química no Brasil e no mundo*. SCIELO, 2018. Disponível em: <https://www.scielo.br/fj/ea/a/8wzGrXH_cTnc5WqY9_NgTPMjm/?lang=pt#>. Acesso em: 15 julho de 2021.

FREDENHAGEM, S. V. *Evasão escolar no âmbito do Instituto Federal de Brasília*. **Revista EIXO**, Brasília, IFB, v.3 n.2, p. 49-71, jul./ dez. 2014.

FRITSCH, R.A **problemática da evasão em cursos de graduação em uma universidade privada**. **37ª Reunião Nacional da ANPEd** – 04 a 08 de outubro de 2015, Ufsc – Florianópolis.

INSTITUTO FEDERAL DE CIÊNCIA, EDUCAÇÃO E TECNOLOGIA DE BRASÍLIA - IFB. **Projeto Pedagógico de Curso - Licenciatura em Química**. Brasília: IFB. 2020. Disponível em: <<https://www.ifb.edu.br/index.php/estude-no-ifb?id=3435>>. Acesso em: 15 julho de 2021.

LURIA, A.R. ; VIGOTSKII, L.S; LEONTIEV, A. N. **Linguagem, Desenvolvimento e Aprendizagem**. 16ª edição. São Paulo: Ícone, 2017.

MAIA, A. J. et al. *Taxa de evasão dos cursos da URCA com as disciplinas de Matemática na grade curricular*. Capítulo 14, URCA, 2020. Disponível em: <https://www.researchgate.net/publication/340407382_Taxa_de_evasao_dos_cursos_da_URCA_com_as_disciplinas_de_Matematica_na_grade_curricular>. Acesso em: 15. Julho de 2021.

SILVA, G. S. da. *Retenção e evasão no ensino superior no contexto da expansão: o caso do curso de engenharia de alimentos da UFPB*. **Dissertação (mestrado)**. João Pessoa, FFP, 2017.

SOUZA, F. Y. de O; NUNES, J. C; Aguiar, L. O. *A EVASÃO DO CURSO DE LICENCIATURA EM QUÍMICA DO VALE DO SÃO FRANCISCO*. **Anais V CONEDU**. Campina Grande, 2018. Disponível em: <<https://editorarealize.com.br/artigo/visualizar/45740>> acesso em 15 julho de 2021.

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

Data de aceite: 10/01/2022

Cleiseano Emanuel da Silva Paniagua

Doutor em Química pela Universidade Federal de Uberlândia

Discente do curso de especialização em Ensino de Ciências e Matemática do Instituto Federal do Triângulo Mineiro - *Campus* Uberlândia
<http://lattes.cnpq.br/12970002659897780>
<https://orcid.org/0000-0003-3587-486X>

RESUMO: O processo de formação inicial e continuada de professores na educação básica brasileira vem há décadas mostrando a necessidade de políticas públicas voltadas para a capacitação dos educadores. Uma profissão que é sinônimo de orgulho em qualquer país desenvolvido, que no cenário brasileiro se transformou na profissão mais desvalorizada de todas e que recursos para educação são dispendiosos e desnecessários e que não trazem retorno algum. Uma profissão que nos tempos atuais é sinônimo de “bico” ou “freelancer” até conseguir algo melhor. Uma profissão que é considerada o caminho mais curto e rápido para se obter um diploma de curso superior, bastando somente olhar para a quantidade de cursos na modalidade de ensino a distância. Diante disso, este trabalho buscou avaliar o perfil de um professor de química que relata a história e o todo o trajeto profissional que vem sendo feito em sua formação continuada e qual a visão do professor em relação ao ensino tradicional e o uso de ferramentas tecnológicas na educação.

PALAVRAS-CHAVE: Química, ensino tradicional,

processo de formação.

EXPERIENCE REPORT OF THE INITIAL AND CONTINUOUS TRAINING PROCESS OF A CHEMISTRY TEACHER: PRESENTATION, HISTORY, CHALLENGES AND PERSPECTIVES IN THE TEACHING CAREER

ABSTRACT: The process of initial and continuing teacher training in basic education in Brazil has been showing for decades the need for public policies aimed at training educators. A profession that is synonymous with pride in any developed country, which in the Brazilian scenario has become the most undervalued profession of all and which resources for education are expensive and unnecessary and that do not bring any return. A profession that nowadays is synonymous with “beak” or “freelancer” I even got something better. A profession that is considered the shortest and fastest way to obtain a university degree, just looking at the number of courses in the distance learning modality. Therefore, this work sought to assess the profile of a chemistry teacher who tells the story and the entire professional path that has been done in his continuing education and what is the teacher’s view in relation to traditional teaching and the use of technological tools in education.

KEYWORDS: Chemistry, traditional teaching, training process.

APRESENTAÇÃO PESSOAL E HISTÓRICO DE VIDA



Meu nome é Cleiseano Emanuel da Silva Paniagua, tenho 36 anos e sou natural da cidade de Patrocínio/MG. Filho de Cleide Silva (*in memorian*) e José Antônio Paniagua morei e fui criado pelos meus avós maternos: Odília Maria da Silva (*in memorian*) e Lourival Alves da Silva (*in memorian*) que eram completamente analfabetos. Minha formação se deu única e exclusivamente na Escola Estadual Irmã Gislene, localizada no bairro São Cristovão, na cidade de Patrocínio. Ao final do ensino médio não tive condições de fazer a famosa colação de grau, visto que uma escolha deveria ser feita: pagar a taxa de inscrição do vestibular da Universidade Federal de Uberlândia (UFU) ou pagar para participar do cerimonial, no qual seria homenageado como o melhor aluno do ensino médio. Paguei a taxa de inscrição e prestei o vestibular para cursar Bacharelado em Química no qual fui aprovado. Sem recursos financeiros ou qualquer apoio, resolvi sair da cidade de Patrocínio e ir para a cidade Uberlândia em 2006. Em 2010, já com um filho de quase um ano, terminei o curso e passei no concurso para químico na Universidade Federal do Tocantins, no qual permaneci no cargo por 45 dias, vindo a pedir exoneração para assumir outro concurso na cidade de Formosa/GO com a implantação de um *campus* do Instituto Federal de Goiás. Nesta cidade comecei a lecionar em uma escola particular católica e trabalhar no IFG permanecendo até janeiro de 2013. Durante este período conclui o curso de licenciatura em Química na UNIUBE em 2011, cursei a especialização em Docência do Ensino Superior e em Metodologia do Ensino de Química ambos pela Faculdade JK Serrana em Brasília ambos concluídos em 2012. Em 2013, solicitei remoção para o *campus* Itumbiara em função de ter sido aprovado no processo seletivo para mestrado em Química na UFU, com início em março de 2013 e término em fevereiro de 2015. Após o término do mestrado, realizei uma pequena pausa para estudar, conhecer e escrever o projeto de doutorado em Química em área completamente distinta a do mestrado e com outro pesquisador/orientador. Ingressei em fevereiro de 2016, qualifiquei em março de 2018 e defendi em 24 de agosto de 2018 (dois anos e cinco meses). Sai da Universidade e

devido à licença médica fui me dedicar a escrever livros, artigos e participar de eventos científicos. Em março de 2020, retornei a UFU para realizar o pós-doutorado em Química no mesmo grupo de pesquisa do doutorado. Em junho deste ano, iniciei meu segundo pós-doutorado na UFU com previsão de término em maio de 2022. Além do estágio pós-doutoral, estou concluindo o curso de especialização em ensino de Ciências e Matemática no IFTM *campus* Uberlândia e conclui o curso de Licenciatura em Ciências Biológicas na Faculdade Única no dia 01/11/2021 e em seguida iniciei o curso de Segunda Licenciatura em Física com previsão de término em novembro de 2022. Neste período de pandemia, em especial no presente ano, me dediquei completamente ao estudo e pesquisa que resultou em: *i*) participação em três congressos nacionais e um internacional; *ii*) publicação de 08 artigos em periódicos nacionais e internacionais; *iii*) organizei 20 e-books para a Atena Editora e contribuí com 19 capítulos de livros, sendo sete de autoria única; *iv*) concluí o curso de Licenciatura em Ciências Biológicas; *v*) finalizando o curso de especialização em Ensino de Ciências e Matemática no IFTM.

Como você se vê como professor?

Atualmente não estou atuando na docência, sendo que a última experiência foi até junho de 2019, enquanto instrutor de formação em química do SENAI para o curso de capacitação de Operadores de Plantas Químicas para preparar pessoas como pré-requisito para ingressar no quadro de colaboradores da mineradora YARA/Galvani. Entretanto, continuei a participar do processo de formação de discentes em nível de pós-graduação *stricto-sensu*, tendo dois alunos de doutorado e um de mestrado sob a minha co-orientação no grupo de Química Ambiental. Como co-orientador, o objetivo é desenvolver habilidades necessárias para o desenvolvimento da parte experimental de dissertação e/ou tese, que exige do discente um conhecimento teórico já bastante “lapidado” e em constante atualização. Neste sentido, é exigido tanto o constante processo de formação/atualização de conhecimentos nesta área e em áreas correlatas (biologia, física, matemática, geografia, língua portuguesa entre outras) quanto do conhecimento prático e atualização em relação à manipulação de técnicas instrumentais (equipamentos de análise). Além disso, se faz necessário possuir habilidades de escrita, leitura e conversação tanto na língua portuguesa, quanto no inglês (linguagem universal) e espanhol (predominante na América do Sul e Central), visto que os conhecimentos gerados necessitam ser divulgados tanto para a comunidade científica (apresentação de trabalho em congressos, redação de artigos e às vezes capítulo de livro ou livros completos), quanto para a sociedade (capítulos de livros, cartilhas informativas, palestras entre outros). Diante de todo este contexto, considero que sou um bom professor do ponto de vista de domínio de conteúdo, práticas de laboratórios, atualização do conhecimento, a constante busca com o intuito de facilitar o processo de ensino-aprendizagem dos discentes. Além disso, procuro contornar os déficits de formação tanto da educação básica, quanto do ensino superior que não podem passar batido neste

grau acadêmico. Em qualquer nível de ensino, sempre teremos a necessidade de poder ensinar algo e aprender muito com o aluno. Não há dúvidas de que à medida que se aumenta o grau acadêmico, maior será o conhecimento e bagagem necessária para o pleno desenvolvimento do docente e do discente. Logo, se faz necessário olhar para o ser humano e “enxergar” suas necessidades, anseios e expectativas, de forma a se conduzir o discente a ser protagonista de seu próprio aprendizado, enquanto ser que pensa e atuará na sociedade como um profissional que terá a responsabilidade de formar outros futuros profissionais seja no âmbito acadêmico ou fora dele.

Como os outros vêem você como professor?

Diante das experiências vivenciadas enquanto professor sempre presumi que seremos eternos aprendizes e que precisaremos sempre buscar novos conhecimentos ou atualizar os já existentes. Diante disso, a percepção e a crítica das pessoas em relação à minha atuação enquanto professor, sempre foram bem recebidas e auxiliaram no meu crescimento e amadurecimento profissional e pessoal. A constante busca por metodologias de ensino capazes de proporcionar ao aluno um aprendizado mais dinâmico e significativo, tais como: *i)* pequenas demonstrações experimentais em sala de aula; *ii)* a contextualização de todos os componentes curriculares; *iii)* o esforço para poder ter um espaço no qual os alunos pudessem ter contato experimental entre outras que possibilitassem melhorar as relações no processo de aprendizagem. A dedicação sempre foi vista com bons olhos por outros professores, coordenação, direção da escola e alunos. Em todas as experiências, nunca cogitei desistir de um aluno em função da sua dificuldade, pois sempre acreditei que o verdadeiro desafio de um docente se encontra, exatamente, na capacidade de ensinar ou conduzir ao processo de aprendizagem aqueles que possuem maior dificuldade. Além disso, os feedbacks provenientes dos professores, equipe pedagógica, direção escolar e dos próprios alunos fizeram e fazem toda a diferença no meu processo de formação como professor e ser humano. A facilidade em receber críticas e sugestões, sempre foram bem recebidas e colaboraram tanto para melhorar e/ou aperfeiçoar algo, quanto para novos aprendizados que proporcionam o amadurecimento como docente. Somado a isso, a conduta fora do âmbito escolar sempre foi fundamentada naquilo que levava para a sala de aula, como dizia o grande educador Paulo Freire: “ensinar exige ética e estética”, sempre entendendo que deveria ser professor dentro e fora da escola em termos de comportamentos e condutas pessoais, visto que não é possível dissociar a imagem do ser humano e do profissional professor.

Como você entende a relação entre metodologia e tecnologia?

As metodologias tradicionais já foram à única forma que se tinha para se aprender e ensinar, mas que perdeu essa condição à medida que o conhecimento científico avançou e possibilitou chegar-se ao atual patamar de desenvolvimento tecnológico que se encontra atualmente. A tecnologia chegou, avançou e rompeu barreiras que eram consideradas

intransponíveis e está presente em tudo que conhecemos e vivenciamos em nosso cotidiano. O benefício que a tecnologia possibilitou ao homem romper com o conceito de que trabalho é algo meramente braçal em diversos segmentos tais como: a agropecuária, a construção civil e o setor industrial. Estes setores já foram responsáveis por gerar grande quantidade de resíduos sólidos e líquidos que eram lançados sem nenhum tratamento ou dispostos de forma inadequada rente ao solo; principais consumidores de recursos minerais e que hoje são exemplos de gestão, gerenciamento e redução de custos e resíduos.

Diante deste contexto, é impossível a manutenção de sistemas educacionais fundamentados em métodos tradicionais, uma vez que a mesma tecnologia que provocou tamanha revolução em outros setores da sociedade fez o mesmo com a educação. Neste sentido, a escola precisa se adequar a toda esta realidade fundamentada na tecnologia, não sendo mais possível ignorar a era tecnológica na qual vivemos e que a escola precisa resgatar o seu significado enquanto espaço que proporciona a convivência e aprendizados que contribuirão para a formação do indivíduo enquanto sujeito ativo e protagonista diante da sociedade. Logo, a escola precisa “olhar” para a sociedade e procurar atender os anseios e necessidades que a mesma possui, na qual será possível por meio da reformulação tanto de Projetos Políticos Pedagógicos quanto as metodologias de ensino que levem em consideração que a tecnologia pode atuar como um instrumento que facilita o processo de interação entre escola e sociedade, assim como um ensino mais próximo das necessidades dos alunos e que possibilite entender melhor o conhecimento científico, retirando a ideia de que muita coisa não tem utilidade ou nenhum significado para a vida do aluno.

Como você gostaria de usar as tecnologias em suas aulas?

A partir da ideia de que recursos tecnológicos sejam ferramentas que irão auxiliar na melhoria da metodologia de ensino e, conseqüentemente, aproximando alunos e fazendo-os entender que as ciências químicas podem ser aprendidas de forma mais significativa e possibilitando a ressignificação da importância e presença desta ciência em seu cotidiano, promovendo o conhecimento científico de forma mais dinâmica e efetiva no processo de ensino-aprendizagem e em consonância com o Projeto Político Pedagógico da escola, toda e qualquer tecnologia poderá ser bem aceita e utilizada com vistas a melhorar as metodologias de ensino e fazer com que o aluno perceba que as ciências químicas estão presentes em sua vida em tudo que possa imaginar. A área de química se constitui em uma ciência de difícil compreensão em função do caráter abstrato exigido e que necessita de realizar práticas em laboratório para uma maior capacidade de aprendizagem por parte dos alunos. Diante disso, as ferramentas tecnológicas podem ser utilizadas a fim de possibilitar o aluno uma melhor compreensão e interesse em aprender química. Neste sentido, algumas ferramentas podem ser utilizadas, tais como: (i) lousa digital; (ii) tabela periódica interativa; (iii) data-show; (iv) aquisição de softwares que possibilita o aluno visualizar uma realidade virtual de um laboratório de química, sem oferecer riscos como ocorre em

laboratório; (v) documentários, filmes e links de vídeos de acesso gratuito entre tantas outras ferramentas tecnológicas. Entretanto, a falta de recursos financeiros provenientes da falta de investimento em escolas da rede pública municipal e estadual, inviabiliza a utilização destes recursos.

Alfabetização midiática e informacional

A formação de qualquer profissional é considerada uma tarefa complexa e complicada, frente às necessidades geradas pelo processo de globalização e o rápido avanço do desenvolvimento científico e tecnológico que influenciam tanto nas relações sociais quanto nas diversas necessidades geradas pela sociedade, que ocorrem em curtos espaços de tempo e que demandam maior tempo para entendimento, investigação e proposição de soluções. Nesse sentido, se faz necessário uma reflexão a cerca do complexo número de fatores que estão de forma direta ou indiretamente influenciando no processo de formação dos professores em relação à alfabetização científica, midiática e informacional (ARRUDA et al., 2018; PANIAGUA; PEREIRA, 2021; SILVA et al., 2021).

O uso de Tecnologias de Informação e Comunicação (TICs) se constitui em um conjunto de tecnologias e ferramentas digitais que podem e devem estar presentes nas metodologias de ensino consideradas modernas e inovadoras e que possam auxiliar tanto os professores, quanto os alunos com o intuito de melhorar e facilitar a comunicação entre docentes e alunos, bem como o processo de ensino-aprendizagem em qualquer área do conhecimento (ARRUDA et al., 2018), entre as quais a ciência química (SILVA et al., 2021; XAVIER; FIALHO; LIMA, 2019). Esta área do conhecimento é, historicamente, ensinada de forma abstrata e desprovida de contextualização que demonstre a aplicação de seus conhecimentos. Além disso, o processo de ensino-aprendizagem se dá, majoritariamente, pelo uso de livros didáticos que apresentam contextualização de ambientes e/ou realidades distantes do contexto no qual o aluno está inserido em seu cotidiano. A falta de proximidade com a realidade dos alunos, associado ao excesso de conceitos e conhecimentos abstratos faz com que os alunos passem a ter a ideia de que a ciência química não tem utilidade alguma e que é impossível de aprender e, conseqüentemente, levam muitos alunos a apresentarem rendimentos abaixo do esperado e estes acabam evadindo ou até mesmo desistindo de estudar (PANIAGUA; PEREIRA, 2021; SILVA et al., 2021; XAVIER; FIALHO; LIMA, 2019).

Neste contexto se faz necessário avaliar tanto as necessidades, quanto as dificuldades dos professores de química frente à adoção de TICs em suas práticas pedagógicas tradicionais. Para Paniagua e Pereira (2021), a adoção de metodologias inovadoras e que sejam capazes de atrair e fazer o aluno entender o sentido e a importância das ciências químicas esta, a principio, na formação dos cursos de licenciatura em química oferecidos pelas Instituições de Ensino Superiores (IES) tanto públicas quanto privadas. Os autores reforçam a ideia de que grande parte das IES estão de “costas” para a sociedade e que em

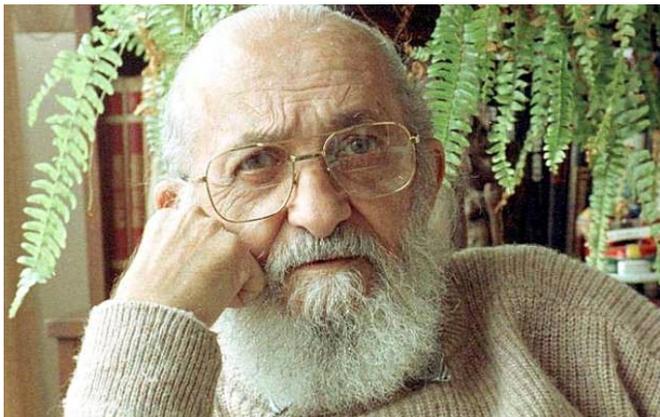
função disso, formam profissionais desconectados da realidade e do contexto social. Soma-se a isso a falta de formação e atualização dos docentes das IES que preferem manter a pedagogia tradicional, visto que a mudança e adaptação geram desconfortos dos quais não querem se sujeitar a isso. Já Silva e colaboradores (2021), apresentam resultados que demonstram que o uso de TICs articulado com a metodologia de ensino é capaz de estimular no aluno a ressignificação da importância de se aprender química e o quanto está ciência está inserida no cotidiano do aluno. Além disso, reforçam o quão importante são para os docentes a introdução de TICs como ferramentas facilitadoras no processo de ensino-aprendizagem. Estes autores apontam ainda a ausência de disciplinas na matriz curricular dos cursos de licenciatura ofertados pelas IES e que isso é um grande fator que contribui para que os docentes não tenham conhecimento suficiente para trabalhar com metodologias inovadoras, uma vez que a experiência durante a sua formação acadêmica foi praticamente nula em relação ao uso de ferramentas digitais.

Diante deste enorme problema, se faz necessário pensar em políticas públicas voltadas tanto para a capacitação de professores para aprenderem e/ou aprimorarem de forma contínua e constante o conhecimento e aplicação de TICs em suas metodologias de ensino, quanto um maior investimento por parte do poder público (municipal, estadual e federal) para incluírem a escola na era digital e midiática que a sociedade esta vivenciando nos tempos atuais. Além disso, as instituições que ofertam cursos de licenciatura necessitam revisar suas matrizes curriculares e incluir disciplinas que tragam o uso e aplicação de TICs associado a metodologias ativas e inovadoras. Neste contexto, os egressos dos cursos superiores podem atuar nas instituições de ensino com maior confiança e segurança em relação às ferramentas digitais, conduzindo os alunos a aprenderem de forma mais significativa por intermédio do uso de recursos tecnológicos que estão inseridos e disponíveis nesta era de cibercultura (GUSMÃO, 2016; SILVA; SOARES, 2018; SILVA; SOUZA, 2019). Logo, o objetivo de introduzir ferramentas digitais não é substituir o professor, mas sim sintonizar as metodologias de ensino a era digital e que seja capaz de despertar o interesse e a curiosidade no aluno para entender que todo o conhecimento científico que está a sua volta é importante para entender tanto o funcionamento do meio ambiente, quanto às interações que se estabelecem na sociedade e como a sua presença se faz importante e necessária para ser um protagonista na sociedade, começando pelo contexto no qual esta inserido e, posteriormente, disseminando este protagonismo a outros adolescentes e jovens.

ESTAÇÃO 2 - Inspiração e transformação

As ideias de Paulo Freire vão além de seu enorme legado deixado por meio de obras que são ou deveriam ser “cabeceiras” para todo e qualquer profissional que se considera um educador. Entretanto, em função de ter sido um revolucionário em relação ao fato de entender que toda educação é política e que o aprendizado se constitui a partir

de representações do cotidiano de cada indivíduo, Freire caminhava em sentido contrário as políticas públicas que necessitavam de uma educação alienadora e não libertadora. Paulo Freire foi um dos mais notórios educadores do mundo. Fato que lhe possibilitou ser o maior ganhador de título de doutor *honoris causa* em todo o mundo. Paulo Freire dizia: “ninguém ignora tudo. Ninguém sabe de tudo. Todos nós sabemos alguma coisa. Todos nós ignoramos alguma coisa. Por isso aprendemos sempre.”



Paulo Freire (1921-1997) foi um educador brasileiro que foi mais reconhecido no exterior do que em sua própria nação. Entretanto, não houve nenhum outro educador brasileiro que representasse tão bem a verdadeira face de todo professor brasileiro: simples, humilde e um idealista.

Particularmente, tenho em Paulo Freire não só um exemplo de educador a ser seguido, mas um exemplo de vida e que reflete muito do que sou e do que posso ser enquanto pessoa e profissional. Para tanto, apresento uma pequena reflexão baseada em sua obra “Pedagogia da autonomia”.

Na condição de educador na área de ciências da natureza, preciso entender que ensinar exige curiosidade e criticidade em relação aos meus próprios conhecimentos e no exercício da docência, que é a partir desta condição que entendo que meus conhecimentos precisam ser expressos e manifestados em comportamentos dentro e fora do âmbito escolar que se converte em um exemplo na qual todo e qualquer educando que passou pela minha vida enquanto educador se utilizou de exemplo a ser seguido. Diante disso, entendo que ensinar exige uma conduta ética que se espelha em uma estética no processo de ensino-aprendizagem. Nesta condição, entendo que existe a uma necessidade constante pela busca de novos conhecimentos capazes de me levar a uma reflexão e, conseqüentemente, constante reconstrução de meus próprios saberes, que ocorre por intermédio da pesquisa e que se expressa no ato de ensinar, que me permite entender que ensinar exigirá de mim a pesquisa pela qual se dará a prática do ensino. Enquanto educador em constante processo de formação e que preciso ter a mesma convicção e capacidade de estimular e provocar

em meus educandos a ideia de que podem e precisam ser sujeitos ativos que irão construir seu próprio conhecimento por intermédio de suas experiências e vivências no cotidiano em que se encontram. Logo, ensinar é mais do que meramente auxiliar no processo de ensino-aprendizagem, exige de minha condição de educador o respeito em relação aos saberes prévios dos educandos que devem ser o alicerce para se construir e reformular meus conceitos em relação as minhas práticas pedagógicas e que tenho a missão de provocar, estimular e/ou incentivar o educando a despertar sua curiosidade que se converterá em indagações, reflexões e, sobretudo, na capacidade de questionar os seus próprios conhecimentos que foram socialmente construídos e que por intermédio da associação do conhecimento científico será capaz de responder seus anseios e necessidades, provocando uma transição do conhecimento de senso comum para o científico. Este processo poderá ser bem sucedido, se eu assumir o papel de mediador que auxiliará o educando no processo de aprendizagem que se fundamenta na reflexão e persistência em aprender a entender o mundo pelo olhar da ciência, que provoca inquietações e reflexões diante realidade do educando.

ESTAÇÃO 3 - Reflexão e Desembarque

Esta disciplina juntamente com a diversidade de formação dos docentes que a ofertaram, permitiu um contato com uma grande variedade de recursos tecnológicos e suas aplicações. Apesar do pouco tempo de duração da disciplina, bem como a indisponibilidade para se dedicar e aprofundar ainda mais na busca de maior entendimento e compreensão do uso das inúmeras ferramentas tecnológicas, foi possível “enxergar” e vislumbrar que existe um leque de opções de recursos que podem ser explorados e colocados em prática como ferramentas que facilitem o processo de ensino-aprendizagem dos alunos no âmbito escolar. Entretanto, algumas ferramentas não possuem aplicabilidade e nem podem contribuir para melhorar o processo de aprendizagem dos alunos na área de química em qualquer nível (educação básica e superior). Um exemplo foi à criação da calculadora para determinar a molaridade de uma solução que, *a priori*, nem podemos estimular o aluno a fazer o uso de calculadoras para as quatro operações fundamentais da matemática e que, *a posteriori*, não faz sentido ensinar a fazer uma calculadora para ser utilizada no celular se o mesmo já a contém. Logo, esta ferramenta não teria sentido na aprendizagem de química, mas poderia ter dentro de outros contextos.

Em termos de dificuldade, a atividade mais complexa foi à elaboração da calculadora em função de não possuir conhecimentos básicos de programação, uma vez que o mesmo nunca foi objeto de estudo tanto na minha formação básica, quanto na superior até o nível de doutorado. Além disso, tive limitações em função das tecnologias (celular e notebook) que estão a minha disposição, o que trouxe bastante dificuldade para o entendimento e aplicação de tal ferramenta.

Como você percebe a relação entre recursos tecnológicos e metodologias de ensino?

A sociedade vem passando por profundas revoluções tecnológicas e a gama de conhecimentos se torna cada vez maior em relação a todas as áreas, exigindo de todos maior necessidade de obter informações em tempo real e de forma objetiva. Os tempos de ir à biblioteca física e abrir as famosas enciclopédias, símbolo do conhecimento e fonte segura de informação, perderam sua utilidade e entraram em desuso, assim como esta acontecendo com todo e qualquer material impresso, uma vez que as constantes mudanças e o aumento contínuo de informações e conhecimento nos tornaram incapazes tanto de nos mantermos informados e atualizados, quanto de saber separar e/ou filtrar informações que são ou não importantes ou verídicas. Diante disso, a ideia de que informação verídica e confiável está em materiais impressos e/ou transmitidas por pessoas especialistas em um determinado assunto caíram por terra há muito tempo, visto que qualquer informação é passível de ser checada em tempo real e em diferentes fontes.

Portanto, a ideia de que o conhecimento esta no professor e que o aluno é um receptor destes conhecimentos, precisa dar espaço a propostas de metodologias de ensino inovadoras que trazem a tecnologia tanto para o âmbito escolar quanto para as representações e experiências vivenciadas no cotidiano do aluno e que seja capaz de possibilitar ao mesmo a ressignificação daquilo que ele acredita não ter importância, valor ou utilidade em sua vida diária e que leve o aluno a ser protagonista de seu próprio aprendizado. Sendo assim, os recursos tecnológicos não podem ser vistos como substituto do professor, mas sim como ferramentas que possibilitem novas e modernas metodologias de ensino que são capazes de despertar a atenção dos alunos e levá-los a percepção de que o conhecimento é importante em todas as áreas, mesmo em uma sociedade que se tornou totalmente dependente da tecnologia para sobreviver, o professor é uma peça fundamental no processo de construção de uma ressignificação do processo de ensino-aprendizagem. Logo, este deverá buscar adequar sua metodologia as necessidades trazidas pelos alunos e a sociedades, sendo que estas estão relacionadas diretamente com o uso de recursos tecnológicos e que este se constitui na principal forma de se buscar o conhecimento para ser utilizado no cotidiano.

Como você acha ser possível superar uma pedagogia tradicional?

A pedagogia tradicional possui sua importante contribuição no processo de ensino-aprendizagem e sua existência é uma necessidade para o melhor entendimento do conhecimento científico, mas isto não significa que o processo educativo precise ocorrer somente por esta forma pedagógica. Ao contrário, existe a necessidade de associar outras formas pedagógicas de aprendizagem com o intuito de possibilitar ao aluno: *i)* ser protagonista de sua própria aprendizagem; *ii)* entender que o conhecimento não se limita ao âmbito escolar, podendo ocorrer em diferentes espaços e *iii)* que a escola é um espaço

que oferece inúmeras possibilidades para auxiliar em seu processo formativo e que pode atender suas necessidades enquanto sujeito da sociedade. Entretanto, ainda que a escola ofereça as condições para o desenvolvimento de novas práticas pedagógicas capazes de ressignificar o conceito de si mesmo, o quadro de recursos humanos que estão presentes em uma instituição de ensino, sofre da dificuldade de entender a necessidade pela busca da mudança que se faz necessária. Docentes mais experientes possuem e/ou não querem se atualizar, visto que entendem estarem suficientemente preparados para lecionar em função de acreditarem que a “transmissão” de conhecimento e a forma pela qual se faz, não há a necessidade de mudar. Logo, cabem as instituições de ensino e seus dirigentes realizarem a construção de propostas que ofereça cursos de capacitação em relação à necessidade e importância de se utilizar de práticas pedagógicas inovadoras e/ou diferentes da tradicional, sendo que o professor precisa “incorporar” a ideia da importância de mudar e/ou inovar sua prática pedagógica que remota a ideia de uma escola desvinculada da realidade e necessidade da sociedade.

REFERÊNCIAS

ARRUDA, J. S. et al. Metodologias Ativas com o uso de tecnologias digitais na formação docente. **Nuevas Ideas en Informática Educativa**, v. 14, p. 441-445, 2018.

GUSMÃO, F. A. F. Da alfabetização tradicional para a alfabetização midiática e informacional. **Revista Liberato**, v. 17, n. 28, p. 119-252, 2016.

PANIAGUA, C. E. S.; PEREIRA, M. A. F. Concepções pedagógicas e a complexidade na formação de professores de química para o exercício da docência de forma efetiva, inclusiva e contextualizada. In: ARENARE, E. C. C. **A geração de novos conhecimentos na química**, v.1, p. 79-90, 2021. <http://dx.doi.org/10.22533/at.ed.7152118067>

SILVA, B. R. F. et al., Sala de aula invertida no ensino de química orgânica: Um estudo de caso. **Química Nova**, v. 44, n. 4, p. 493-501, 2021. <http://dx.doi.org/10.21577/0100-4042.20170677>

SILVA, V. A.; SOARES, M. H. F. B. O uso das tecnologias de informação e comunicação no ensino de Química e os aspectos semióticos envolvidos na interpretação de informações acessadas via web. **Ciência e Educação**, v. 24, n. 3, p. 639-657, 2018. <https://doi.org/10.1590/1516-731320180030007>

SILVA, C. S. S.; SOUZA, D. S. O enfoque CTSA e uso de Metodologias Ativas no Ensino Superior: uma análise baseada na discussão de notícias sobre acidentes ambientais envolvendo produtos químicos. **Ensino Em Re-Vista**, v. 26, n.3, p. 919-941, 2019. <https://doi.org/10.14393/ER-v26n3a2019-144>

XAVIER, A. R.; FIALHO, L. M. F.; LIMA, V. F. Tecnologias digitais e o ensino de Química: o uso de softwares livres como ferramentas metodológicas. **Foro Educación**, v. 17, n.27, p. 289-309, 2019. <https://doi.org/10.14516/fde.617>

ANÁLISE DE VOLÁTEIS DE CAFÉ CONILON CULTIVADOS EM DIFERENTES ALTITUDES

Data de aceite: 10/01/2022

Data de submissão: 02/12/2021

Gabriel Vitoriano Braga

Universidade Federal do Espírito Santo
Alegre – ES – Brasil
<http://lattes.cnpq.br/1555689721890439>

Vanessa Moreira Osório

Universidade Federal do Espírito Santo
Alegre – ES – Brasil
<http://lattes.cnpq.br/3282723304057244>

Alice Jadjischi Bernardino

Universidade Federal do Espírito Santo
Alegre – ES – Brasil
<http://lattes.cnpq.br/5486719207417382>

Maria Isadora Pereira Lima

Universidade Federal do Espírito Santo
Alegre – ES – Brasil
<http://lattes.cnpq.br/1210660860037862>

Karla Morera Vieira

Universidade Federal de Ouro Preto
João Monlevade – MG – Brasil
<http://lattes.cnpq.br/9606841574330794>

RESUMO: O Brasil tem o Estado do Espírito Santo como líder na produção de café conilon. Esta espécie é normalmente cultivada em altitudes inferiores a 500 metros, e existem poucos estudos que tratam do seu cultivo em altitudes mais elevadas. Desse modo, o presente trabalho consistiu em caracterizar o perfil dos constituintes voláteis de café cultivados em diferentes altitudes

utilizando a técnica HS-SPME/CG-EM a fim de averiguar a influência da altitude na composição química. Os resultados revelaram a identificação de quatorze compostos nas amostras analisadas, de modo as amostras cultivadas em altitudes mais elevadas apresentarem um maior teor de compostos da classe de furanos, como furfural e 5-metilfurfural, tratando-se de compostos que apresentaram ganhos significativos para o sabor da bebida, possibilitando assim, ser uma condição favorável para obtenção de atributos desejáveis para a bebida.

PALAVRAS-CHAVE: Café conilon, cromatografia gasosa, microextração em fase sólida, altitude, qualidade.

ANALYSIS OF CONILON COFFE VOLATILES CULTIVATED AT DIFERENT ALTITUDES

ABSTRACT: Brazil has the State of Espírito Santo as the leader in the production of conilon coffe. This species is normally cultivated at apresentaltitudes below 500 meters, and there are few studies dealing with its cultivation at higher altitudes. Thus, the present work consists in characterizing the profile of volatile coffe constituents grown at different altitudes using an HS-SPME/CG-EM technique in order to investigate the influence of altitude on chemical composition. The results revealed the identification of fourteen compounds in the analyzed samples, so that the samples cultivated at higher altitudes presented a higher content of compounds of the furan class, such as furfural and 5-methylfufural, being these compounds that showed significant gains for the beverage flavor,

thus enabling it to be a favorable condition for obtaining desirable attributes for a drink.

KEYWORDS: Conilon coffe, gas chromatography, solid phase microextraction, altitude, quality.

1 | INTRODUÇÃO

O Brasil é o maior produtor cafeeiro no mundo, tendo o Estado do Espírito Santo como líder na produção da espécie *Coffea Canephora* (canfé conilon) (CONAB,2021). Desse modo, considerando o desenvolvimento das indústrias e das técnicas de cultivo, a procura por um produto de qualidade tornou-se crescente. Esta qualidade está associada ao aroma e ao sabor da bebida, que são alguns dos atributos sensoriais presente nela, e sendo influenciada por fatores pré e pós-colheita (CARVALHO; CHAGAS; SOUZA, 1997; AMSTALDEN; LEITE; MENEZES, 2011).

Para averiguar os atributos sensoriais da bebida de café realiza-se o “teste de xícara”, que consiste numa análise realizada por profissionais treinados avaliando aspectos como aroma, sabor, doçura, corpo de bebida, acidez e adstringência. Nesse sentido, estudos vêm sendo realizados com o intuito de relacionar a qualidade da bebida com a sua constituição química (TOLEDO et al., 2017).

Segundo Pinheiro (2018), alguns dos fatores que influenciam esta qualidade são o cultivo, a colheita, o local de plantio, a secagem e o armazenamento, fatores genéticos, por via úmida ou por via seca, a espécie, o tipo de torra e sua composição química. Particularmente, a altitude é um fator determinante para a qualidade final do café. A cada 100 metros que a altitude aumenta, a temperatura costuma diminuir em torno de 0,7 °C, o que permite o café de regiões mais frias apresentar uma maturação mais lenta dos frutos, contribuindo, assim, para um maior acúmulo de precursores do sabor e do aroma (VAAST et al, 2006; GEROMEL et al, 2008; STURM, 2012).

Normalmente, o café conilon é cultivado em áreas com altitudes inferiores a 5 00 metros (MATIELLO, 1991), No entanto, sabendo que altitudes superiores é uma condição favorável para a obtenção de um maior acúmulo de açúcares nos grãos (ZAIDAN et al., 2017), o que pode contribuir para o sabor da bebida, há poucos estudos que tratam do seu cultivo em altitudes mais elevadas.

A composição química do café é em grande parte influenciada pelo processo de torrefação. Trata-se de uma operação bastante complexa, envolvendo várias reações químicas de modo a converter o grão verde em torrado, tornando-o apto para a moagem e extração da bebida (SCHENKER; ROTHGEB, 2017; DEBONA et al., 2020). A reação de Mallaird, por exemplo, transforma os grãos verdes em tons marrons e de caramelização (SANTOS et al., 2020), gerando compostos voláteis que contribuem tanto para as características físico-químicas quando sensoriais do produto final (ELIAS, 2019).

Desse modo, o objetivo principal deste artigo foi caracterizar o perfil dos constituintes

voláteis de café cultivados em diferentes altitudes utilizando a técnica HS-SPME/CG-EM (microextração em fase sólida pelo modo *headspace* combinada com cromatografia gasosa acoplada à espectrometria de massas) a fim de averiguar a influência da altitude na composição química.

2 | METODOLOGIA

2.1 Obtenção das Amostras

As amostras de café conilon foram cultivadas em diferentes altitudes (na faixa de 150 a 850 metros) na região do Caparaó. Foram selecionadas 10 (dez) amostras de café conilon denominadas de C1- C10: C1 (167 m), C2 (200 m), C3 (249 m), C4 (377 m), C5 (403 m), C6 (427 m), C7 (477 m), C8 (572 m), C9 (720 m), C10 (795 m) respectivamente, sendo devidamente torradas, moídas e submetidas à extração por HS-SPME combinada com CG-EM.

2.2 Extração dos constituintes voláteis

Para o processo de extração por meio da técnica HS-SPME, foram utilizados 3 g dessas amostras sendo colocadas em vial apropriado para *headspace* (frasco de vidro de 20 mL), com tampa magnética de rosca e septo de silicone, que foi submetido a aquecimento a 70 °C por 30 (trinta) minutos. Os voláteis foram coletados por HS-SPME pela fibra DVD/CAR/PDMS (Divinilbenzeno/Carboxeno/Poldimetilsiloxano, espessura do filme de 50 µm) e injetados no cromatógrafo a gás (PINHEIRO, 2018).

2.3 Análise por cromatografia gasosa acoplada à espectrometria de massas

No cromatógrafo gasoso acoplado ao espectrômetro de massa (aparelho *Shimadzu* QP-PLUS-2010), foi utilizada uma coluna capilar de sílica fundida Rtx-5MS (30 m de comprimento e 0,25 mm de diâmetro interno), o hélio sendo usado como gás de arraste, com fluxo de 1,67 mL/min. A temperatura do do injetor foi de 250 °C e do detector de 300 °C. A temperatura inicial da coluna foi de 40 °C, sendo programada para ter acréscimos de 3 °C a cada minuto, até atingir a temperatura máxima de 125 °C na qual permaneceu por um minuto, depois a temperatura foi aumentada a 10 °C por minuto até atingir a temperatura de 245 °C, sendo mantida por 3 minutos (PINHEIRO, 2018).

Para a determinação dos constituintes químicos, comparou-se os espectros de massas obtidos com os da biblioteca do aparelho (NIST05, NIST05s, NIST12, NIST62 e WILEY7) com dados de outros trabalhos e com os índices de retenção.

Para realizar o cálculo dos índices de retenção linear (IRL), foi injetada no cromatógrafo uma mistura de alcanos lineares (C_8 a C_{23}) nas mesmas condições usadas na análise dos referidos voláteis de café (FRANCA et al., 2009; PINHEIRO, 2018).

Os índices de retenção foram calculados usando a equação 1 (VAN DEN DOOL;

$$IRL = 100 \left[\frac{n + (t_c - t_n)}{t_{n+1} - t_n} \right] \quad (\text{Equação 1})$$

onde: t_c - tempo de retenção do composto de interesse; t_{n+1} - tempo de retenção do hidrocarboneto posterior; n - n° de carbonos do hidrocarboneto anterior.

3 I RESULTADOS

Por meio da análise cromatográfica foi possível obter o perfil de constituintes voláteis presentes nas dez amostras de café cultivadas em diferentes altitudes, que está apresentado na Tabela 1, juntamente o tempo de retenção médio para os compostos encontrados, os índices de retenção linear (IRL) calculados e tabelados e a porcentagem em área (área relativa) para cada uma delas referentes aos compostos encontrados.

Desse modo, por meio da análise da composição química foram encontrados quatorze constituintes voláteis, dentre os quais o 4-etenil-2-metoxi-fenol mostrou-se como componente majoritário para nove das dez amostras analisadas, cuja área relativa variou de 9,96% a 16,94% entre elas.

T.R. [min.]	Composto	IRL cal	IRL tab	Área (%)									
				C1	C2	C3	C4	C5	C6	C7	C8	C9	C10
5,731	2-Metilpirazina	824	826	5,95	6,19	2,78	5,99	6,45	5,86	5,54	5,23	4,67	5,24
6,205	Furfural	834	830	2,50	3,57	3,53	3,61	3,52	6,93	4,99	7,14	5,20	5,71
7,627	Álcool Furfurílico	864	858	10,46	12,27	10,44	11,49	11,42	12,64	12,39	11,75	13,39	10,76
7,945	Acetato de acetol	875	862	3,33	3,07	1,90	3,04	2,93	2,95	3,42	3,98	3,99	2,95
9,650	2,5-Dimetilpirazina	913	911	2,90	2,36	1,21	2,82	3,13	4,56	2,56	1,97	2,10	2,39
9,721	2,6-Dimetilpirazina	916	912	4,15	2,21	0,20	4,00	4,41	4,57	3,98	1,57	3,09	3,49
10,001	2,3-Dimetilpirazina	922	915	1,01	0,69	0,21	0,78	0,67	0,69	0,63	0,26	0,47	0,6
12,494	5-Metilfurfural	969	962	3,41	4,60	2,91	4,77	4,59	6,60	5,57	7,42	5,78	6,22
12,883	Acetato de 2-Oxobutil	974	985	0,54	0,57	0,33	0,67	0,49	0,80	0,80	0,85	0,82	0,78
14,255	2-Etil-6-metilpirazina	1002	1003	2,61	1,15	0,53	2,34	2,38	2,55	2,06	1,31	1,16	1,81
14,463	2,3,5-Trimetilpirazina	1005	1000	1,33	0,93	0,43	1,15	1,16	1,21	0,83	0,31	0,76	0,83
24,000	1-Furfurilpirrol	1187	1166	1,63	0,96	0,79	1,75	1,46	1,42	1,41	1,58	1,23	1,27
30,468	4-etenil-2-metoxifenol	1321	1309	13,46	12,88	9,96	15,36	14,06	14,83	13,77	16,94	14,22	13,52
43,463	Cafeína	1876	1848	5,81	6,07	6,30	1,99	1,58	5,33	3,05	5,64	4,30	2,57

*TR = Tempo de retenção (min.), IRL = Índice de retenção linear, cal= calculado, tab= tabelado, (ADAMS, 2007; e site: PUBCHEM), % em Área obtida nas análises por CG-EM, usando a coluna Rtx-5MS.

Tabela 1 - Constituintes voláteis encontrados em amostras de café conilon cultivados em diferentes altitudes: C1 (167 m), C2 (200 m), C3 (249 m), C4 (377 m) e C5 (403 m), C6 (427 m), C7 (477 m), C8 (572 m), C9 (720 m) e C10 (795 m).

Fonte: Autores (2021).

4 | DISCUSSÃO

O percurso metodológico realizado possibilitou a identificação de quatorze compostos voláteis para as amostras analisadas. Grande parcela dos compostos identificados adentra-se em classes comumente encontradas em amostras de café torrado, como os furanos e as pirazinas. Uma vez que é na etapa da torra que tais voláteis são gerados, podendo ser encontrados nas seguintes classes: furanos (38-45%), pirazinas (25-30%), piridinas (3-7%) e pirróis (2-3%), além de outras (ácidos carboxílicos, aldeídos, cetonas, fenóis e outros) (NIJSSEN et al., 1996; HO; ZHENG; LI, 2015).

As amostras C7 e C10 apresentaram um perfil bastante similar para maioria dos compostos caracterizados. Os constituintes majoritários encontrados nessas amostras foram: 2-metilpirazina (sabor de nozes, chocolate e torrado), furfural (amêndoa, pão, doce), álcool furfúrico (sabor amargo e gosto de queimado), 5-metilfurfural (sabor de caramelo, castanho, doce) e 4-etenil-2-metoxifenol (sabor enfumaçado, gosto picante).

Dos quatorze compostos identificados, cerca de seis compostos pertencem à classe das pirazinas representando cerca de 42,86% do total, tendo destaque para o 2-metilpirazina; 2,5-dimetilpirazina e 2,6-dimetilpirazina. Esta classe possui como precursores os açúcares redutores e os aminoácidos, por meio de reações de autocondensação e oxidação das α -aminocetonas (oriundas da degradação de Strecker) (NURSTEN, 2005). De forma geral, esses compostos possuem atributos sensoriais que contribuem significativamente para o aroma da bebida de café (MARIA; MOREIRA; TRUGO, 1999). Além disso, o composto 2,6-dimetilpirazina apresentou um teor alto para as amostras C1, C4, C5 e C6, as quais encontram-se na faixa de 350 a 450 metros, porém, em altitudes superiores como é o caso da amostra C8, tende-se uma redução na sua área percentual.

Para as amostras C4 e C8, cultivadas, respectivamente, entre 350 a 450 metros e 700 e 750 metros houve uma redução da área relativa de grande parte dos compostos da classe pirazinas, como 2,6- dimetilpirazina; 2,3-dimetilpirazina; 2-etil-6-metilpirazina, e 2,3,5-trimetilpirazina. Embora tenha ocorrido de maneira similar para outros compostos como acetato de acetol, acetato de 2-oxobutil e 1-furfuril- pirrol para a amostra C4, tal comportamento não foi observado para a amostra C8. Possivelmente, isso pode estar associado a problemas quanto ao manejo de cultivo para tais amostras.

O composto 4-etenil-2-metoxifenol foi o único identificado, para o presente trabalho, como sendo pertencente à classe de fenóis, correspondendo a 7,41% do total, tratando-se do composto majoritário de nove amostras analisadas. Ele é formado pela degradação de compostos fenólicos durante o processo de torra, e diante do seu alto teor em todas as amostras, pode se tratar de um composto bastante característico da espécie *coffea canephora*. Desse modo, à medida que o grau de torra do café aumenta, tende-se a aumentar também o teor desse composto (CZERN; GROSH, 2000).

Os furanos representaram 17,65% do total de compostos identificados, contribuindo

para a qualidade superior do café, uma vez que seus compostos são responsáveis por um sabor doce, frutal, nozes ou de caramelo (FLAMENT, 2002). Particularmente, o composto furfural apresentou um teor relativamente alto de 6,93% para a amostra C6 (faixa de 400 a 450 metros). Em altitudes superiores, como é o caso da amostra C8 houve um aumento significativo no seu teor ao comparar com a amostra C7, obtendo um aumento de mais de 2%, correspondendo a 7,14%. Esse aumento no teor do furfural pode estar relacionado a mudanças no aroma dos alimentos (LO COCO et al., 1996), que procederam de algumas reações da torra, como da reação de Maillard ou de caramelização, determinando o aroma característico de cereal no café torrado.

O mesmo ocorre de forma similar para o composto 5-metilfurfural, cujo aumento em relação a amostra C7 foi de quase 2%. Isso mostra que a condição de altitudes superiores pode contribuir para a qualidade do café. No entanto, em faixa acima 700 metros, houve redução no seu teor percentual, demonstrando que altitudes mais altas que nesta faixa podem desfavorecer tais atributos para a bebida.

O álcool furfurílico mostrou-se com um teor consideravelmente alto para todas as amostras de café analisadas. Para a amostra C8, por exemplo, seu teor foi o maior de todos comparado às outras, sob condição de altitude alta, na faixa de 700 a 750 metros, embora sua área percentual tenha reduzido sob altitude acima da mesma. Ele apresenta alto impacto para o aroma de cafés submetidos a torrefação drástica, podendo estar associado ao amargor e ao odor de queimado (MARIA; MOREIRA; TRUGO, 1999). Portanto, em altitudes superiores como é o caso da amostra C8, percebeu-se uma maior presença dos compostos furfural e 5-metilfurfural em relação às outras amostras, de modo a ser uma condição favorável para a obtenção de cafés de qualidade.

5 | CONCLUSÃO

O presente estudo possibilitou a identificação de quatorze compostos, sendo as pirazinas e furanos as principais classes nas quais os compostos pertencem, representando 42,86% e 17,65%, respectivamente, percebendo a abundância das mesmas em café conilon.

O composto 4-etenil-2-metoxifenol foi majoritário para quase todas as amostras independente da altitude, cuja área variou de 9,96% a 16,94%, mostrando-se um composto bastante presente no café.

Além disso, as amostras C8(720 m) e C10 (795 m), cultivadas em altitudes mais elevadas, apresentaram uma maior presença de compostos da classe de furanos, como furfural e 5-metilfurfural, mostrando ganhos consideráveis para o sabor, e contribuindo, assim, com atributos considerados desejáveis à bebida.

REFERÊNCIAS

ADAMS, R. P. **Identification of Essential Oil Components by Gas Chromatography/Mass Spectrometry**. 4ª ed. Allured Publishing Corporation, Carol Stream: Illinois, USA, 2007, 804 p.

AMSTALDEN, L. C.; LEITE, F.; MENEZES, H. C. Identificação e quantificação de voláteis de café através de cromatografia gasosa de alta resolução/espectrometria de massas empregando um amostrador automático de "headspace". **Food Science and Technology**, v. 21, p. 123-128, 2001.

CARVALHO, V. D.; CHAGAS, S.J.R.; SOUZA, S.M.C. Fatores que afetam a qualidade do café **EPAMIG - Informe Agropecuário**. v. 18, n. 187, p. 5-20, 1997.

CZERNY, M.; GROSCHE, W. Potent Odorants of Raw Arabica Coffee. Their Changes during Roasting **Journal of Agricultural and Food Chemistry**, v. 48, n.3, p. 868-872, 2000.

CONAB - COMPANHIA NACIONAL DE ABASTECIMENTO. Acompanhamento da Safra Brasileira de Café, Brasília, DF, v. 8, safra 2021, n. 1, primeiro levantamento, jan. 2021. Disponível em: <https://www.conab.gov.br/info-agro/safras/cafe>. Acesso em: 11 jul. 2021.

DEBONA, D. G.; PINHEIRO, P. F.; PINHEIRO, C. A.; GOMES, W. S.; ABREU, R. O.; MORELI, A. P.; SIQUEIRA, E. A.; PEREIRA, L. L. Avaliação da composição química de café arábica submetido a diferentes perfis de torra. **Revista Ifes Ciência**. v. 6, n. 3, p. 124-133, 2020.

ELIAS, A. M. T. **Perfil físico-químico de Blends de variedades de café em diferentes condições do processo de torrefação**. Garanhuns, 2019. 78 f. Trabalho de Conclusão de Curso (Bacharelado em Engenharia de Alimentos), Universidade Federal Rural de Pernambuco.

FLAMENT, I. **Coffee Flavor Chemistry**. New York: John Wiley and Sons, Ltd., 2002.

FRANCA, A. S. et al. A preliminary evaluation of the effect of processing temperature on coffee roasting degree assessment. **Journal of Food Engineering**, v. 92, n. 3, p.345-352, 2009.

GEROMEL, C.; FERREIRA, L. P.; DAVRIEUX, F.; GUYOT, B.; RIBEYRE, F.; SCHOLZ, M. B. S.; PEREIRA, L. F. P.; VAAST P.; POT, D.; LEROY, T.; FILHO, A. A.; VIEIRA, L. G. E.; MAZZAFERA, P.; MARRACCINI, P. Effects of shade on the development and sugar metabolism of coffee (*Coffea arabica* L.) fruits. **Plant Physiology and Biochemistry**, v. 46, n. 5-6, p. 569-579, 2008.

HO, C.-T.; ZHENG, X.; LI, S. Tea aroma formation. **Food Science and Human Wellnes**, v. 1, p. 9-27, 2015.

LO COCO, F.; VALENTINI, C.; NOVELLI, V.; CECCON, L. High-performance liquid chromatographic determination of 2-furaldehyde and 5-hydroxymethyl-2- furaldehyde in honey. **Journal of Chromatography**, Amsterdam, v. 749, n. 1-2, p. 95-102, 1996.

LO COCO, F.; VALENTINI, C.; NOVELLI, V.; CECCON, L. High-performance liquid chromatographic determination of 2-furaldehyde and 5-hydroxymethyl-2- furaldehyde in honey. **Journal of Chromatography**, Amsterdam, v. 749, n. 1-2, p. 95-102, 1996.

MARIA, C. A. B.; MOREIRA, R. F. A.; TRUGO, L. C. Voláteis componentes in roasted coffee. Part I: heterocyclic compounds. **Química Nova**, 1999.

MATIELLO, J. B. **Clima e solos para o cafeeiro**. In: O café: do cultivo ao consumo. São Paulo: Globo, Cap.2, p. 26-39, 1991.

NIJSSEN, L. M., VISSCHER, C. A., MAARSE, H., WILLEMSSENS, L. C.; BOELEN, M. H. **Volatile Compounds in Food. Qualitative and Quantitative**. Data, 7th edn, pp. 72. 1-72.23. TNO Nutrition and Food Research Institute, Zeist, The Netherlands, 1996.

NURSTEN, H. E. The Maillard reaction [electronic resource]: chemistry, biochemistry, and implications. Cambridge, UK : **Royal Society of Chemistry**, 2005, 214 p.

PINHEIRO, C. A. **Análises Físico-químicas e Avaliação da Qualidade de *Coffea canephora* Pierre & Froener Cultivados no Espírito Santo**. Alegre, 2018. 108 f. Dissertação (Magister Scientiae em Agroquímica), Universidade Federal do Espírito Santo.

PUBCHEM. **Kovats**. Disponível em: <https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov>. Acesso em: 13 jul. 2021.

SANTOS, W. W. V.; ELIAS, A. M. T.; DONATO, M. V. L. C.; MEDEIROS, A. L. T.; BARROS, D. N.; SILVA, M. E. D.; SILVA, S. P. Influência das condições de torra e do processo extrativo em blends de café. **Brasilian Journal Development**, Curitiba, v. 6, n. 5, p. 25079-25092, mai. 2020.

SCHENKER, S.; ROTHGEB, T. The Roast-Creating the Beans' Signature. In: **The craft and science of coffee**. Academic Press, 2017. p. 245-271.

STURM, G. M. **Qualidade física e sensorial de *Coffea canephora* L. relacionadas à altitude, estágio de maturação e preparo pós-colheita**. Alegre, 2012. 83 f. Dissertação (Mestrado em Produção Vegetal), Universidade Federal do Espírito Santo.

TOLEDO, P. R. A. B. et al. Discriminant analysis for unveiling the origin of roasted coffee samples: A tool for quality control of coffee related products. **Food Control**, v. 73, p. 164-174, 2017.

VAAST, P.; BERTRANS, B.; PERRIOT, J. J.; GUYOT, B.; GENARD, M. Fuit thinning and shade improve bean characteristics and beverage quality of coffee (*Coffea arabica* L.) under optimal conditions. **Journal of the Science of Food and Agriculture**, v. 2, n. 86, p. 197-24, 2006.

VAN DEN DOOL, H.; KRATZ, P. D. A generalization of the retention index system including linear temperature programmed gas—liquid partition chromatography. **Journal of Chromatography A**, v. 11, p. 463-471, 1963.

ZAIDAN, U.R.; CORRÊA, P.C.; FERREIRA, W.P.M.; CECON, P.R. Ambiente e variedades influenciam a qualidade de cafés das Matas de Minas. **Coffee Science**, v.12, n.2, p.93-100, 2017.

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

Data de aceite: 10/01/2022

Data de submissão: 06/08/2021

André Luiz Canan

Universidade Federal do Paraná, Setor Palotina, Tecnólogo em Biocombustíveis Palotina-PR
<http://lattes.cnpq.br/6970716918785329>

Aline Bavaresco dos Santos

Universidade Federal do Paraná, Setor Palotina, Departamento de Engenharias e Exatas Palotina-PR
<http://lattes.cnpq.br/1098847351310417>

Maiara Aguiar

Universidade Federal do Paraná, Setor Palotina, Departamento de Engenharias e Exatas Palotina-PR
<http://lattes.cnpq.br/9638619324371224>

Alexandre Leseur dos Santos

Universidade Federal do Paraná, Setor Palotina, Departamento de Zootecnia Palotina-PR
<http://lattes.cnpq.br/4189188711900735>

Adriana Ferla de Oliveira

Universidade Federal do Paraná, Setor Palotina, Departamento de Engenharias e Exatas, PPGB - Pós-Graduação em Bioenergia Palotina-PR
<http://lattes.cnpq.br/8320953119053085>

RESUMO: Por conta do aumento da demanda energética mundial e das questões ambientais, sociais e econômicas envolvendo os combustíveis fósseis, tem-se a necessidade de diversificar a matriz energética mundial, principalmente através de fontes alternativas renováveis. A biomassa, apresenta grande potencial para suprir estas demandas. As florestas energéticas surgem como fontes alternativas de biomassa com grande potencial produtivo. O gênero *Eucalyptus* apresenta elevada taxa de produção de biomassa além, de ser um cultivo consolidado tecnologicamente no Brasil. Objetivou-se nesse trabalho avaliar as características físico-químicas da biomassa torrificada da madeira de *Eucalyptus grandis* Hill *Ex-Maiden* com 13 anos de idade. Os processos de torrefação apresentaram duas taxas de aquecimento, $1,5\text{ }^{\circ}\text{C min}^{-1}$ e $3\text{ }^{\circ}\text{C min}^{-1}$, com temperatura final de $250\text{ }^{\circ}\text{C}$, temperatura mantida por 1 hora. Foram determinados os rendimentos gravimétrico da biomassa torrificada e para todas as amostras foram quantificados os teores de carbono fixo, voláteis e cinzas, densidade básica e poder calorífico superior. As biomassas torrificadas apresentaram melhores qualidades em relação biomassa *in natura*, principalmente no conteúdo energético, através do incremento do teor de carbono fixo, como também através da diminuição da umidade. As taxas de aquecimentos apresentaram diferenças significativa para o poder calorífico superior.

PALAVRAS-CHAVE: Energia, Biomassa, Biocombustíveis, Pirólise, Torrefação.

ABSTRACT: *Physical-chemical characterization of the torrefied biomass of Eucalyptus grandis Hill*

Ex-Maiden submitted to two variable heating rates. On account of the increase in world energy demand and the environmental, social and economic issues surrounding fossil fuels, there is a need to diversify world energy matrix, primarily through alternative sources renewable. Biomass has great potential to supply these demands. Energy forests emerge as alternative sources of biomass with great productive potential. The genus *Eucalyptus* high production rate of biomass in addition to be a consolidated cultivation technology in Brazil. The objective of this school work is to evaluate the physic-chemical characteristics of biomass wood roasting on huge pans of *Eucalyptus grandis* Hill ex-Maiden with 13 years of age. The processes of roasting presented two rates of heating, $1.5\text{ }^{\circ}\text{C min}^{-1}$ and $3\text{ }^{\circ}\text{C min}^{-1}$, with final temperature of $250\text{ }^{\circ}\text{C}$, temperature maintained by 1 hour. Were determined the gravimetric biomass yields roasted, and for all the samples were quantified the levels of fixed carbon, volatile and ash, basic density and higher calorific value. The roasted biomass presented best qualities about fresh biomass, mainly in energy content, through the increase of the fixed carbon content, but also by decreasing humidity. Heating rates showed significant difference to the superior calorific value.

KEYWORDS: Energy, Biomass, biofuels, Pirolisy, Roasting.

1 | INTRODUÇÃO

A biomassa é uma fonte sustentável que possui alto potencial energético. De acordo com Rocha, Almeida e Cruz (2017) “As biomassas vegetais compreendem toda a matéria orgânica vegetal que pode ser convertida em energia”.

Entre os diversos tipos de biomassa, destaca-se a biomassa Florestal. A biomassa florestal pode ser dividida em três grandes grupos sendo, oriundos de florestas plantadas para fins energéticos, advindos da colheita florestal, como galhos, tocos, raízes e folhas, e também oriundos dos resíduos gerados no processamento da madeira (SPANHOL *et al.*, 2015).

Para utilização da biomassa como fonte de energia, é muito importante, o conhecimento das características da mesma, pois influenciam diretamente no seu poder calorífico. As características que devem ser levadas em consideração são: teor de umidade, composição imediata (umidade, carbono fixo, material volátil e cinzas), densidade, composição química elementar (carbono, hidrogênio e oxigênio) e macromolecular (celulose, hemicelulose, lignina e extrativos) (VALE *et al.*, 2011).

A biomassa *in natura* apresenta características indesejáveis como alto teor de umidade, baixa densidade energética, dificuldade de moagem, degradação biológica e alteração de propriedades físico-químicas durante o armazenamento que limitam sua ampla utilização na indústria, e a baixa densidade básica dificultando o transporte. Para melhorar as características do material e torna-los combustível, são utilizadas algumas rotas de conversão que segundo Vieira *et al.* (2014), as principais são a combustão, a pirólise e a gaseificação.

Dentro dos processos de pirólise, tem-se o processo de torrefação em que esta,

vem com o intuito de trazer melhorias nas características da biomassa in natura, com os principais objetivos de eliminar o oxigênio sob forma de gases de baixo valor calórico, como dióxido de carbono, água e alguns ácidos orgânicos (CARNEIRO JUNIOR; TORRES; ALVES, 2014).

A torrefação é um processo termoquímico onde a biomassa é processada em atmosfera inerte como a de nitrogênio, com ausência parcial ou total de oxigênio, a temperaturas consideravelmente baixas, entre 200 - 300 °C. O aquecimento, acarreta em uma mudança na estrutura química alterando propriedades da biomassa. No processo são quebradas ligações químicas das matérias orgânicas dos constituintes, como a celulose, hemicelulose e lignina (TOSCANO *et al.*, 2015). Componentes voláteis reativos de baixo peso molecular são liberados em forma de gases condensáveis e não condensáveis o que resulta em um produto sólido de coloração marrom (PHANPHANICH; MANI, 2011).

A porção sólida apresenta elevadas quantidades de carbono fixo, alto poder calorífico e baixo teor de umidade em comparação a biomassa, sendo esta porção chamada de biomassa torrificada (TRAN *et al.*, 2013).

O objetivo do trabalho foi avaliar estatisticamente as características da biomassa de *Eucalyptus grandis* Hill ex-Maiden in natura e dos tratamentos térmicos, diante dos parâmetros físico-químicos.

2 | MATERIAIS E MÉTODOS

O material utilizado para torrefação foi coletado em um reflorestamento de *Eucalyptus grandis* Hill ex-Maiden com 13 anos de idade, pertencentes a uma empresa localizada no município de Palotina, no extremo-oeste do estado do Paraná. O município possui as seguintes coordenadas geográficas: latitude de 24°17'02"S, longitude de 53°50'24" W e altitude de 333 m (GEOGRAFOS, 2015).

Foram coletadas ao acaso 16 árvores amostras para a realização do estudo. Destas, foram cortados discos de 5 cm na altura do DAP (Diâmetro da altura do peito - 1,30 m). Dos discos, para o processo de torrefação, foram cortadas cunhas opostas e para as análises físico-químicas foi utilizado o restante.

O processo de torrefação seguiu-se conforme o método proposto por Protásio *et al.* (2012), onde o material foi conduzido a um forno elétrico tipo Mufla de marca GP CIENTÍFICA (GP-2000C-MRP) a uma temperatura inicial de 25 °C e final de 250 °C com tempo de residência de 60 min, sendo utilizadas para tais, duas taxas variáveis de aquecimentos, sendo o tratamento térmico 1 (T1) de 1,5 °C min⁻¹ e o tratamento 2 (T2) de 3 °C min⁻¹ em atmosfera ambiente. A temperatura final do processo, foi estabelecida em 250 °C, uma média, vista que o processo de torrefação se dá entre 200 e 300 °C.

A análise química imediata foi realizada conforme os métodos da norma internacional ASTM D-3.172 até D-3.175 (ASTM, 2007) de carvões e madeiras de alta densidade e da

Norma Brasileira NBR: 8112 (ABNT, 1986) para carvão vegetal. Os dois métodos foram aplicados para todas as amostras.

A determinação do rendimento gravimétrico do processo de torrefação, foi calculado através da equação proposta por Protásio *et al.* (2012), que leva em consideração a massa pré e pós processada termicamente.

O poder calorífico superior (PCS) foi determinado utilizando uma bomba calorimétrica de marca IKA system modelo C200®, conforme o método da norma brasileira ABNT NBR 8633 para carvão vegetal (ABNT,1984). A densidade básica foi determinada pela norma americana ASTM D2395 – 14 (ASTM,1995). Foi possível assim, calcular a densidade energética, levando em consideração a densidade básica e o poder calorífico superior, através da equação proposta por Protásio *et al.* (2015).

Os dados foram submetidos a análise estatística de variância (ANOVA), utilizando o teste de Tukey com nível de significância de 5%.

3 | RESULTADOS E DISCUSSÕES

O processo de torrefação com taxa de aquecimento de 3,0 °C min⁻¹ foi realizado em 135 min, sendo 75 min mais rápido que o processo com 1,5 °C min⁻¹, com duração de 210 minutos.

Nas tabelas 1 e 2, são apresentados conforme as normas utilizadas ABNT e ASTM respectivamente, os valores médios da análise química imediata (teor de carbono fixo (CFx), teor de materiais voláteis (MV) e teor de cinzas (Cz), obtidos para cada um dos tratamentos, sendo, a biomassa *in natura* (T0), o tratamento térmico de 1,5 °C min⁻¹ (T1) e o tratamento térmico de 3 °C min⁻¹ (T2).

TRAT.	CFx (%)	MV (%)	Cz (%)
T0	18,3 b	81,5 b	0,13 a
T1	46,9 a	52,8 a	0,26 b
T2	52,6 a	47,1 a	0,28 b

Médias seguidas da mesma letra não diferem estatisticamente pelo teste de Tukey, com significância de 5% ($p < 0,05$).

Tabela 1. Resultados da análise química imediata pelo método ABNT: NBR 8112.

TRAT.	CFx (%)	MV (%)	Cz (%)
T0	13,8 b	86,0 b	0,17 a
T1	46,6 a	53,2 a	0,18 ab
T2	50,5 a	49,2 a	0,27 b

Médias seguidas da mesma letra não diferem estatisticamente pelo teste de Tukey, com significância de 5% ($p < 0,05$).

Tabela 2. Resultados da análise química imediata pelo método ASTM D-3.172 até D-3.175.

Verifica-se que a biomassa com tratamento térmico, apresentou diferença significativa para todos os teores analisados em relação a biomassa in natura, não diferenciando estatisticamente entre os tratamentos.

Podemos verificar que houve maior concentração de carbono fixo e menor de voláteis na biomassa tratada termicamente, características que são favoráveis ao incremento energético da biomassa. Altos teores de carbono fixo fazem com que os combustíveis queimem mais lentamente, resultando em longo tempo de combustão.

Os resultados apresentam em média um acréscimo de carbono fixo na biomassa in natura de 30,75% pelo tratamento 1 e 35,45% de acréscimo pelo tratamento 2, este último mais vantajoso pois representa um maior poder calorífico.

Simetti (2015), determinou para *Eucalyptus grandis* de 18 anos de idade, teor de carbono fixo de 15,38%. Santos (2012), obteve teores de carbono fixo de 24,1%, 28,2% e 28,3%, 44,9%, para biomassa de *Eucalyptus grandis* torrefeita em atmosfera de N₂, com temperaturas finais de 250 °C e 280 °C e com tempos de residência de 0,5 e 2,0 horas respectivamente, já Silva, Barrichelo e Brito, (1986), determinaram um teor de carbono fixo de 69,24% para carvão vegetal de *Eucalyptus grandis*, produzido com uma taxa de aquecimento de 1,66 °C min⁻¹ e temperatura final de 300 °C.

Os valores médios para carbono fixo determinados neste trabalho foram condizentes com os dados apresentados na literatura para biomassa in natura e também para a biomassa torrefeita. Os valores obtidos para ambos os tratamentos foram elevados, fator positivo pelo aumento do teor de carbono e conseqüentemente aumento do poder calorífico superior. O processo de torrefação aplicado não foi realizado em atmosfera de N₂, havendo assim contato com oxigênio. Esta condição explica, o maior teor de carbono fixo, uma vez que houve maior degradação dos constituintes, concentrando mais carbono. Quando comparado com o carvão vegetal, os valores foram inferiores, uma vez que processos de carbonização são conduzidos a temperaturas superiores.

Os materiais voláteis presentes na biomassa, facilitam a ignição e queima da biomassa, porém em geral afeta o processo de combustão, pois é de difícil controle (MENEZES, 2013) e volatilizam-se rapidamente na combustão da biomassa, diminuindo o tempo de residência do combustível no equipamento de combustão, contribuindo para uma baixa eficiência energética (CHAVES *et al.*, 2015).

Na tabela 3, são apresentados os resultados obtidos para a gravimetria (GRAV.) ou rendimento gravimétrico, poder calorífico superior (PCS), densidade básica (DENS.) e densidade energética (DENS. ENERG.).

TRAT.	GRAV. (%)	PCS (MJ Kg ⁻¹)	DENS. (Kg m ⁻³)	DENS. ENERG. (GJ m ⁻³)
T0	---	19,4 c	433,7 a	8,4 b
T1	55,4 a	25,2 b	416,4 a	10,4 a
T2	48,2 b	26,2 a	384,4 a	10,1 a

Médias seguidas da mesma letra não diferem estatisticamente pelo teste de Tukey, com significância de 5% ($p < 0,05$).

Tabela 3. Resultados dos parâmetros físicos analisados.

Em relação a biomassa in natura, houve um decréscimo no teor de voláteis de 31,29% pelo tratamento 1 e 35,61% pelo tratamento 2, resultados estes esperados, pois os valores foram inversamente proporcionais com os teores de carbono fixo. O decréscimo de massa de voláteis verificada é vantajosa, pois assim ocasiona na concentração de carbono fixo através da eliminação voláteis que afetam negativamente o conteúdo energético da biomassa.

Pode-se verificar na literatura que os resultados foram condizentes um vez que os teores de voláteis também apresentaram valores inversamente proporcionais ao teor de carbono fixo. Simetti (2015) obteve o teor de voláteis de 84,29% para *Eucalyptus grandis* com 18 anos. Santos, (2012) obteve teor de voláteis de 75,1 e 71,1% para tempo de residência de 0,5 e 2,0 horas a temperatura final de 250 °C. Para a carbonização proposta por Silva, Barrichelo e Brito, (1986) o valor de voláteis obtido foi de 30,17%.

Houve perda de massa volátil de compostos de baixo peso molecular, porém como o esperado, a biomassa torrificada ainda apresentou um teor de voláteis elevado.

De acordo com Protásio *et al.*, (2012) a análise do teor de cinzas é imprescindível na avaliação energética pois, os minerais mesmo não sofrendo o processo de combustão, são contabilizados e conseqüentemente diminuem o valor calórico. Deste modo, altos teores de cinzas acarretam uma redução no poder calorífico. Além disso, aumenta a corrosão dos equipamentos de conversão termoquímica.

Os valores médios de cinzas não diferiram nos tratamentos 1 e 2 para ambos os métodos utilizados, já os tratamentos T2 de ambos os métodos além do T1 pela norma ABNT diferiram da biomassa in natura, sendo que o T1 da norma ASTM não diferiu estatisticamente da biomassa *in natura*, isto podendo ser explicado por algumas diferenças das metodologias. Pode-se verificar que após o processo de torrefação houve um aumento do teor de cinzas nos tratamentos T1 e T2. Mesmo assim, os valores apresentados foram baixos, fato que torna o combustível favorável a um maior poder calorífico, quando em comparação com outros combustíveis que apresentam elevados teores de cinzas. O aumento do teor de cinzas pode ser explicado pelo fato de que, na torrefação ocorre a perda de voláteis de baixo peso molecular e os componentes inorgânicos não volatilizam, permanecendo no produto sólido final, ocorrendo assim sua concentração.

Para clones de *Eucalyptus grandis* com 18 anos, Simetti (2015), obteve um teor de cinzas de 0,20%. Já para o material torreficado de *Eucalyptus grandis*, Santos, (2012), obteve 0,30%.

Os resultados foram condizentes para o teor de cinzas em ambos os casos, apresentando baixos valores que são interessantes do ponto de vista energético. Os valores mais baixos dos teores de cinzas deste trabalho, podem ser justificados pela retirada das cascas da madeira antes do processo.

O rendimento gravimétrico apresentou resultados satisfatórios para ambos os tratamentos T1 e T2, estes permanecendo maiores do que se comparado aos de processos de carbonização.

Os resultados diferiram-se estatisticamente, sendo que o T1 apresentou maior rendimento 55,4%, ou em comparação com o tratamento 2, este apresentou um rendimento gravimétrico 13% maior. Isso significa que o T1 obteve maior quantidade de biomassa torreficada em relação ao T2, por conta da menor perda de massa. Um rendimento gravimétrico maior é melhor, pois tem-se mais produto final, porém deve serem levados em consideração as características físico-químicas do produto.

Comparando com dados da literatura, Felli *et al.*, (2005), obtiveram rendimentos gravimétricos de 65% e 60% para briquetes torrefeitos com tempos de residência de 1 hora e 1,5 horas respectivamente. Santos, *et al.*, (2011) obtiveram rendimentos de 28,27% a 36,76% realizando processos de carbonização com taxa de aquecimento média de 1,07 °C/min até 450 °C por 2,5 horas de residência, para híbridos de *Eucalyptus urograndis* e *Eucalyptus urocam* com 7 anos de idade. Os resultados foram condizentes, pois no primeiro caso os autores não analisaram as taxas de aquecimentos e somente o tempo de residência na temperatura final e no segundo caso, o baixo rendimento gravimétrico obtido no trabalho de Santos, *et al.*, (2011), foi devido à alta degradação ocorrida pelas temperaturas elevadas e ao maior tempo de processo de carbonização.

A análise do poder calorífico determinou que houve diferença significativa entre os tratamentos. O PCS resultante para T0 (19,4 MJ Kg⁻¹) é inferior em 23% quando comparado com T1 (25,2 MJ Kg⁻¹), e inferior 26% quando comparado com T2 (26,2 MJ Kg⁻¹) respectivamente.

Nos resultados obtidos para o poder calorífico superior, pode ser notado um acréscimo do valor energético da biomassa, sendo que o T2 se apresentou mais vantajoso, pois apresentou maior incremento da concentração de carbono fixo e manteve o teor de cinzas baixo, fatores os quais representaram em uma maior quantidade de energia por massa.

Simetti, (2015), encontrou o valor de 19,64 MJ Kg⁻¹ para *Eucalyptus grandis* com 18 anos, Santos, (2012) encontrou para *Eucalyptus grandis* com 7 anos 19,42 MJ Kg⁻¹. Arias *et al.*, (2008); obtive valores de 22,77 MJ Kg⁻¹ para poder calorífico superior de biomassa torrefeita em processo realizado em atmosfera de N₂. Santos, *et al.*, (2011), obtiveram para

carvão vegetal de *Eucalyptus* valores de 34,35 MJ Kg⁻¹ a 35,63 MJ Kg⁻¹.

Os resultados foram condizentes quando comparados com a literatura. A diferença dos valores de poder calorífico para as biomassas torrificadas observadas com a literatura, mostram certamente a influência da presença de oxigênio no processo, acarretando maior degradação e assim, maior concentração de carbono fixo e menor de voláteis, aumentando este valor. Os resultados relatados por Santos, *et al.*, (2011), apresentaram valores de PCS bem superiores para carvão vegetal em relação a biomassa torrefeita, fato ocorrido devido as altas temperaturas utilizadas no processo de carbonização que foram de 450 °C.

A densidade básica apresentou-se entre 384,4 Kg m⁻³ e 416,4 Kg m⁻³ para a biomassa torrificada nos tratamentos 2 e 1 respectivamente e 433,70 Kg m⁻³ sem tratamento térmico, os quais não diferiram estatisticamente. Dentre os tratamentos o que apresentou maior densidade foi o tratamento 1 com 416,30 Kg m⁻³. A biomassa sem tratamento apresentou densidade mais elevada, 433,70 Kg m⁻³, em comparação com a biomassa tratada.

Já a densidade energética, apresentou melhores resultados para os tratamentos T1 e T2 em relação a T0, o que representa maior capacidade calorífica por volume para estes tratamentos.

Os valores da densidade básica obtidos para os tratamentos são baixos devido à baixa densidade da madeira e também pelas características dos produtos resultantes dos processos termoquímicos

Segundo Trevisan (2008), a densidade pode ser influenciada por fatores ambientais, genéticos e pela idade.

Trevisan (2008), encontrou densidade de 437 Kg m⁻³ para *Eucalyptus grandis* com 14 anos. Para biomassa torrificada a temperatura máxima de 250°C, Rodrigues, (2009) verificou um valor de 790 Kg m⁻³, para de *Eucalyptus Grandis* com 31 anos que apresentava densidade básica in natura de 850 Kg m⁻³, ou seja, o processo de torrefação acarretou em uma diminuição da densidade básica de 7,06%. Com isso, os resultados obtidos para os tratamentos T1 (416 Kg m⁻³) e T2 (384 Kg m⁻³) que apresentaram respectivamente uma diminuição de 4,14% e 11,52%, foram condizentes com os resultados encontrados na literatura.

Quanto a comparação estatística, dos resultados obtidos pelas análises pelas normas brasileira ABNT e a norte americana ASTM, são apresentadas na tabela 4.

TRAT.	VARIÁVEL	NORMA	
		ABNT	ASTM
T0	CFx (%)	18,3 a	13,8 b
	Cz (%)	0,13 a	0,17 b
	MV (%)	81,5 a	86,0 b
T1	CFx (%)	46,9 a	46,6 a
	Cz (%)	0,26 b	0,18 a
	MV (%)	52,8 a	53,2 a
T2	CFx (%)	52,6 a	50,5 a
	Cz (%)	0,28 a	0,27 a
	MV (%)	47,1 a	49,2 a

Legenda: Médias seguidas da mesma letra na linha não diferem estatisticamente pelo teste de Tukey, com significância de 5% ($p < 0,05$).

Tabela 4. Comparação dos parâmetros entre as metodologias utilizadas.

Para o teor de CFx verificou-se diferença significativa somente no T0 entre as normas, com maior valor de 18,3% para a ABNT. Para o teor de Cz houve diferença significativa para os tratamentos T0 e T1 entre as normas e para MV houve diferença significativa somente no T0 com os maiores teores observados para a norma ASTM. As diferenças verificadas em relação aos resultados dos teores em relação as normas se dá em função da diferença de ambas metodologias.

4 | CONCLUSÃO

As análises realizadas permitem concluir que:

A biomassa torrefeita apresentou maior característica energética do que a *in natura* em função do incremento de carbono fixo e diminuição do teor de voláteis características que acarretaram no aumento do poder calorífico.

O tratamento que apresentou os melhores resultados foi o tratamento 2, que consistia na taxa de aquecimento de $3,0 \text{ }^\circ\text{C min}^{-1}$ até $250 \text{ }^\circ\text{C}$ por 1 hora. Este tratamento apresentou uma maior concentração de carbono fixo e maior valor energético agregado, em um menor tempo de processo do que em comparação ao T1, pelo qual consistia em uma taxa de aquecimento de $1,5 \text{ }^\circ\text{C min}^{-1}$ até $250 \text{ }^\circ\text{C}$ por 1 hora apresentando resultados inferiores. Tem-se então, o T2 como um tratamento termoquímico mais rápido, acarretando em um menor gasto energético de processo, sendo o mais viável economicamente.

Já para as normas de análise química imediata comparadas no trabalho, pôde-se verificar algumas diferenças significativas, as quais foram em função das próprias metodologias.

A torrefação da biomassa é um mecanismo de acréscimo energético, que pode ser melhor adequado e aprimorado, afim da obtenção de resultados satisfatórios para a indústria.

REFERÊNCIAS

ABNT – Associação Brasileira de Normas Técnicas. **NBR 8633** - Carvão vegetal –Determinação do poder calorífico. Rio de Janeiro. 1984.

ABNT – Associação Brasileira de Normas Técnicas. **NBR 8112** - Carvão vegetal -Análise imediata. Rio de Janeiro. 1986.

ARIAS, B.; PEVIDA, C.; FERMOSE, J.; PLAZA, M. G.; RUBIERA, F. Influence of torrefaction on the grindability and reactivity of woody biomass. **Fuel Processing Technology**, [S.l.], v. 89, n. 2, p.169-175, fev. 2008.

AMERICAN SOCIETY FOR TESTING AND MATERIALS. **ASTM** – D 2395 – 14 a, “Standard test methods for density and specific gravity (relative density) of wood and wood-based materials”, Annual Book of ASTM Standards, 1995.

AMERICAN SOCIETY FOR TESTING AND MATERIALS. **ASTM D-3172**: Standard Practice for Proximate Analysis of Coal and Coke, Withdrawn, 2007.

CARNEIRO JUNIOR, J. A. M.; TORRES, E. A.; ALVES, C. T. Análise técnica de sistemas de torrefação para aproveitamento da biomassa na geração de energia. In: Congresso brasileiro de engenharia química, 10, 2014, Florianópolis, Sc. **Anais...** Florianópolis: COBEQ, 2014. p.1 - 8.

CHAVES, A. M. B.; VALE, A. T. do; MELIDO, R. C. N.; ZOCH V. P. Características energéticas da madeira e carvão vegetal de clones de *Eucalyptus spp.* **Enciclopédia Biosfera: Centro Científico Conhecer**, Goiânia, v. 9, n. 17, p.533-542, 2015.

FELFLI, F. F.; LUENGO, C.A.; SUÁREZ, J.A.; BEATÓN, P. A. Wood briquette torrefaction. **Energy For Sustainable Development**, [S.l.], v. 10, n. 3, p.19-22, set. 2005.

GEOGRAFOS. Disponível em: <<http://www.geografos.com.br/cidades-parana/palotina.php>>. Acesso em: 12 nov. 2015.

MENEZES, M. J. S. **Poder calorífico e análise imediata da maravalha de Pinus (*Pinus sp*) e Araucária (*Araucaria angustifolia*) de reflorestamento como resíduos de madeira**. 2013. 65 f. Dissertação (Mestrado) - Curso de Energia na Agricultura, Universidade Estadual do Oeste do Paraná - Unioeste, Cascavel, 2013.

PHANPHANICH, M.; MANI, S.. Impact of torrefaction on the grindability and fuel characteristics of forest biomass. **Bioresource Technology**, [S.l.], v. 102, n. 2, p.1246-1253, jan. 2011.

PROTÁSIO, T. de P.; BUFALINO, L.; MENDES, R.F.; RIBEIRO, M. X.; TRUGILHO, P. F.; LEITE, E.R. da S. Torrefação e carbonização de briquetes de resíduos do processamento dos grãos de café. **Revista Brasileira de Engenharia Agrícola e Ambiental**, Campina Grande PB, v. 16, n. 11, p.1252-1258. 2012.

ROCHA, M. S. R. dos S.; ALMEIDA, R. M. R. G.; CRUZ, A. J. G. da. Avaliação do potencial energético de resíduos agroindustriais provenientes de diferentes regiões brasileiras. **Engevista**, Rio de Janeiro, v. 19, n. 1, p.217-235, jan. 2017.

- RODRIGUES, T. de O. **Efeitos da torrefação para fins energéticos**. 2009. 82 f. Dissertação (Mestrado) - Curso de Ciências Florestais, Engenharia Florestal, Universidade de Brasília, Brasília, DF, 2009.
- SANTOS, R. C. dos; CARNEIRO A. de C. O.; CASTRO, A. F. M.; CASTRO, R. V. O.; BIANCHE, J. J.; SOUZA, M. M. de; CARDOSO, M. T. Correlações entre os parâmetros de qualidade da madeira e do carvão vegetal de clones de eucalipto. **Scientia Forestalis**, Piracicaba, v. 39, n. 90, p.221-230, jun. 2011.
- SANTOS, J. R. S. dos. **Estudo da biomassa torrada de resíduos florestais de Eucalipto e bagaço de cana-de-açúcar para fins energéticos**. 2012. 86 f. Dissertação (Mestrado) - Curso de Ciências, Universidade de São Paulo, Escola Superior de Agricultura "Luiz de Queiroz", Piracicaba, 2012.
- SILVA, J. de C. e; BARRICHELO, L. E. G.; BRITO, J. O. Endocarpos de Babaçu e Macaúba comparados com a madeira de *Eucalyptus grandis* para a produção de carvão vegetal. **Ipef**, [S.l.], v. 34. p.31-34, dez. 1986.
- SIMETTI, R. Características energéticas de duas espécies do gênero *Eucalyptus* em função do ponto de amostragem. **Enciclopédia. Biosfera: Centro Científico Conhecer**, Goiânia, v. 11, n. 21, p.364-371, jun. 2015.
- SPANHOL, A.; NONES, D. L.; KUMABE, F. J. B.; BRAND, M. A. Qualidade dos pellets de biomassa florestal produzidos em Santa Catarina para a geração de energia. **Floresta**, [s.l.], v. 45, n. 4, p.833-843, 21 out. 2015.
- TOSCANO, G.; PIZZI, A.; PEDRETTI, E.F.; ROSSINI, G.; CICERI, G.; MARTIGNON, G.; DUCA, D. Torrefaction of tomato industry residues. **Fuel**, [S.l.], v. 143, p.89-97, mar. 2015.
- TRAN, K.; LUO, X.; SEISENBAEVA, G.; JIRIJIS, R. Stump torrefaction for bioenergy application. **Applied Energy**, [S.l.], v. 112, p.539-546, dez. 2013.
- TREVISAN, R. Variação radial da massa específica básica da madeira de *Eucalyptus grandis* W. Hill ex Maiden. **Floresta**, Curitiba, PR, v. 38, n. 3, p.553-559, jul. 2008.
- VALE, A. T. do; MENDES, R M.; AMORIM, M.R.S.; DANTAS, V.F. de S. Potencial energético da biomassa e carvão vegetal do Epicarpo 267 e da torta de Pinhão Manso (*Jatropha curcas*). **Cerne**, Lavras, v. 17, n. 2, p.267-273, abr/jun. 2011. Trimestral.
- VIEIRA, G.E.G.; NUNES, A.P.; TEIXEIRA, L. F.; COLEN, A.G.N. Biomassa: uma visão dos processos de pirólise. **Revista Liberato**, Novo Hamburgo, v. 15, n. 24, p.105-212, jul. 2014.

PROSPECÇÃO CIENTÍFICA E TECNOLÓGICA DA ESPÉCIE *Annona muricata*

Data de aceite: 10/01/2022

Data de submissão: 05/10/2021

Márcia Denise Alves Veras

Universidade Federal do Piauí-UFPI
Teresina-Piauí
<http://lattes.cnpq.br/4015119626954069>

Joana Darc Rodrigues Moura

Universidade Federal do Piauí-UFPI
Teresina-Piauí
<http://lattes.cnpq.br/7592657384498470>

Gerardo Magela Vieira Júnior

Universidade Federal do Piauí-UFPI
Teresina-Piauí
<http://lattes.cnpq.br/8484684765493808>

Mariana Helena Chaves

Universidade Federal do Piauí-UFPI
Teresina-Piauí
<http://lattes.cnpq.br/9975336655023605>

RESUMO: O gênero *Annona*, pertencente à família Annonaceae, possui cerca de 162 espécies de árvores e arbustos. É um dos gêneros mais importantes desta família devido ao valor comercial e atividades biológicas de espécies que o compõem. Dentre as várias propriedades biológicas de plantas do gênero *Annona*, destacam-se as atividades antimicrobiana, anti-inflamatória, antioxidante e citotóxica. O objetivo deste trabalho foi realizar uma prospecção científica e tecnológica da espécie *Annona muricata*, analisando as patentes sobre

esta planta registradas nos bancos de dados eletrônicos: *European Patente Office* (EPO), *World Intellectual Property Organization* (WIPO), *United States Patent and Trademark Office* (USPTO), Banco Latinoamericano de Patentes (LATIPAT) Instituto Nacional de Propriedade Intelectual (INPI), como também os artigos publicados e indexados nas bases *Pubmed*, *ScienceDirect*, *Scielo* e Periódicos Capes. As buscas nas bases de dados foram realizadas usando como palavras-chave o nome científico da espécie e os nomes populares: graviola e *soursop*. Os resultados obtidos demonstraram que existe uma grande quantidade de estudos que relatam o isolamento de constituintes químicos e as atividades biológicas de *Annona muricata*. Os principais países depositários de patentes sobre esta espécie são Filipinas, Coréia do Sul, Brasil, Estados Unidos, Japão e México, sendo verificada a existência de sete patentes brasileiras. As principais classificações internacionais de patentes foram as subclasses A61K e A23L.

PALAVRAS-CHAVE: *Annona muricata*, Annonaceae, Prospecção tecnológica.

TECHNOLOGICAL AND SCIENTIFIC FORECASTING SPECIES *Annona muricata*

ABSTRACT: The genus *Annona*, belonging to the Annonaceae family, has about 162 species of trees and shrubs. It is one of the most important genera of this family due to the commercial value and biological activities of its component species. Among the several biological properties of plants of the *Annona* genus, the antimicrobial, anti-

inflammatory, antioxidant and cytotoxic activities stand out. The objective of this work was to carry out a scientific and technological survey of the species *Annona muricata*, analyzing the patents on this plant registered in electronic databases: European Patent Office (EPO), World Intellectual Property Organization (WIPO), United States Patent and Trademark Office (USPTO), Latin American Patent Bank (LATIPAT), National Institute of Intellectual Property (INPI), as well as the articles published and indexed in the databases Pubmed, ScienceDirect, Scielo and Capes Periodicals. The searches in the databases were carried out using as keywords the scientific name of the species and the popular names: soursop and soursop. The results obtained showed that there is a large number of studies reporting the isolation of chemical constituents and the biological activities of *Annona muricata*. The main patent depository countries on this species are the Philippines, South Korea, Brazil, United States, Japan and Mexico, with the existence of seven Brazilian patents verified. The main international patent classifications were subclasses A61K and A23L.

KEYWORDS: *Annona muricata*, Annonaceae, Technological prospecting.

1 | INTRODUÇÃO

Nos últimos anos as plantas de uso tradicional têm despertado o interesse de grupos de pesquisa em todo o mundo e, neste contexto, o Brasil tem um expressivo destaque por apresentar uma grande biodiversidade. O estudo dos produtos naturais é de fundamental importância para investigação da composição química, atividade biológica e do potencial toxicológico, pois permite que estas substâncias sejam utilizadas como fitofármacos (RITTER et al., 2002).

A família Annonaceae possui aproximadamente 2500 espécies que estão distribuídas em 135 gêneros. As plantas desta família podem ser encontradas principalmente em regiões de clima tropical, tais como os continentes americano, africano e asiático. O gênero *Annona* é considerado o mais importante desta família, devido suas espécies apresentarem um alto valor econômico proveniente das propriedades nutricionais dos frutos que são consumidos naturalmente ou após processamento na indústria na forma de sucos e sorvetes (OLIVEIRA JUNIOR et al., 2014).

Annona é constituído por 162 espécies de hábito arbóreo ou arbustivo. No Brasil ocorrem aproximadamente 60 espécies, das quais a maioria pode ser encontrada em florestas. (OLIVEIRA JUNIOR et al., 2014).

Uma das espécies mais importantes do gênero *Annona* é a *Annona muricata* (Figura 1), conhecida popularmente como graviola, e da qual já foram isoladas diversas classes de metabólitos secundários tais como, alcaloides, flavonoides, terpenoides, antraquinonas, taninos, cumarinas, lactonas, compostos fenólicos (GAVAMUKULYA et al., 2014) e acetogeninas (RAGASA et al., 2012). Várias atividades farmacológicas têm sido relatadas para esta espécie como, antioxidante (GORDILLO et al., 2012), anti-inflamatória (FOONG; HAMID, 2012), antidiabética (FLORENCE et al., 2014), antibacteriana (VIEIRA et al., 2010), citotóxica (GAVAMUKULYA et al., 2014), antiulcerogênica e antinociceptiva

(HAMID et al., 2011).



Figura 1. Foto da espécie *A. muricata*

Fonte: <https://www.infoescola.com/frutas/graviola/>

Segundo Márquez et al. (2011), no óleo essencial do fruto de *A. muricata* estão presentes compostos alifáticos saturados e insaturados como, alcoóis, ésteres, ácidos carboxílicos e lactonas. No fruto maduro há predominância dos ésteres hexanoato de metila e (*E*)-2-hexenoato de metila.

O objetivo do presente estudo foi realizar uma prospecção tecnológica da espécie *A. muricata*, com a finalidade de analisar o número de depósitos de patentes em cada país, por meio da pesquisa em bancos de inovação e tecnologia nacionais e internacionais, bem como descrever o perfil da produção científica disponível nas áreas de Química e Farmacologia sobre a espécie.

2 | METODOLOGIA

A prospecção tecnológica sobre a espécie *Annona muricata* foi realizada nas bases de dados tecnológicas *European Patent Office* (EPO), *World Intellectual Property Organization* (WIPO), *United States Patent and Trademark Office* (USPTO), Banco Latinoamericano de Patentes (LATIPAT) e no banco de dados do Instituto Nacional de Propriedade Industrial (INPI) do Brasil. Para obtenção dos resultados foram utilizados os termos *Annona muricata* e graviola como palavras-chave.

As bases de periódicos pesquisadas foram o *ScienceDirect*, *PubMed*, *Scielo* e o Portal de Periódicos Capes. A pesquisa foi realizada em janeiro de 2021 e utilizou-se como palavras-chave os termos *Annona muricata*, graviola (em português) e *soursop* (em inglês), sendo considerados os resultados que apresentaram esses termos no título ou resumo.

3 | RESULTADOS E DISCUSSÃO

A prospecção tecnológica é um recurso utilizado para analisar o uso de produtos pela indústria e avaliar o desenvolvimento científico e tecnológico, uma vez que são fatores que afetam diretamente o desenvolvimento sócio-econômico de um país (OLIVEIRA JUNIOR et al., 2014). Neste contexto e sabendo-se que aproximadamente um terço dos medicamentos mais prescritos são de origem natural, o desenvolvimento de novos fármacos naturais surge como uma alternativa que, além de benéfica para a saúde, é economicamente viável quando comparada aos medicamentos sintéticos (CALIXTO, 2003).

Considerando a riqueza de constituintes químicos e potencial biológico de espécies do gênero *Annona*, foi realizada uma prospecção tecnológica e científica da espécie *Annona muricata*. Como resultado, foi observada uma grande quantidade de artigos que relatam as mais variadas atividades farmacológicas e os compostos isolados desta planta, conforme pode ser observado na Figura 2.

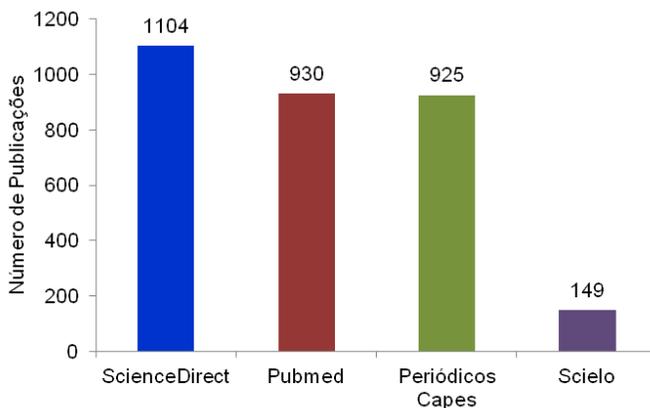


Figura 2. Total de publicações científicas nos bancos de dados sobre a espécie *A. muricata*

O número de publicações obtidas nas bases de dados pesquisadas foi bem elevado, entretanto, foi comum encontrar o mesmo artigo em mais de uma base. Um exemplo, é o estudo realizado por Gavamukulya et al. (2014) o qual relata a análise fitoquímica e as atividades antioxidante e citotóxica dos extratos etanólico e aquoso de *A. muricata* e que foi encontrado no *PubMed*, *Science Direct* e Portal de Periódicos Capes.

Estudos realizados com o extrato metanólico das raízes de *A. muricata* demonstram a presença da acetogenina sabadelina que foi isolada por cromatografia líquida de alta eficiência (CLAE) (GLEYE et al., 1999). As acetogeninas presentes no extrato metanólico das sementes de *A. muricata* são responsáveis pela atividade leishmanicida frente as espécies *Leishmania donovani*, *L. mexicana* e *L. major* (VILA-NOVA et al., 2013).

Também foi relatada a atividade anti-inflamatória do extrato etanólico das folhas de

A. muricata no tratamento de artrite induzida em ratos, sendo observado que a amostra foi eficiente no combate de dores agudas e crônicas. A análise fitoquímica deste extrato demonstra a presença de alcaloides, saponinas, flavonoides, triterpenos, taninos e esteroides (FOONG; HAMID, 2012).

O extrato aquoso das folhas de *A. muricata* apresenta as atividades antidiabética decorrente do seu efeito hipolipidêmico que provoca uma redução nos níveis de colesterol e de glicose no sangue, como também a ação antioxidante, atuando na proteção das células β -pancreáticas, o que provoca uma melhora no metabolismo da glicose (FLORENCE et al., 2014).

Os registros de patentes para a espécie *A. muricata* estão distribuídos nas seguintes bases: EPO (37), WIPO (21), LATIPAT (6) e INPI (7), entretanto, quatro patentes registradas no INPI também estavam presentes na base LATIPAT, portanto o total de patentes foi de 67 (Tabela 1). Estes documentos relatam principalmente o uso desta planta nas indústrias alimentícia e farmacêutica.

Palavras-chave	EPO	WIPO	USPTO	LATIPAT	INPI
<i>Annona muricata</i>	37	21	0	6	7

Tabela 1. Distribuição das patentes sobre *A. muricata* registradas nas bases de dados pesquisadas

A Figura 3 apresenta a distribuição das patentes sobre *A. muricata* por país. Filipinas e Coréia do Sul são os maiores depositários de patentes e respondem por 26,9% e 25,4% do total de documentos registrados, respectivamente. O Brasil está em terceiro lugar e é responsável por 10,4% dos pedidos de patentes encontrados sobre a espécie, entretanto, é importante ressaltar que as patentes brasileiras foram depositados nas bases LATIPAT e INPI. No Brasil, a quantidade de pedidos de depósitos de patentes de estrangeiros em comparação com os pedidos nacionais, assim como o número de pedidos de brasileiros no exterior evidenciam a falta de estrutura básica e o fraco desempenho na proteção da propriedade industrial desenvolvida nacionalmente (BUAINAIM; SOUZA, 2019).

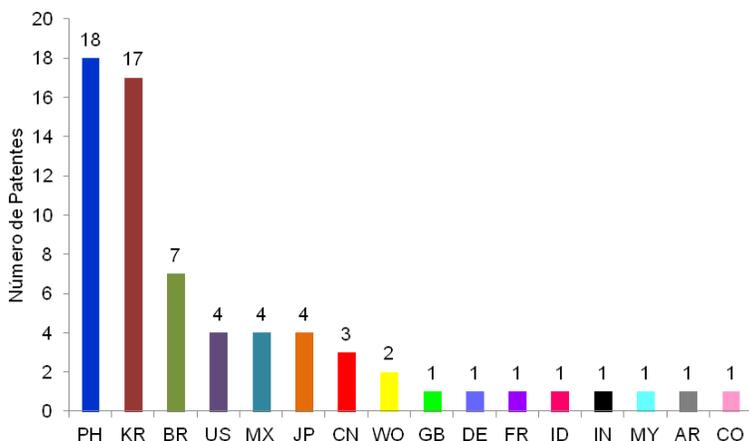


Figura 3. Distribuição dos depósitos de patentes sobre *A. muricata* por país.

Legenda: PH (Filipinas), KR (República da Coréia do Sul), BR (Brasil), US (Estados Unidos da América), MX (México), JP (Japão), CN (China), WO (Organização Mundial de Propriedade Intelectual), GB (Grã-Bretanha), DE (Alemanha), FR (França), ID (Indonésia), IN (Índia), MY (Malásia), AR (Argentina) e CO (Colômbia)

As principais classificações das patentes pesquisadas e seus códigos de classificação internacional são descritos na Tabela 2. O código referente à aplicação com maior número de patentes foi a seção A (necessidade humanas), enquanto as classes A61K (preparações para finalidades médicas, odontológicas ou higiênicas) e A23L (atividade terapêutica específica de compostos químicos ou preparações medicinais) apresentaram os maiores números de registros.

Classificação Internacional de Patentes (CIP)	Descrição do Código
A01	Agricultura; Silvicultura; Pecuária; Pesca
A21	Preparo; Cozimento ou processamento de massas
A23	Alimentos ou produtos alimentícios
A61	Ciência médica ou veterinária; Higiene
C07	Química; Química orgânica

Tabela 2. Principais códigos de classificação internacional das patentes sobre *A. muricata* e suas descrições para as competências pesquisadas

Número da Patente	Ano	Inventores	Título da Patente	Descrição da Patente
KR1015813400000	2015	Seo Jeong Guk Seo Kim Jeong Guk Jung Sook Kim Jung Soo	Method for fermenting mixture of <i>Orostachys japonica</i> e <i>Annona muricata</i>	A presente invenção refere-se a um método para fermentar uma mistura de <i>Orostachys japonica</i> e <i>Annona muricata</i> . O primeiro passo é a produção de um pó composto pelas duas espécies que é posteriormente misturado ao leite e submetido a fermentação com bactérias. A mistura fermentada passa por um processo de secagem e a mistura seca é moída fornecendo um pó que é o produto pronto para consumo.
KR1020190061417	2019	Lim In Sook Choi Moon Kyeung Lee Gwang Suk Chang Young Sang	Jelly comprising extract of <i>Annona muricata</i> L. graviola leaves and cellulose	A presente invenção se refere ao processo de produção de uma geléia obtida a partir do extrato das folhas de <i>A. muricata</i> (graviola). Este trabalho também descreve a atividade antioxidante da celulose obtida como subproduto durante o processo de obtenção da geléia.
PH2/2014/000307	2015	Evelyn B. Manongsong Rosalinda C. Torres Teresita S. Bonifacio Carmelita O. Manalo Yolanda C. paras Eduardo A. Lanto JULIET T. Barcala Romulo R. Estrella Cynthia N. Ochona Elvira L. Arrogante Regin Glen Ortiz	Process of preparation of natural health supplement from <i>Annona muricata</i> fruits	O referido trabalho trata da preparação de um suplemento natural em forma de cápsulas contendo de 250-300 mg do pó de <i>A. muricata</i> (graviola). No processo de produção das cápsulas foram realizadas análises para avaliar a toxicidade e os níveis de metais pesados. Os resultados obtidos estão dentro do limite de referência permitido.
PH2/2017/050033	2017	Pet Anthony L. Pascual	A process of producing bottled soursop (<i>Annona muricata</i>) pulpy juice	Modelo de utilidade que trata do processo de produção do suco a partir da polpa de <i>A. muricata</i> . As etapas de produção são lavagem, retirada da casca, remoção dos caroços, extração do suco, adição de açúcar, seguido de envase do suco em garrafas esterilizadas e por fim pasteurização por 1h a 80 °C.
PH2/2018/000558	2020	Renato B. de la Cruz Jr. Juanita S. Cajandig Geronimo L. Abayga	Soursop (<i>Annona muricata</i>) tomato (<i>Solanum lycopersicum</i>) catsup	Preparação de um catchup utilizando tomate (<i>Solanum lycopersicum</i>) e graviola (<i>A. muricata</i>). Os outros ingredientes utilizados no preparo são alho, cebola, açúcar, sal, canela e vinagre.
KR1020180102752	2018	Jong Hyun Hwang Young Jin Ko	Food additive composition having anticancer activity, kimchi seasoning composition and anticancer functional kimchi	A presente invenção se refere a produção de um aditivo alimentar que apresenta atividade anticâncer e é constituído por extratos de <i>A. muricata</i> , <i>Eleutherococcus senticosus</i> , <i>Morinda citrifolia</i> e <i>Glycyrrhiza uralensis</i> , como ingredientes ativos de um tempero utilizado no preparo de <i>kimchi</i> (comida tradicional coreana)

Quadro 1. Patentes relacionadas as aplicações tecnológicas da espécie *A. muricata* depositadas na WIPO

O Quadro 1 apresenta as patentes selecionadas na base WIPO, pertencentes a subclasse A23L, com o uso da espécie *A. muricata* na composição de produtos alimentícios, estando ou não em associação com outras espécies vegetais.

4 | CONCLUSÃO

A prospecção científica e tecnológica realizada sobre a espécie *Annona muricata* demonstrou que existe um grande número de artigos nas diversas áreas do conhecimento, os quais relatam os constituintes químicos isolados e as atividades farmacológicas. Os principais países depositários de patentes sobre esta espécie são Filipinas, Coréia do Sul, Brasil, Estados Unidos, Japão e México, contudo, os resultados obtidos referentes as patentes brasileiras ainda são escassos, tendo em vista a grande utilização desta planta na indústria alimentícia e na medicina popular. Uma explicação para este fato deve-se a dificuldade para realizar o depósito de uma patente bem como a falta de informação para realização deste processo.

AGRADECIMENTOS

Os autores agradecem a CAPES, CNPq e INCTBioNat (465637/2014-0) pelo apoio financeiro e pela bolsa de M. H. Chaves (302470/2018-2).

REFERÊNCIAS

BUAINAIN, A. M.; SOUZA, R. F. **Propriedade intelectual e desenvolvimento no Brasil**. Rio de Janeiro: Ideia, 2019.

CALIXTO, J. B. Biodiversidade como fonte de medicamento. **Ciência e Cultura**. São Paulo, v. 55, n.3, p. 37-39, 2003.

FLORENCE, N. T.; BENOIT, M. Z. JONAS, K.; ALEXANDRA, T.; DÉsirÉ, D. D. P.; PIERRE, K.; THÉOPHILE, D. Antidiabetic and antioxidant effects of *Annona muricata*(Annonaceae), aqueous extract on streptozotocin-induced diabetic rats. *Journal of Ethnopharmacology*, v. 151, n. 2, p. 784-790, 2014.

FOONG, C. P.; HAMID, R. A. Evaluation of anti-inflammatory activities of ethanolic extract of *Annona muricata* leaves. **Revista Brasileira de Farmacognosia**, v. 22, n. 6, p. 1301-1307, 2012.

GAVAMUKULYA, Y.; ABOU-ELELLA, F.; WAMUNYKOLI, F.; AEL-SHEMY, H. Phytochemical screening, anti-oxidant activity and in vitro anticancer potential of ethanolic and water leaves extracts of *Annona muricata* (Graviola). **Asian Pacific Journal of Tropical Medicine**, v. 7, n. 1, p. 355-363, 2014.

GLEYE, C.; LAURENS, A.; LAPREVÔTE, O.; SERANI, L.; HOCQUEMILLER, R. Isolation and structure elucidation of sabadelin, an acetogenin from roots of *Annona muricata*. **Phytochemistry**, v.52, n. 8, p. 1403-1408, 1999.

GORDILLO, J. C.; ORTIZ, D.; LAHARRONDO, J. E.; MAJÍA, M. S.; PACHÓN. Actividad antioxidante em guanába (*Annona muricata* L.): uma revisão bibliográfica. **Boletín Latinoamericano y del Caribe de Plantas Medicinales y Aromáticas**, v. 11, n. 2, p. 111-126, 2012.

HAMID, R. A.; FOONG, C. P.; AHMAD, Z.; HUSSAIN, M. K. Antinociceptive and anti-ulcerogenic activities of the ethanolic extract of *Annona muricata* leaf. **Brazilian Journal of Pharmacognosy**, v. 22, n. 3, p. 630-641, 2011.

MARQUÉZ, C. J.; JIMENEZ, A. M.; OSORIO, C.; CARTAGENA, J. R. V. Compuestos volátiles de la guanábana colombiana (*Annona muricata* L. cv Elita). **Revista de la Facultad de Química Farmacéutica**, v. 18, n. 3, p. 245-250, 2011.

OLIVEIRA JÚNIOR, R. G.; Rabêlo, S. V.; ARAÚJO, C. S.; SILVA, J. C.; DINIZ, T. C.; ALMEIDA, J. R. G. S. Prospecção tecnológica do gênero *Annona* (Annonaceae). **Revista Geintec**, v. 4, p. 850-858, 2014.

RAGASA, C.Y.; SORIANO, G.; TORRES, O.B.; DON, M. J., SHEN, C. C. Acetogenins from *Annona muricata*. **Pharmacognosy Journal**, v. 4, p. 32-37, 2012.

RITTER, M. R.; SOBIERAJSKI, G. R.; SCHENKEL, E. P.; MENTZ, L. A. Plantas usadas como medicinais no município de Ipê, RS, Brasil. **Revista Brasileira de Farmacognosia**, v. 12, n. 2, p. 51-62, 2002.

VIEIRA, G. H. F.; MOURÃO, J. A.; ÂNGELO, Â. M.; COSTA, R. A.; VIEIRA, R. H. S. F. Antibacterial effect (in vitro) of *Moringa oleifera* and *Annona muricata* against gram positive and gram negative bacteria. **Revista do Instituto de Medicina Tropical**, v. 52, n. 3, p. 129-132, 2010.

VILLA-NOVA, N. S.; MORAIS, S. M.; FALCÃO, M. J. C.; ALCANTARA, T. T. N.; FERREIRA, P. A. T.; CAVALCANTI, E. S. B.; VIEIRA, I. G. P.; CAMPELLO, C. C.; WILSON, M. Different susceptibilities of *Leishmania* spp. promastigotes to the *Annona muricata* acetogenins annonacinone and corosolone, and the *Platymiscium floribundum* coumarin scoparone. **Experimental Parasitology**, v. 133, n. 3, p. 334-338, 2013.

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

Data de aceite: 10/01/2022

Data de submissão: 06/10/2021

Rodrigo Ferreira Santiago

Universidade Federal do Piauí – UFPI
Teresina – Piauí
<http://lattes.cnpq.br/9217526625989472>

Luanda Ferreira Floro da Silva

Universidade Federal do Piauí – UFPI
Teresina – Piauí
<http://lattes.cnpq.br/4492612496272622>

Lucivania Rodrigues dos Santos

Universidade Federal do Piauí – UFPI
Teresina – Piauí
<http://lattes.cnpq.br/6310238605885623>

Elcilene Alves de Sousa

Universidade Federal do Piauí – UFPI
Teresina – Piauí
<http://lattes.cnpq.br/5468618220778705>

Gerardo Magela Vieira Júnior

Universidade Federal do Piauí – UFPI
Teresina – Piauí
<http://lattes.cnpq.br/8484684765493808>

Mariana Helena Chaves

Universidade Federal do Piauí – UFPI
Teresina – Piauí
<http://lattes.cnpq.br/9975336655023605>

RESUMO: *Senna acuruensis* Benth. (Fabaceae) é uma espécie endêmica do nordeste brasileiro, conhecida popularmente como “besouro”

e “canafistinha”. O estudo fitoquímico das frações hexânica e CHCl_3 das sementes de *S. acuruensis* resultou na identificação de 15 compostos. A fração hexânica consistiu em uma mistura composta por dez ésteres de ácidos graxos: palmitato de metila (1), palmitato de etila (2), linoleato de metila (3), oleato de metila (4), linoleato de etila (5), oleato de etila (6), estearato de etila (7), eicosanato de etila (8), docosanoato de etila (9), tetracosanoato de etila (10) e um hidrocarboneto, hexatriacontano (11). A partir da fração CHCl_3 foi obtida uma mistura dos esteroides: campesterol (12), estigmasterol (13), sitosterol (14) e o estigmast-7-en-3 β -ol (15), sendo o composto 15 relatado pela primeira vez no gênero *Senna*. Os compostos foram identificados por cromatografia gasosa acoplada à espectrometria de massas (CG-EM).

PALAVRAS-CHAVE: Ésteres, esteroides, *Senna acuruensis*, Fabaceae.

CHEMICAL CONSTITUENTS FROM THE SEEDS OF *Senna acuruensis* Benth. IDENTIFIED BY CG-EM

ABSTRACT: *Senna acuruensis* Benth. (Fabaceae) is an endemic species from northeastern Brazil, popularly known as “beetle” and “canafistinha”. The phytochemical study of the hexane and CHCl_3 fractions of the seeds of *S. acuruensis* resulted in the identification of 15 compounds. The hexane fraction consisted of a mixture composed of ten fatty acid esters: methyl palmitate (1), ethyl palmitate (2), methyl linoleate (3), methyl oleate (4), ethyl linoleate (5), ethyl oleate (6), ethyl stearate (7), ethyl eicosanate (8), ethyl docosanoate (9), ethyl tetracosanoate (10)

and a hydrocarbon, hexatriacontane (**11**). From the CHCl_3 fraction a mixture of the steroids was obtained: campesterol (**12**), stigmasterol (**13**), sitosterol (**14**) and stigmast-7-en-3 β -ol (**15**), with compound **15** being reported for the first time in *Senna* genus. The compounds were identified by gas chromatography-mass spectrometry (GC-MS).

KEYWORDS: Esters, steroids *Senna acuruensis*, Fabaceae.

1 | INTRODUÇÃO

Fabaceae ou Leguminosae é considerada a terceira maior família de Angiospermas, composta por cerca de 19.500 espécies, distribuídas em aproximadamente 770 gêneros (LEWIS et al., 2005; LPWG, 2017). No Brasil essa família é constituída por 210 gêneros, 2.694 espécies, das quais 1.458 são endêmicas, 53 subespécies (16 endêmicas) e 731 variedades (419 endêmicas) (FORZZA et al., 2010a). Fabaceae pode ser encontrada na maior parte dos ecossistemas brasileiros, sendo descrita como a família botânica mais bem representada na caatinga (SILVA et al., 2010). É constituída pelas subfamílias Caesalpinioideae, Papilionoideae, Detarioideae, Cercidoideae, Dialioideae e Duparquetioideae (DOYLE; LUCKOW, 2003; LPWG, 2017; CARVALHO et al., 2020).

Plantas do gênero *Senna* acumulam flavonóides, polissacarídeos, esteróides, cromonas, lactonas e triterpenos, mas plantas do gênero são mais conhecidas por biossintetizarem antraquinonas e alcalóides piperidínicos (SANTOS et al., 2019). Muitos destes metabólitos têm sido descritos por suas propriedades biológicas e farmacológicas, as quais incluem antibacteriana, laxante, antiulcerogênica, citotóxica, atifúngica, analgésica, anti-inflamatória, antioxidante e hepatoprotetora (VEIGAS JUNIOR et al., 2013).

Senna acuruensis (Benth.) Irwin & Barneby (sinonímia *Cassia acuruensis*) é uma espécie endêmica do nordeste brasileiro, com ocorrência nos estados do Piauí e principalmente na Bahia, é conhecida popularmente como besouro e canafistinha (FORZZA et al., 2010a; MENDES; CASTRO, 2010; FARIAS; CASTRO, 2004).

Com o intuito de contribuir para o conhecimento químico tanto da espécie *S. acuruensis* como do gênero *Senna*, este trabalho tem como objetivo identificar por CG-EM constituintes químicos das frações hexânica e clorofórmica do extrato etanólico das sementes de *S. acuruensis*.

2 | METODOLOGIA

Os frutos da espécie *S. acuruensis* foram coletados em 22 de janeiro de 2014, no município de Jatobá do Piauí – PI, nas seguintes coordenadas geográficas: S 04° 51' 48,6", W 42° 04' 19,6", altitude: 100 m. O material vegetal foi identificado pela bióloga Dra. Ruth Raquel Soares de Farias. Uma exsiccata da espécie encontra-se depositada no Herbário Graziela Barroso da Universidade Federal do Piauí – UFPI, com o número TEPB 17193 e registrada no Sistema Nacional de Gestão do Patrimônio Genético e do Conhecimento

Tradicional Associado (SisGen) com número AAB530D.

Os frutos de *S. acuruensis* foram secados à temperatura ambiente e separados em cascas e sementes. As sementes (533 g) foram trituradas em liquidificador e submetidas à maceração com EtOH por seis vezes consecutivas. Cada extração teve duração de quatro dias com eventual agitação, seguido de filtração simples. O solvente foi removido em evaporador rotativo à pressão reduzida com aquecimento a 40 °C, obtendo-se assim o extrato etanólico das sementes (30 g; 5,6%).

Uma alíquota de 28 g do extrato etanólico das sementes de *S. acuruensis* foram dissolvidas em CHCl₃/MeOH (1:2), adsorvidas em 66 g de gel de sílica (SiO₂), pulverizadas em grau e pistilo e acondicionada em uma coluna filtrante de 4,5 x 38 cm, preenchida com 253 g de gel de sílica. A coluna foi eluída com hexano (4,0 L), clorofórmio (2,5 L), acetato de etila (1,5 L) e metanol (1,5 L), sucessivamente. Após a remoção dos solventes em evaporador rotativo à pressão reduzida com aquecimento a 40 °C, foram obtidas as frações hexânica (FH, 7,5 g; 26,7%), clorofórmica (FCHCl₃, 7,6 g; 27,1%), AcOEt (FAcOEt, 2,4 g; 8,7%) e metanólica (FMeOH, 11,9 g; 42,5%).

A fração hexânica na análise por cromatografia em camada delgada (CCD), utilizando hexano/AcOEt (95:5) como eluente e solução de sulfato cérico como revelador, apresentou uma mancha de coloração amarelada e, após análise por ressonância magnética nuclear (RMN) e cromatografia gasosa acoplada a espectrometria de massas (CG-EM), resultou na identificação de uma mistura de ésteres de ácidos graxos (1-11). Os espectros de RMN foram obtidos em espectrômetro Varian INOVA modelo 400, operando a 400 MHz (¹H) e 100 MHz (¹³C). A análise CG-EM foi realizada em cromatógrafo GCMS-QP2010 SE, AOC-5000 auto injetor da Shimadzu, utilizando a coluna SLB™-5ms (30 m x 0,25 mm x 0,25 μm). O detector de massas operou com ionização por elétrons (EI) 70 eV, modo *scan* no intervalo de *m/z* 50 a 650 Da (Daltons). Fase estacionária difenildimetilpolissiloxano (5% de difenil e 95% de dimetilpolissiloxano) e hélio como gás de arraste. As condições da análise cromatográfica foram: temperatura inicial de 70 °C por 2 minutos, com taxa de aquecimento de 6 °C min⁻¹ até 310 °C, permanecendo por 10 minutos. A temperatura do injetor foi de 300 °C, da fonte de íons 260 °C e da interface 310 °C.

Uma alíquota de 7,0 g da fração clorofórmica, oriunda da coluna filtrante do extrato etanólico, foi submetida a fracionamento por cromatografia em coluna (CC) de gel de sílica (210 g), eluída com hexano/AcOEt em gradiente crescente de polaridade, seguida de AcOEt/MeOH (1:1) e MeOH 100%. As frações obtidas foram analisadas por cromatografia em camada delgada comparativa (CCDC) de gel de sílica e reunidas em 15 grupos, com base nos fatores de retenção e coloração observada nas cromatoplasmas reveladas com solução de sulfato cérico.

O grupo CSS36 (202,0 mg) foi submetido a cromatografia em coluna de Sephadex LH-20 eluído com hexano/CH₂Cl₂ (1:4) obtendo-se a subfração CSS36-9 (45,6 mg), que após a análise por CCD, utilizando hexano/AcOEt (8:2) como eluente e solução de sulfato

cérico como revelador, apresentou uma mancha de coloração roxa.

A subfração CSS36-9 foi derivatizada com *N,O*-bis(trimetilsilil)trifluoroacetamida (BSTFA) de acordo com Prytzky et al. (2003). Uma alíquota de 1,0 mg da amostra foi dissolvida em 1,0 mL de CH_2Cl_2 obtendo uma solução de concentração 1,0 mg mL⁻¹, posteriormente a solução foi transferida para um frasco de 2,0 mL, o solvente foi evaporado, em seguida foi adicionado 250 μL de piridina tratada e 50 μL de BSTFA. O frasco foi devidamente fechado e levado a aquecimento, entre 40 a 50 °C, durante 1 hora. Após o término da reação, foi adicionado 1,0 mL de acetato de etila e os derivados sililados obtidos foram analisados em CG-EM, resultando na identificação dos derivados sililados **12-15**.

A análise em CG-EM para os derivados sililados foi realizada em cromatógrafo GCMS-QP2010 SE, AOC-5000 auto injetor da Shimadzu, coluna SLB-5MS (30 m x 0,25 mm x 0,10 μm), fase estacionária difenildimetilpolissiloxano (5% de difenil e 95% de dimetilpolissiloxano) e hélio como gás de arraste (1 mL min⁻¹). O detector de massas operou com ionização por elétrons (EI) 70 eV, modo *scan* no intervalo de *m/z* 50 a 600 Da (Daltons). Para análise foi usada a seguinte programação: temperatura inicial de 71 °C por 2 minutos, com taxa de aquecimento de 6 °C min⁻¹ até 315 °C, mantido por 30 min. As temperaturas do injetor e interface foram 290 °C e 310 °C, respectivamente. Os compostos foram identificados por comparação dos espectros de massas obtidos com os da biblioteca Willey 229, NIST08 e por comparação com os dados da literatura (DIEKMAN e DJERASSI, 1967; PELILLO et al., 2003).

3 | RESULTADOS E DISCUSSÃO

O fracionamento cromatográfico clássico das frações hexânica e clorofórmica do extrato etanólico das sementes de *S. acuruensis*, seguido de análise espectrométrica, bem como comparação com dados disponíveis na literatura, possibilitou identificar os compostos **1-15**, sendo **1-10** ésteres metílico e etílico de ácidos graxos saturados e insaturados, **11** é um hidrocarboneto e quatro são esteroides **12-15** (Figura 1).

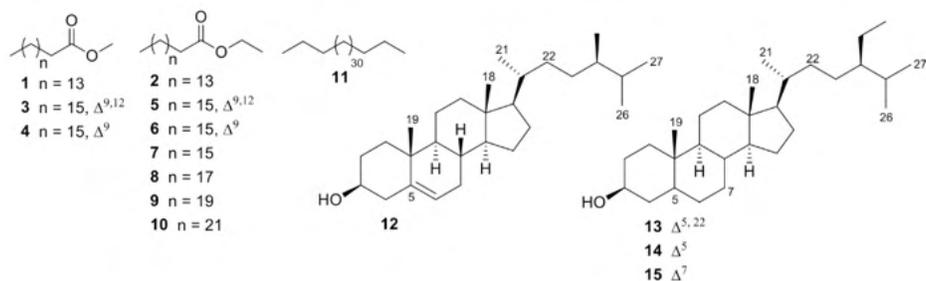


Figura 1: Constituintes químicos identificados na fração hexânica e clorofórmica das sementes de *S. acuruensis*.

O espectro de RMN de ^1H da fração hexânica apresentou um multipletto em δ 5,33 atribuído a hidrogênios olefínicos, um quarteto em δ 4,14 de hidrogênios oximetilênicos, um simpleto em δ 3,64 de hidrogênios de metoxila, um sinal em δ 2,30 de hidrogênios α -carboxílicos, um multipletto em δ 2,26 correspondente a hidrogênios alílicos, um sinal em δ 2,73 de hidrogênios metilênicos *bis*-alílicos, um triplete em δ 0,97 ($J = 7,2$ Hz) correspondente a hidrogênios metílicos, um simpleto largo entre δ 1,25-1,30 (sl) atribuído a hidrogênios de grupos metilênicos de cadeia hidrocarbônica. O espectro de RMN de ^{13}C apresentou sinais em δ 173,8, referente à carbonila de éster, em δ 52,0 e 60,0, atribuídos aos carbonos de metoxila e oximetilênico, respectivamente e, entre δ 127,9-130,1, de carbono olefínico. Adicionalmente, apresentou sinais em δ 14,0 e 14,2 de carbonos metílicos e entre δ 22,6-34,3 de CH_2 de cadeia hidrocarbônica. Estes dados sugerem tratar-se de mistura de ésteres etílicos e metílicos de ácidos graxos saturados e insaturados.

Após constatação da presença de ésteres metílicos e etílicos na fração hexânica, foi realizada a análise por CG-EM permitindo identificar os compostos **1-11**, por meio do índice de similaridade (IS) entre os espectros de massas obtidos do cromatograma de íons totais com os das bibliotecas Wiley229, NIST08 e dados da literatura (ADAM e HAGR, 2019). O cromatograma de íons totais apresentou onze bandas atribuídas aos compostos (**1-11**), dos quais, **1-10** são ésteres e **11** é um hidrocarboneto. Destes o linoleato de etila (**5**) é o constituinte majoritário com 40,62%, seguido pelo palmitato de etila (**2**) com 24,52% e do oleato de etila (**6**) com 14,02% (Figura 2). A Tabela 1 apresenta a relação dos constituintes químicos identificados na fração hexânica.

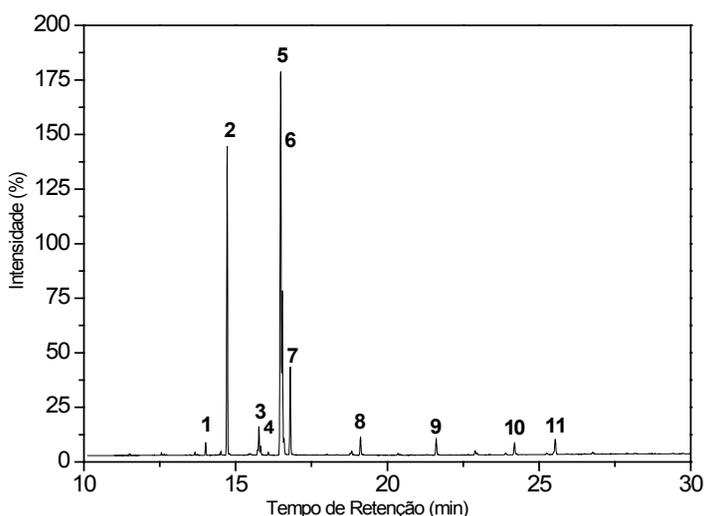


Figura 2: Cromatograma de íons totais da fração hexânica das sementes de *S. acuruensis*

Compostos	Tr (min)	Ar (%)	M ⁺	MS (m/z)
Palmitato de metila (1)	14,010	0,92	270	253, 239, 227, 213, 199, 185, 143, 129, 101, 87, 74, 55
Palmitato de etila (2)	14,680	24,52	284	269, 255, 241, 239, 213, 199, 185, 157, 143, 101, 88, 74, 55
Linoleato de metila (3)	14,735	2,28	294	281, 262, 263, 220, 178, 164, 150, 135, 123, 109, 95, 81, 74, 67, 55
Oleato de metila (4)	14,790	0,68	296	278, 265, 264, 235, 222, 180, 166, 152, 137, 123, 111, 97, 83, 74, 69, 55
Linoleato de etila (5)	16,520	40,62	308	279, 263, 262, 220, 178, 164, 150, 135, 123, 109, 9, 88, 81, 67, 55
Oleato de etila (6)	16,550	14,02	310	265, 264, 220, 180, 166, 155, 125, 111, 97, 88, 69, 55
Estearato de etila (7)	16,850	7,42	312	283, 269, 267, 227, 213, 199, 157, 143, 129, 115, 101, 88, 70, 55
Eicosanato de etila (8)	19,130	1,64	340	311, 297, 295, 213, 157, 143, 129, 115, 101, 88, 69, 55
Docosanoato de etila (9)	21,630	1,52	368	339, 325, 323, 269, 213, 199, 157, 143, 129, 115, 101, 88, 70, 57, 55
tetracosanoato de etila (10)	24,150	1,30	396	367, 353, 351, 297, 213, 157, 143, 129, 115, 101, 88, 70, 57, 55
Hexatriacontano (11)	25,570	1,36	507	295, 255, 197, 183, 169, 155, 141, 127, 113, 99, 85, 71, 57

Tabela 1: Tempo de retenção (Tr), área relativa (Ar), pico do íon molecular (M⁺) e razão massa/carga (m/z) dos constituintes químicos identificados na fração hexânica das sementes de *S. acuruensis*

Os espectros de massas dos ésteres de ácidos graxos apresentam picos de fragmentos característicos com m/z 74 e m/z 88 para éster metílico e etílico respectivamente, os quais são atribuídos ao rearranjo de McLafferty (Figura 3, Tabela 1). Para que esse rearranjo ocorra, a molécula deve possuir um heteroátomo em posição apropriada (oxigênio) e um átomo de hidrogênio que possa ser abstraído na posição γ em relação a carbonila (SILVERSTEIN, WEBSTER e KIEMLE, 2007). Nesse rearranjo, o átomo de hidrogênio γ é transferido para a carbonila conduzindo a um estado de transição de seis membros, com clivagem das ligações sigmas entre os carbonos α e β à carbonila e C-H da posição γ (PAVIA et al., 2015).

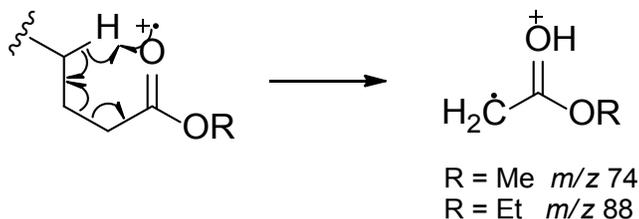


Figura 3: Rearranjo de McLafferty de ésteres de ácidos graxos

Os ésteres identificados apresentam espectros de massas com íons pseudomoleculares m/z $[M-31]^+$ e $[M-45]^+$ que são característicos de ésteres de ácidos graxos e correspondem a perda de grupos metoxila (OCH_3) e etoxila (OCH_2CH_3), enquanto os fragmentos m/z 87 e m/z 101 são característicos da clivagem entre os carbonos γ e δ , conforme Figura 4 (SILVERSTEIN, WEBSTER e KIEMLE, 2007; JABBAR et al., 2014).

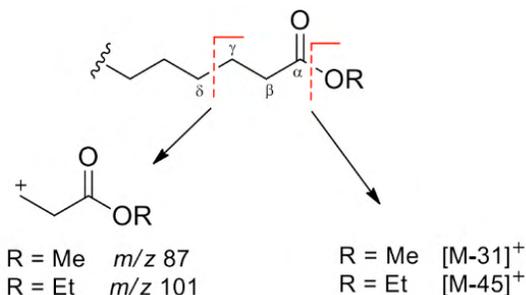


Figura 4: Proposta de fragmentação dos ésteres de ácidos graxos

Os compostos **1-10** podem ter sido formados pela esterificação dos ácidos graxos correspondentes durante os processos de extração e separação quando se utilizou os solventes MeOH e EtOH.

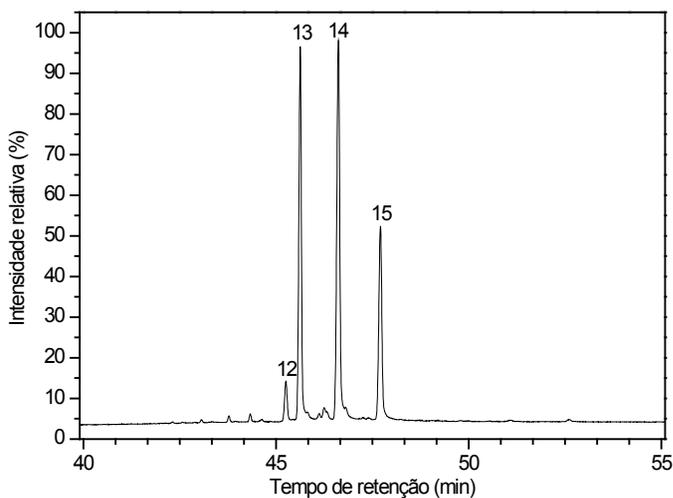
Em óleos fixos de sementes são encontradas grandes quantidades de ácidos graxos livres ou esterificados como triacilgliceróis, entretanto, a presença de ésteres de ácidos graxos na forma livre é raramente relatados em estudos de óleos de sementes, devido a forma de análise ser frequentemente por CG-EM, portanto requer que a amostra seja previamente metilada. Alguns estudos evidenciam a existência de ésteres metílicos e etílicos em outras partes de plantas como nas cascas de *Holoptelea integrifolia*, nas raízes de *Calotropis procera*, nas flores de *Calotropis gigantea* e nos galhos e folhas de *Brosimum glaziovii* (HASSAN et al., 2019; ADAM e HAGR, 2019; DHIVYA e MANIMEGALAI, 2013; COQUEIRO et al., 2014)

A reação de esterificação ocorre com a ativação do grupo carbonila, pela sua protonação, deixando o carbono mais susceptível a um ataque nucleofílico com MeOH ou

EtOH, para formar um intermediário tetraédrico. Posteriormente, ocorre a eliminação de água restaurando o grupo carbonila (CAREY, 2011).

Os ácidos graxos, em sua forma livre e, sobretudo, esterificados com o glicerol, são componentes dos óleos e gorduras. Não são comumente ramificados, geralmente têm número par de átomos de carbono e quando insaturados, as ligações duplas são normalmente *cis*. As gorduras são usadas como reserva biológica estocada nos tecidos do corpo. Os produtos finais de seu metabolismo são CO₂ e água. Os óleos têm uma função semelhante nas sementes de plantas (VOLLHARDT e SCHORE, 2013).

Os esteroides **12-15** obtidos da fração clorofórmica foram identificados como derivados siliados. A análise em CG-EM dos derivados siliados forneceu o cromatograma de íons totais (TIC) mostrado na Figura 5. O TIC apresentou quatro bandas identificadas como campesterol (**12**), estigmasterol (**13**), sitosterol (**14**) e estigmast-7-en-3 β -ol (**15**), sendo majoritários os compostos **13** e **14**, com abundâncias relativas de 34,31% e 40,63%, respectivamente. Os compostos foram identificados por comparação dos espectros de massas obtidos com os da biblioteca Willey 229, NIST08 e por comparação com os dados da literatura. A Tabela 2 mostra o tempo de retenção (Tr), área relativa (Ar) e o *m/z* do pico do íon molecular (M⁺) para os compostos identificados.



Cromatograma de íons totais dos derivados siliados

Figura 5:

Composto	Tr (min)	Ar (%)	M ⁺	MS (m/z)
CampesterolTMS (12)	45.140	3,89	472	457, 382, 367, 343, 315, 313, 261, 255, 213, 159, 145, 129, 95, 73
EstigmasterolTMS (13)	45.505	34,31	484	469, 412, 394, 379, 327, 351, 271, 255, 213, 199, 159, 133, 129, 83, 73
SitosterolTMS (14)	46.480	40,63	486	471, 396, 381, 357, 329, 275, 255, 213, 159, 145, 129, 121, 95, 81, 73
Estigmast-7-en-3-olTMS (15)	47.550	21,17	486	471, 414, 396, 381, 345, 303, 255, 229, 213, 147, 107, 95, 73

Tabela 2: Tempo de retenção (Tr), área relativa (Ar), pico do íon molecular (M⁺) e razão massa/carga (m/z) dos esteroides sililados

Os espectros de massas dos compostos identificados apresentam picos de íons moleculares somados 73 Da, referente a massa do TMS (CARVALHO et al., 2020). Os picos m/z [M-15]⁺, [M-90]⁺, [M-15-90]⁺, [M-129]⁺, [M-CL]⁺ e [M-CL-90]⁺ são característicos de esteroides sililados e correspondem a perda de grupos metila (CH₃), trimetilsilanol (TMSOH), trimetilsilanol+metila (TMSOH+CH₃), propeniltrimetilsilil (TMSO-C₃H₄), cadeia lateral (CL) e trimetilsilanol (TMSOH) seguido de perda da cadeia lateral (CL) respectivamente. Os fragmentos m/z [M-129]⁺, 315, 327 e 329 são característico da fragmentação no anel A de esteroides D⁵, conforme proposta de fragmentação apresentada na Figura 6 (DIEKMAN e DJERASSI, 1967; WYLLIE, AMOS e TOSKES, 1977; PELILLO et al., 2003).

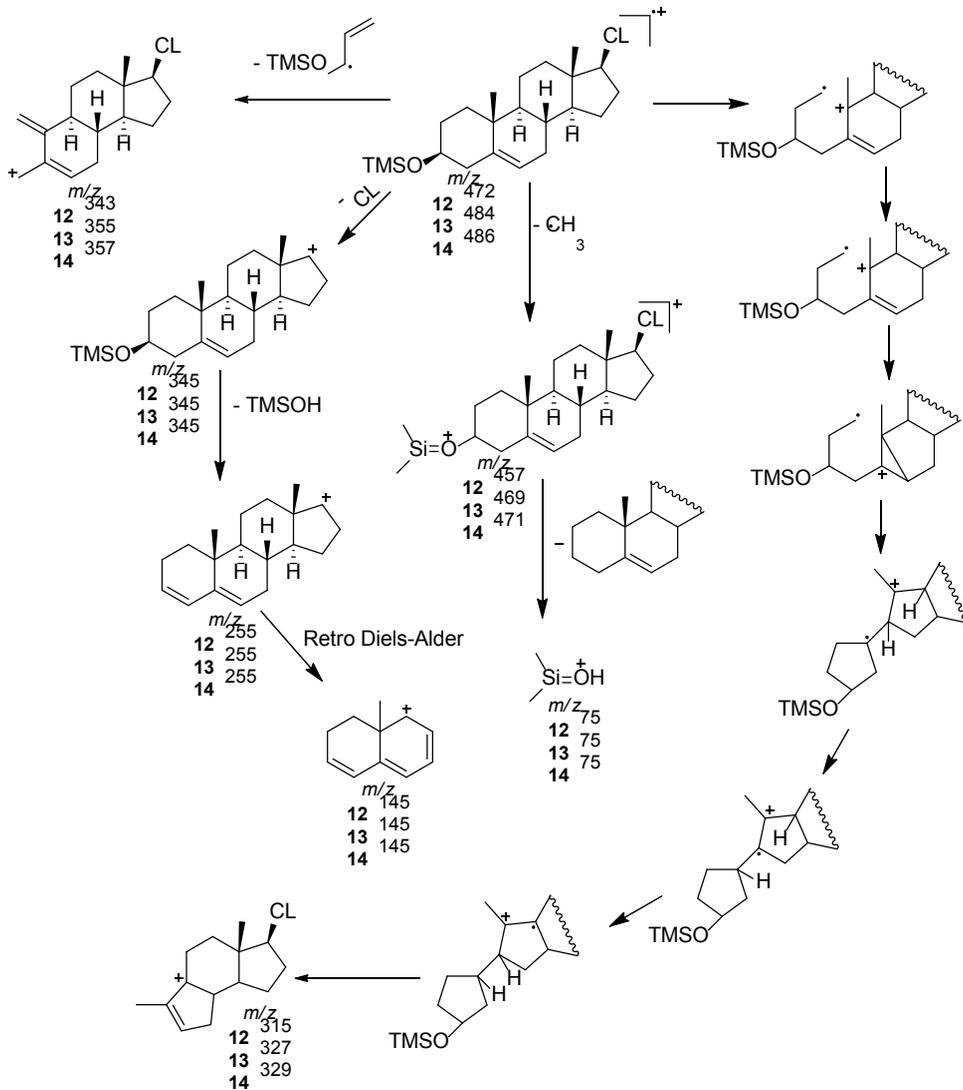


Figura 6: Proposta de fragmentação dos esteroides siliados (12-14). Adaptado de DIEKMAN; DJERASSI, 1967 e WYLLE, 1977. CL: cadeia lateral

O composto **15** identificado como estigmast-7-en-3-ol apresentou íon *pseudomolecular* com m/z 486 $[M]^+$, com íons fragmentos m/z 471 $[M-15]^+$, 396 $[M-90]^+$, 381 $[M-15-90]^+$ 345 $[M-CL]^+$ que correspondem a perda de grupos metila (CH_3), trimetilsilanol (TMSOH), trimetilsilanol + metila (TMSOH+ CH_3) e da cadeia lateral (CL), respectivamente. No entanto, os fragmentos m/z $[M-129]^+$ e 329, que ocorrem nos compostos **12-14**, não foram observados, o que sugere a presença de um esteroide Δ^7 , conforme Figura 7 (PELILLO et al., 2003; KNIGHTS, 1967).

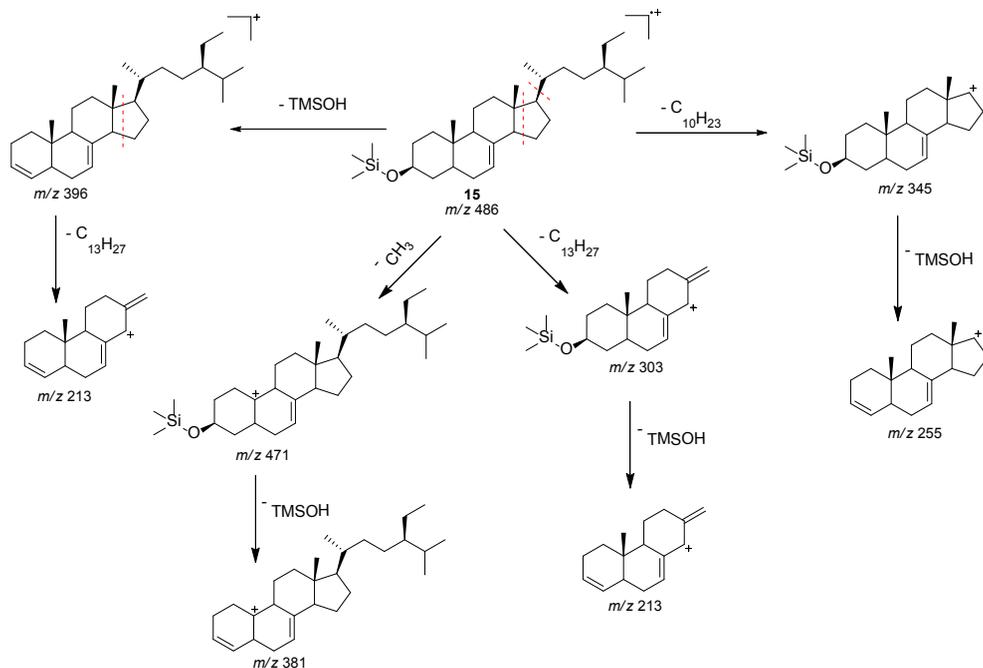


Figura 7: Proposta de fragmentação do estigmast-7-en-3-ol (15). Adaptada de PELILLO et al., 2003

Os esteroides **12-14** já foram relatados em estudos anteriores no gênero *Senna*, enquanto estigmast-7-en-3-ol (**15**) está sendo relatados pela primeira vez neste gênero (NEVES et al., 2017).

4 | CONCLUSÃO

O estudo químico das sementes de *Senna acuruensis* possibilitou a identificação dos ésteres metílicos e etílicos de ácidos graxos **1-10**, o hidrocarboneto **11** e quatro esteroides **12-15**. O composto **15** está sendo relatado pela primeira vez no gênero *Senna*. Os resultados obtidos contribuem para o conhecimento da composição química da espécie *S. acuruensis*.

AGRADECIMENTOS

O autor agradece a CAPES, CNPq, INCTBioNat e UFPI pelo apoio financeiro e pela bolsa de R. F. Santiago.

REFERÊNCIAS

ADAM, I. A.; HAGR, T. E. GC-MS analysis of chemical constituents from chloroform extracts of *Calotropis procera* (Ait.) R. Br (Asclepiadaceae) roots collected in Sudan. **Open Science Journal of Analytical Chemistry**, v. 4, n. 2, p. 20-24, 2019.

CAREY, F. A. **Química orgânica**. 7. ed, Porto Alegre: Bookman, 2011.

CARVALHO, A. A.; FREITAS, J. S.; SANTOS, L. R.; ARAÚJO, B. Q.; CHAVES, M. H. Identificação de isoprenoides na fração hexânica das folhas de *Machaerium acutifolium* por CG-EM. In: FRANCISCO, A. L. O. (org.). **Avanços científicos, tecnológicos e de inovação na botânica**. Ponta Grossa: Atena Editora, p. 24-34, 2020.

CARVALHO, A. A.; SANTOS, L. R.; FREITAS, J. S.; CHAVES, M. H. Isoflavonoides da tribo dalbergieae: uma contribuição quimiosistemática para a subfamília papilionoideae. **Química Nova**, v. 43, n. 9, p. 1294-1311, 2020.

COQUEIRO, A.; REGASINI, L. O.; LEME, G. M.; POLESE, L.; NOGUEIRA, C. T.; DEL CISTIA, M. L.; BOLZANI, V. D. S. Leishmanicidal activity of *Brosimum glaziovii* (Moraceae) and chemical composition of the bioactive fractions by using high-resolution gas chromatography and GC-MS. **Journal of the Brazilian Chemical Society**, v. 25, n. 10, p.1839-1847, 2014.

DIEKMAN, J.; DJERASSI, C. Mass spectrometry in structural and stereochemical problems. CXXV. Mass spectrometry of some steroid trimethylsilyl ethers. **The Journal of organic chemistry**, v. 32, n. 4, p. 1005-1012, 1967.

DHIVYA, R.; MANIMEGALAI, K. Preliminary phytochemical screening and GC-MS profiling of ethanolic flower extract of *Calotropis gigantea* Linn.(Apocynaceae). **Journal of Pharmacognosy and Phytochemistry**, v. 2 n. 3, p. 28-32, 2013.

DOYLE, J. J.; LUCKOW, M. A. The Rest of the Iceberg. Legume Diversity and Evolution in a Phylogenetic Context. **Plant Physiology**, v. 131, p. 900-910, 2003.

FARIAS, R. R. S.; CASTRO, A. A. J. F. Fitossociologia de trechos da vegetação do complexo de Campo Maior, Campo Maior, PI, Brasil. **Acta Botanica Brasilica**. v. 18, p. 949-963, 2004.

FORZZA, R. C.; BAUMGRATZ, J. F. A.; BICUDO C. E. M.; CARVALHO JR, A. A.; COSTA, A.; COSTA, D. P.; HOPKINS, M.; LEITMAN, P. M.; LOHMANN, L. G.; MAIA, L. C.; MARTINELLI, G.; MENEZES, M.; MORIM M. P.; NADRUZ-COELHO, M. A.; PEIXOTO, A. L.; PIRANI, J. R.; PRADO, J.; QUEIROZ, L. P.; SOUZA, V. C.; STEHMANN, J. R.; SYLVESTRE, L. S.; WALTER, B. M. T.; ZAPPI, D. **Catálogo de plantas e fungos do Brasil**. Instituto de Pesquisas Jardim Botânico do Rio de Janeiro, 2010a.

HASSAN, A.; RASHEED, M.; ALI, M.; HASSAN, S.; NAZIM, U.; ISHRAT, G.; AHMED, M. Identification of fatty acids and fatty acid esters from ethyl acetate bark extract of *holoptelea integrifolia* (roxb.) Planch by GC-MS. **World Journal of Pharmacy and Pharmaceutical Sciences**, v. 8, n. 3, p. 164-174, 2019.

IRWIN, H. S.; BARNEBY, R. C. **The American Cassiinae: A synoptical revision of Leguminosae – Tribe Cassieae subtribe Cassiinae in the New World**. Memoirs of the New York Botanical Garden. v. 35, parte 1, 1982a.

JABBAR, A. ALI, A.; TAWAB, A.; IQBAL, M. Fatty Acid Profiling of Lipid A Isolated from Indigenous Salmonella Typhi Strain by Gas Chromatography Mass Spectrometry. **Journal of the Chemical Society of Pakistan**, v. 36, n. 1, 2014.

KNIGHTS, B. A. Identification of plant sterols using combined GLC/mass spectrometry. **Journal of Chromatographic Science**, v. 5, n. 6, p. 273-282, 1967.

LEWIS, G. P.; SCHIRIRE, B.; MACKINDER, B.; LOCK, M. **Legumes of the World**. London: Royal Botanic Gardens, Kew. p. 577, 2005.

LPWG [Legume Phylogeny Working Group]. A new subfamily classification of the Leguminosae based on a taxonomically comprehensive phylogeny. **Taxon**. v. 66, n. 1, p. 44–77, 2017.

MENDES, R. A.; CASTRO, A. A. J. F. Vascular flora of semi-arid region, São José do Piauí, state of Piauí, Brazil. **Journal of species lists and distribution**. v. 6, p. 39-44, 2010.

NEVES, A. M.; COSTA, O. S.; COUTINHO, M. G. S.; SOUZA, E. B.; SANTOS, H. S.; SILVA, M. G. V.; FONTENELLE, R. O. S. Caracterização química e o potencial antimicrobiano de espécies do gênero *Senna* Mill (Fabaceae). **Revista Virtual de Química**, v. 9, p. 2506-2538, 2017.

PAVIA, D. L.; LAMPMAN, G. M.; KRIZ, G. S.; VYVYAN, J. R. **Introdução à espectroscopia**. 5. ed. São Paulo: Cengage Learning, 2015.

PELILLO, M.; IAFELICE, G.; MARCONI, E.; CABONI, M. F. Identification of plant sterols in hexaploid and tetraploid wheats using gas chromatography with mass spectrometry. **Rapid communications in mass spectrometry**, v. 17, n. 20, p. 2245-2252, 2003.

PRYTZYK, E.; DANTAS, A. P.; SALOMÃO, K.; PEREIRA, A. S.; BANKOVA, V. S.; DE CASTRO, S. L.; NETO, F. R. A. Flavonoids and trypanocidal activity of *Bulgarian propolis*. **Journal of Ethnopharmacology**, v. 88, n. 2-3, p.189-193, 2003.

SANTOS, L. R.; CARVALHO, A. A.; SANTIAGO, R. F.; CHAVES, M. H. Alcaloides do gênero *Senna* e potencial farmacológico. In: FARIA, A. N. (org.). **Princípios físico químicos em farmácia**. Ponta Grossa: Atena Editora, p. 1-13. 2019

SILVERSTEIN R. M.; WEBSTER, F. X.; KIEMLE, D. J. **Identificação espectrométrica de compostos orgânicos**. 7. ed. Rio de Janeiro: LTC, 2007.

VEIGAS JUNIOR, C.; PIVATTO, M.; REZENDE, A.; HAMERSKI, L.; SILVA, D. H. S.; BOLZANI, V. S. (–)-7-Hydroxycassine: a new 2,6-Dialkylpiperidin-3-ol Alkaloid and other Constituents Isolated from Flowers and Fruits of *Senna spectabilis* (Fabaceae). **Journal of the Brazilian Chemical Society**, v. 24, n. 2, p. 230-235, 2013.

VOLLHARDT, P.; SCHORE, N. **Química orgânica estrutura e função**. 6. ed. Porto Alegre: Bookman, 2013.

WYLLIE, S. G. Electron impact induced fragmentation of cholesterol and related C-5 unsaturated steroids. **Journal of Organic Chemistry**, v. 42, 1977.

WYLLIE, S. G.; AMOS, B. A.; TOKES, L. Electron impact induced fragmentation of cholesterol and related C-5 unsaturated steroids. **The Journal of organic chemistry**, v. 42, n. 4, p. 725-732, 1977.

CAPÍTULO 8

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

Data de aceite: 10/01/2022

Data de submissão: 15/12/2021

Júnio Gonçalves da Silva

Departamento de Química, Universidade
Federal de Minas Gerais
Belo Horizonte-MG, Brasil
<https://orcid.org/0000-0002-3714-3633>

Bianca Lana de Sousa

Departamento de Química, Universidade
Federal de Viçosa
Viçosa-MG, Brasil
<https://orcid.org/0000-0002-7801-490X>

Liseth Suárez Osorio

Departamento de Química, Universidade
Federal de Viçosa
Viçosa-MG, Brasil
<https://orcid.org/0000-0002-7589-7567>

Dayana Alves Rodrigues

Departamento de Química, Universidade
Federal de Viçosa
Viçosa-MG, Brasil
<http://lattes.cnpq.br/9589147578848483>

Maria Cecília Fernandes Dias

Departamento de Química, Universidade
Federal de Viçosa
Viçosa-MG, Brasil
<http://lattes.cnpq.br/2228288647207275>

Gabriela Milane Furlani

Departamento de Química, Universidade
Federal de Viçosa
Viçosa-MG, Brasil
<http://lattes.cnpq.br/3911500941572096>

Naiara Chaves Silva

Departamento de de Microbiologia e
Imunologia, Universidade Federal de Alfenas
Alfenas-MG, Brasil
<https://orcid.org/0000-0001-7731-7493>

Amanda Latércia Tranches Dias

Departamento de de Microbiologia e
Imunologia, Universidade Federal de Alfenas
Alfenas-MG, Brasil
<https://orcid.org/0000-0002-5359-4450>

Marcelo Henrique dos Santos

Departamento de Química, Universidade
Federal de Viçosa
Viçosa-MG, Brasil
<https://orcid.org/0000-0003-1440-4340>

RESUMO: A modificação química de compostos orgânicos, incluindo nitração, pode modular suas propriedades físico-químicas, como a solubilidade, estabilidade e toxicidade. Neste trabalho, foi proposta a nitração de benzofenonas e xantonas e avaliação de seus efeitos contra leveduras do gênero *Candida*, baseado nas atividades antimicrobianas previamente reportadas para essas classes de moléculas. Houve ganho de atividade em todos os seis derivados em relação aos precursores (não ativos contra nenhum fungo nas concentrações testadas). As benzofenonas nitradas e a xantona 1,3-dihidroxi-9*H*-xanten-9-ona (**7**) exibiram elevada seletividade. A xantona 1,3-dihidroxi-4-nitro-9*H*-xanten-9-ona (**8**) foi: i) menos ativa contra *Candida krusei* ATCC 6258 do que seu precursor (**7**); ii) ativa contra quatro das cinco

leveduras testadas; iii) mais ativa contra *Candida glabrata* ATCC 90030 do que o fluconazol, usado como controle positivo. Assim, os derivados de benzofenonas e xantonas merecem ser estudados na síntese dirigida de inibidores de microrganismos.

PALAVRAS-CHAVE: Benzofenonas; Xantonas; Nitração; Atividade antifúngica.

INCREASE IN ACTIVITY AGAINST *Candida* spp. BY NITRATION OF BENZOPHENONES AND XANTHONES

ABSTRACT: Chemical modification of organic compounds, including nitration, can modulate their physicochemical properties, such as solubility, stability and toxicity. In this work, the nitration of benzophenones and xanthenes and evaluation of their effects against *Candida* genus yeasts were proposed, based on the antimicrobial activities previously reported for these classes of molecules. There was activity gain in all six derivatives in relation to precursors (not active against any fungus at the concentrations tested). Nitrated benzophenones and 1,3-dihydroxy-9*H*-xanthen-9-one xanthone (**7**) exhibited high selectivity. The 1,3-dihydroxy-4-nitro-9*H*-xanthen-9-one xanthone (**8**) was: i) less active against *Candida krusei* ATCC 6258 than its precursor (**7**); ii) active against four of the five yeasts tested; iii) more active against *Candida glabrata* ATCC 90030 than fluconazole, used as a positive control. Thus, benzophenone and xanthenes derivatives deserve to be studied in the directed synthesis of microorganism inhibitors.

KEYWORDS: Benzophenones; Xanthenes; Nitration; Antifungal activity.

1 | INTRODUÇÃO

Antifúngicos são as principais moléculas de ação contra fungos utilizadas em aplicações clínicas em humanos e animais (AWAD et al., 2018; RODRIGUES; RODRIGUES; HENRIQUES, 2019). Azóis, polienos, alenosamina e equinocandinas são os agentes antifúngicos mais utilizados no tratamento de infecções por *Candida* (AWAD et al., 2018; BROWN et al., 2012). Tais infecções podem ser graves e estão associadas aos altos períodos de internação e custos, além de elevadas taxas de mortalidade, principalmente em pacientes imunocomprometidos (BROWN et al., 2012). Por isso, antifúngicos são atualmente recomendados como medida profilática em indivíduos de alto risco (CANNON et al., 2009).

Apesar dos antimicrobianos serem eficazes e possuírem grande espectro de ação, o uso excessivo pode representar problemas graves. Dentre eles, efeitos colaterais, toxicidade e o desenvolvimento de resistência, intrínseca ou adquirida (BROWN et al., 2012; RODRIGUES; RODRIGUES; HENRIQUES, 2019). O uso indiscriminado de antimicrobianos tem sido associado à crescente incidência de infecções antifúngicas causadas por *Candida*, tais como *C. glabrata*, *C. parapsilosis*, *C. tropicalis* e *C. krusei*, além da *C. albicans* (AWAD et al., 2018; YANG et al., 2003).

O surgimento de linhagens resistentes e de resistência cruzada tem recebido grande atenção, uma vez que pode comprometer o uso de inibidores como agentes terapêuticos.

Diante disso, estratégias alternativas para combater microrganismos patogênicos têm sido pesquisadas, tais como modificações químicas de núcleos biologicamente ativos (DIAS et al., 2012). Como muitos medicamentos comerciais são derivados de produtos naturais, o estudo desses compostos é promissor para a descoberta de agentes antimicrobianos (LIN et al., 2018). Neste contexto, benzofenonas foram relatadas por apresentar atividade antimicrobiana contra o fungo *Sporothrix schenckii* e contra bactérias de campo que afetam aves, como *Escherichia coli*, *Salmonella enterica* e *Staphylococcus aureus* (ARANDA et al., 2019; OLIVEIRA et al., 2017; SURANA et al., 2018). Alterações na lipofilicidade da guttiferona-A, derivado de benzofenona poliisoprenilada naturalmente encontrado em plantas da espécie *Garcinia brasiliensis*, demonstraram atividade antimicrobiana contra fungos e bactérias patogênicos, tanto Gram-positivas quanto Gram-negativas (DIAS et al., 2012).

Tendo conhecimento das atividades antimicrobianas atribuídas às benzofenonas, este trabalho objetivou a síntese de novas benzofenonas e xantonas nitradas e avaliação do potencial fungicida contra *C. albicans* SC5314, *C. tropicalis* ATCC 750, *C. krusei* ATCC 6258, *C. glabrata* ATCC 90030 e *C. parapsilosis* ATCC 22019.

2 | METODOLOGIA

2.1 Síntese das benzofenonas e xantonas nitradas

A 2-hidróxibenzofenona (**1**) e a 2,4-dihidróxibenzofenona (**2**) foram adquiridas da Sigma-Aldrich (St. Louis, MO, Estados Unidos) e foram utilizadas como materiais de partida para as demais benzofenonas.

A nitração das benzofenonas e xantonas (**3-6**; **8**) foi feita em um balão sob agitação e à temperatura ambiente, sendo adicionados 150 mg (1 equiv.) da benzofenona ou xantona precursora, 4,0 mL de ácido acético glacial e, lentamente, 6 equivalentes de ácido nítrico 65%. Após adição, a reação foi mantida em agitação até observação do consumo do material de partida por cromatografia em camada delgada (CCD). Após o término, a reação foi vertida em um funil de extração líquido-líquido contendo água e acetato de etila gelados. A fase orgânica foi separada e lavada 2 vezes com água fria, seca com sulfato de magnésio anidro e concentrada em evaporador rotatório de pressão reduzida. O material obtido da evaporação dos voláteis foi cromatografado, utilizando sílica gel como fase estacionária e diferentes misturas de acetato de etila, hexano e metanol como fase móvel, a depender do produto.

A síntese da 1,3-dihidroxi-9*H*-xanten-9-ona (**7**) foi realizada em um balão contendo 500 mg de floroglucinol (1 equiv.), 547 mg de ácido salicílico (1 equiv.), 540 mg de ZnCl₂ anidro (1 equiv.) e POCl₃ como solvente (6 mL). A mistura reacional permaneceu sob agitação, atmosfera de nitrogênio e refluxo por 8 horas. Posteriormente, a solução foi transferida para um bquer contendo gelo, o material foi extraído com acetato de etila e

a fase orgânica foi lavada 2 vezes com água fria, seca com sulfato de magnésio anidro e concentrada em evaporador rotatório de pressão reduzida. O material obtido da evaporação dos voláteis foi cromatografado, utilizando sílica gel como fase estacionária e acetato de etila:hexano 2:1 (v/v) como fase móvel.

2.2 Atividade antifúngica

A atividade antifúngica foi realizada segundo metodologia de microdiluição em caldo, conforme as normas estabelecidas pelo CLSI (2008; 2012) para leveduras, com modificações sugeridas pelo EDef 7.2 (EUCAST, 2008).

Os fungos utilizados foram leveduras do gênero *Candida* spp.: *C. albicans* SC5314, *C. tropicalis* ATCC 750, *C. krusei* ATCC 6258, *C. glabrata* ATCC 90030 e *C. parapsilosis* ATCC 22019. O cultivo dos fungos foi realizado a 30 °C, overnight, em meio Mueller-Hinton (MH, HIMEDIA, Mumbai, India).

As substâncias foram avaliadas nas concentrações de 100; 60; 30; 15; 7,5; 3,75 $\mu\text{g mL}^{-1}$ e as determinações das concentrações inibitórias mínimas de 50% do crescimento (IC_{50}) foram realizadas segundo critérios interpretativos dos mesmos documentos citados acima e baseadas no valor máximo de crescimento, conforme observado na coluna da microplaca reservada para o controle positivo do crescimento fúngico. Além do controle positivo de crescimento, composto por meio de cultura e microrganismo, o ensaio também envolveu controle de esterilidade do meio e controle interno do ensaio, com a utilização do antifúngico fluconazol. O experimento foi realizado em duas repetições biológicas, com triplicatas técnicas, em placa de microdiluição contendo 96 poços. A incubação foi realizada a 30 °C durante 48 h e a inibição do crescimento do microrganismo foi determinada por leitura de absorvância a 530 nm. Destaca-se que, conforme as especificações nos documentos padrões, é proposta e aceita variação na escala de concentrações inibitórias, desde que as concentrações estejam compreendidas em um valor correspondente a +/- 2log2 diluição. Segundo esse conceito, concentrações em valores absolutos diferentes, desde que compreendidos dentro da faixa descrita anteriormente, são consideradas semelhantes e coincidentes e, assim, a classificação do perfil de sensibilidade versus resistência não será alterada. Assim, médias ou desvios não foram aplicáveis aos resultados e, dessa forma, os mesmos foram apresentados em valores absolutos.

3 | RESULTADOS E DISCUSSÃO

As moléculas orgânicas apresentam uma diversidade de aplicações na medicina, na agricultura e na indústria, com destaque na formulação de medicamentos, agroquímicos e cosméticos. Após a obtenção destes compostos, de forma natural, sintética ou semi-sintética, uma das maiores dificuldades para a utilização dos mesmos é modular sua solubilidade em meios biológicos, facilitando o acesso ao alvo. Uma alternativa para contornar este problema é a modificação estrutural destes compostos.

As benzofenonas foram escolhidas devido à gama de atividades atribuídas a elas, incluindo efeitos antimicrobianos (SURANA et al., 2018). Somado a isso, compostos contendo grupo nitro tem demonstrado potencial aplicação no controle de fungos patogênicos oportunistas humanos, como *C. albicans* e *Candida* spp. não *albicans* (OLEA et al., 2019a; OLEA et al., 2019b; CARRASCO et al., 2012). De fato, Olea et al. (2019a) demonstraram que a inserção do grupo NO₂ diminui o valor de IC₅₀ em um fator de 2,5–4,5 ppm e a substituição deste grupamento por grupos amina ou acetamida causa perda de efeito antifúngico. Tais autores ainda indicaram que, devido a polaridade dos nitrocompostos, o mecanismo de ação de substâncias nitradas não deve ser associado em grande parte à membrana plasmática. Naquele trabalho foi sugerido que a ação antifúngica está relacionada ao potencial efeito retirador de elétrons do NO₂, que contribui para reações com ligações duplas substituídas por outros grupos retiradores de elétrons, e produção de espécies reativas de oxigênio catalisada por enzimas.

A nitração foi feita visando: i) modular as propriedades físico-químicas, tais como estabilidade, solubilidade e toxicidade; ii) produzir derivados biologicamente mais ativos do que seus precursores; iii) adicionar bioatividades previamente não descritas para as benzofenonas de partida.

3.1 Síntese

As benzofenonas disponíveis comercialmente foram submetidas à substituição eletrofílica aromática, obtendo os produtos **3-6** com rendimentos entre 15 a 41% (Figura 1). Posteriormente, a xantona **7** foi obtida do ácido salicílico e sua nitração gerou o produto **8**. A Figura 2 mostra a estrutura química de todos os compostos orgânicos, sintéticos ou não, alvos de estudo do presente trabalho.

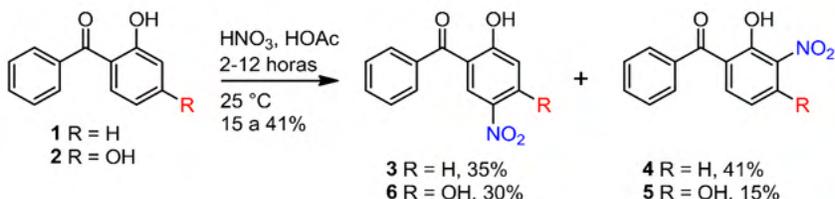


Figura 1 - Condições reacionais e rendimentos para nitração das benzofenonas **1** e **2**.

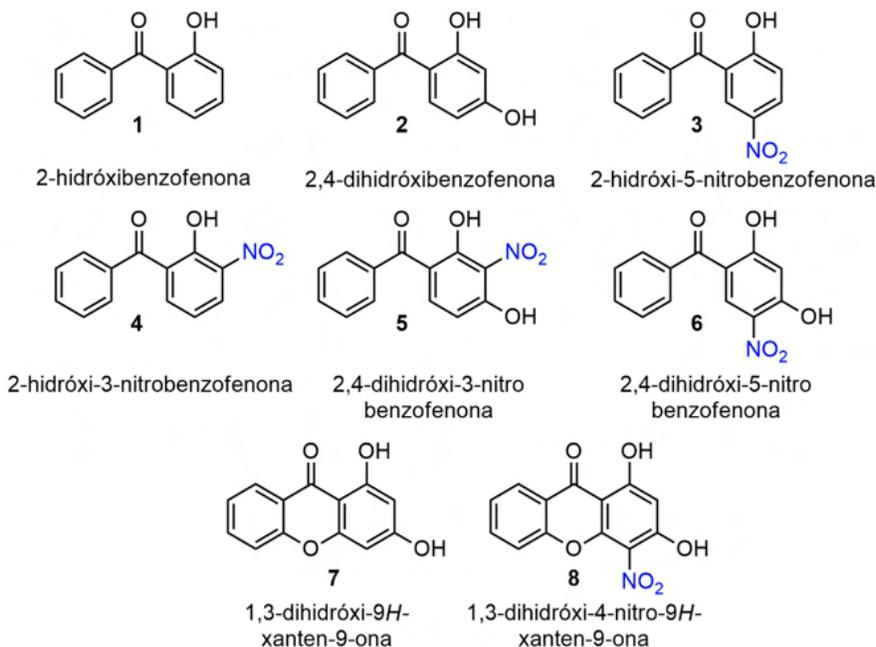


Figura 2 - Estrutura química das benzofenonas (1 a 6) e xantonas (7 e 8) avaliadas frente a ação fungicida.

3.2 Atividade antifúngica

As atividades antifúngicas dos compostos 1-8 foram avaliadas contra leveduras do gênero *Candida* spp., em concentrações entre 100 e 3,75 $\mu\text{g mL}^{-1}$. Os valores de IC_{50} são apresentados na Tabela 1.

Código	<i>C. albicans</i> SC5314	<i>C. tropicalis</i> ATCC 750	<i>C. glabrata</i> ATCC 90030	<i>C. krusei</i> ATCC 6258	<i>C. parapsilosis</i> ATCC 22019
1	-	-	-	-	-
2	-	-	-	-	-
3	-	100	-	-	-
4	-	-	100	-	-
5	-	-	-	100	100
6	100	-	-	-	-
7	-	-	-	60	-
8	60	60	30	100	-
Fluconazol	1	1	32	16	2

Tabela 1 - Valores de IC_{50} ($\mu\text{g mL}^{-1}$) para a atividade fungicida. (-) indica ausência de atividade nas concentrações avaliadas. Fluconazol é o controle positivo.

Os precursores 2-hidróxibenzofenona e 2,4'-di-hidróxibenzofenona não apresentaram inibição contra nenhum fungo, nas concentrações testadas.

As benzofenonas nitradas (**3-6**) foram ativas contra pelo menos uma levedura testada, indicando que a modificação estrutural com substituição de um hidrogênio por um NO₂ favoreceu a atividade antifúngica. Os compostos **3-6** inibiram 50% do crescimento de *Candida* spp. na concentração de 100 µg mL⁻¹.

A benzofenona **5** apresentou o maior espectro de ação, sendo ativa contra *C. krusei* ATCC 6258 e *C. parapsilosis* ATCC 22019. Interessantemente, nenhuma outra substância pertencente à essa classe apresentou atividade contra estes fungos. De fato, parece haver uma elevada seletividade entre benzofenona e *Candida*-alvo, ou seja, cada benzofenona, à exceção da **5**, inibiu apenas um gênero de *Candida*, e tal gênero foi inibido apenas por uma benzofenona. Assim, embora nenhuma benzofenona tenha tido atividade elevada como o fluconazol, usado como controle positivo, todas foram mais seletivas, uma grande vantagem no contexto de resistência antimicrobiana.

A xantona **7**, além de ter apresentado seletividade contra *C. krusei* ATCC 6258, foi 1,66 vezes mais ativa contra esta levedura do que o composto **5**. A nitração de **7** gerou perda de atividade contra *C. krusei* ATCC 6258. Em contrapartida, **8** foi capaz de inibir quatro das cinco leveduras testadas, sendo, inclusive, mais ativa contra *C. glabrata* ATCC 90030 do que o controle positivo.

Oya et al. (2015) isolaram benzofenonas preniladas de *Triadenum japonicum* e avaliaram suas atividades antibacterianas e antifúngicas. O (-)-Nemorosonol apresentou valores de IC₅₀ iguais a 8, 16 e 32 µg mL⁻¹ contra *Trichophyton mentagrophytes*, *Aspergillus niger* e *C. albicans*, respectivamente. Os valores de IC₅₀ foram inferiores aos apresentados no presente trabalho.

O estudo de benzofenonas como agentes antifúngicos são escassos e poucos gêneros de fungos são utilizados nesses trabalhos. Entretanto, os produtos naturais, bem como seus derivados, são candidatos em potencial como fungicidas e não devem ser descartados na síntese dirigida de novos antimicrobianos.

4 | CONCLUSÃO

Embora os derivados tenham apresentado, no geral, moderada atividade antifúngica, a pesquisa mostra-se interessante porque aponta novos modelos estruturais, que necessitam ser aprimorados e podem ser ferramentas úteis no combate a cepas resistentes aos fungicidas já utilizados comercialmente.

AGRADECIMENTOS

Os autores agradecem à FAPEMIG (Fundação de Amparo a Pesquisa do Estado de Minas Gerais), CAPES (Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior),

CNPq (Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico) e FINEP (Financiadora de Estudos e Projetos) pelo apoio financeiro ao desenvolvimento do projeto.

REFERÊNCIAS

ARANDA, Martha Isabel Realpe et al. Antimicrobial and Synergistic Activity of 2,2',4-Trihydroxybenzophenone Against Bacterial Pathogens of Poultry. **Frontiers in Microbiology**, v. 10, p. 490, 2019. DOI: 10.3389/fmicb.2019.00490

AWAD, Lyn et al. Correlation between antifungal consumption and distribution of *Candida* spp. in different departments of a Lebanese hospital. **Journal of infection in developing countries**, v. 18, n. 1, p. 589, 2018. DOI: 10.1186/s12879-018-3512-z.

BROWN, Gordon D. et al. Hidden killers: Human fungal infections. **Science Translational Medicine**, v. 4, n. 165, 2012. DOI:10.1126/scitranslmed.3004404

CARRASCO, Héctor et al. Antifungal activity of eugenol analogues. Influence of different substituents and studies on mechanism of action. **Molecules**, v. 17, n. 1, p. 1002–1024, 2012. DOI: 10.3390/molecules17011002.

CANNON, Richard D. et al. Efflux-mediated antifungal drug resistance. **Clinical Microbiology Reviews**, v. 22, n. 2, p. 291–321, 2009. DOI:10.1128/CMR.00051-08

CLINICAL AND LABORATORY STANDARDS INSTITUTE (CLSI). Reference Method for Broth Dilution Antifungal Susceptibility Testing of Yeasts - **Norma aprovada: CLSI documento M27-A3**. 3. ed. (ISBN 1-56238-666-2). Wayne, Pennsylvania, USA: Clinical Laboratory Standards Institute, 2008.

CLINICAL AND LABORATORY STANDARDS INSTITUTE (CLSI). Reference Method for broth dilution antifungal susceptibility testing of yeasts - **Norma aprovada: CLSI documento M27-S4**. 3. ed. (ISBN 1-56238-000). Wayne, Pennsylvania, USA: Clinical Laboratory Standards Institute, 2012.

DIAS, Kris S.T. et al. Semisynthesis and antimicrobial activity of novel guttiferone-A derivatives. **Bioorganic and Medicinal Chemistry**, v. 20, n. 8, p. 2713–2720, 2012. DOI: 10.1016/j.bmc.2012.02.023

EUROPEAN COMMITTEE ON ANTIBIOTIC SUSCEPTIBILITY TESTING (EUCAST); Method for the determination of minimum inhibitory concentration (MIC) by broth dilution of fermentative yeasts - **Norma aprovada: EUCAST documento E.Def. 7.2**. Taufkirchen, Alemanha: European Society of Clinical Microbiology and Infectious Diseases, 2008.

LIN, Zihua et al. Total synthesis and antimicrobial evaluation of natural albomycins against clinical pathogens. **Nature Communications**, v. 9, n. 1, p. 3445, 2018. DOI: 10.1038/s41467-018-05821-1.

OLEA, Andrés F. et al. Antifungal activity of eugenol derivatives against *Botrytis cinerea*. **Molecules**, v. 24, n. 7, p. 1239, 2019a. DOI: 10.3390/molecules24071239

OLEA, Andrés F. et al. Synthesis and *in vitro* growth inhibition of 2-allylphenol derivatives against *Phytophthora cinnamomi* Rands. **Molecules**, v. 24, n. 22, p. 4196, 2019b. DOI: 10.3390/molecules24224196.

OLIVEIRA, Adam H. et al. Anti-inflammatory activity of *Vismia guianensis* (Aubl.) Pers. extracts and antifungal activity against *Sporothrix schenckii*. **Journal of Ethnopharmacology**, v. 195, p. 266–274, 2017. DOI: 10.1016/j.jep.2016.11.030.

OYA, Atsushi et al. Prenylated Benzophenones from *Triadenum japonicum*. **Journal of Natural Products**, v. 78, n. 2, p. 258–264, 2015. DOI: 10.1021/np500827h

RODRIGUES, Célia F.; RODRIGUES, Maria Elisa; HENRIQUES, Mariana. *Candida* sp. Infections in Patients with Diabetes Mellitus. **Journal of Clinical Medicine**, v. 8, n. 1, p. 76, 2019. DOI: 10.3390/jcm8010076.

SURANA, Khemchand et al. Benzophenone: A ubiquitous scaffold in medicinal chemistry. **MedChemComm**, v. 9, n. 11, p. 1803–1817, 2018. DOI: 10.1039/c8md00300a

YANG, C W et al. Prevalence of *Candida* Species, Including *Candida dubliniensis*, in Singapore. **Journal of Clinical Microbiology**, v. 41, n. 1, p. 472–474, 2003. DOI: 10.1128/JCM.41.1.472-474.2003.

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 σ na borda, comparado com aquela com ligação π , 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 σ -bonds at the edge, compared to π -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).

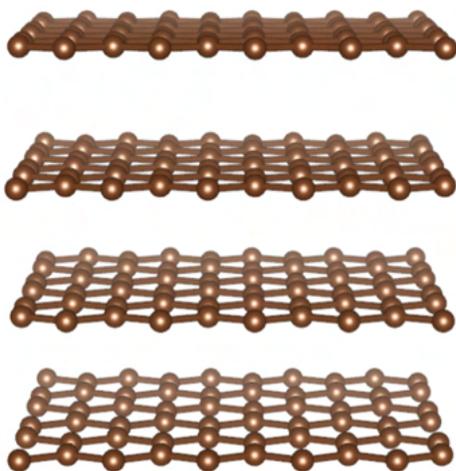


Figura 1: Vista lateral da estrutura da grafite em que as esferas marrons representam os átomos de carbono.

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.

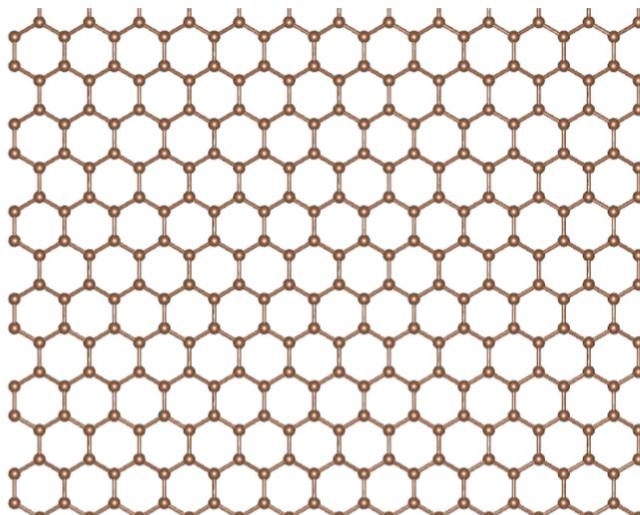


Figura 2: Vista superior da estrutura do grafeno com átomos de carbono representados pelas esferas marrons.

Fonte: Autoria própria

O grafeno é um material extremamente flexível, transparente, apresenta ótima condutibilidade de elétrica (até 2×10^4 S/cm), alta mobilidade eletrônica (2×10^5 $\text{cm}^2/\text{V}\cdot\text{s}$) 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.

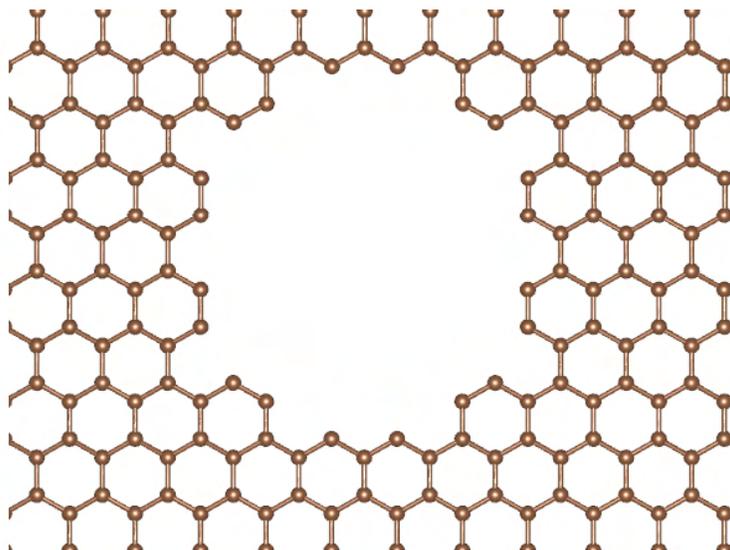


Figura 3: Nanoporo em grafeno considerado para nanofiltragem e dessalinização de água. Os átomos de carbono representados pelas esferas marrons.

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).

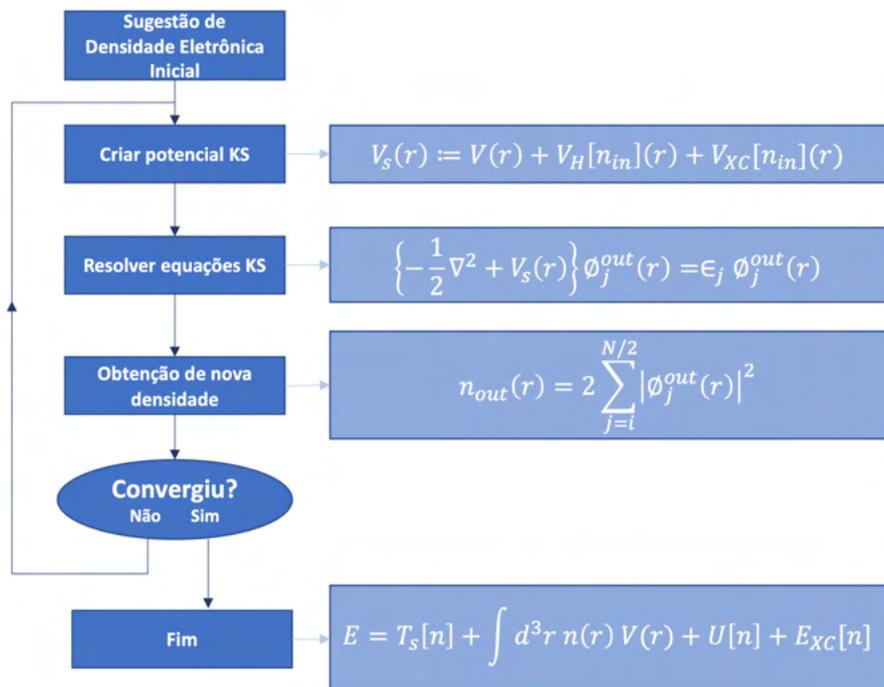


Figura 4: Fluxograma que representa o ciclo autoconsistente da Teoria do Funcional da Densidade.

Fonte: Autoria própria

Com as funções de onda de partícula única (ϕ) 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 ϕ_j não fornecem os níveis de energia do sistema interagente. Entretanto, as funções ϕ_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.

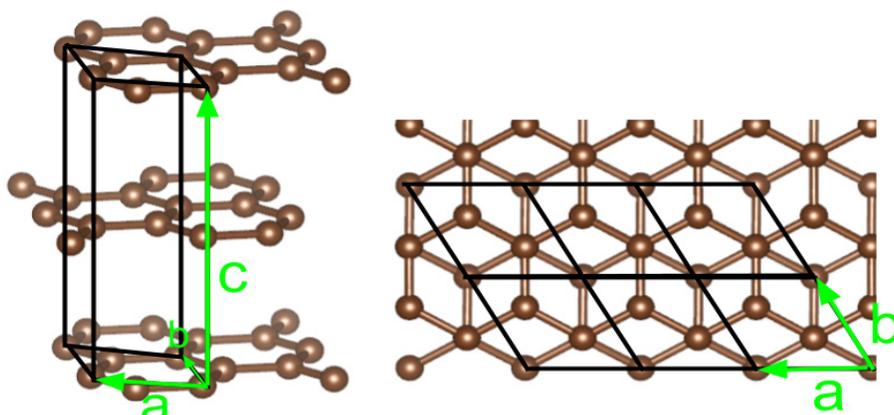


Figura 5: À esquerda: célula unitária hexagonal da grafite em vista lateral. À direita: vista superior (ao longo do vetor c) do grafite. As esferas marrons representam os átomos de carbono, sendo que os vetores a , b e c , em verde, definem a célula unitária.

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 1×10^{-3} Ry/Bohr, faz sentido usar nas simulações um número k de pontos que forneça uma variação de força abaixo deste valor.

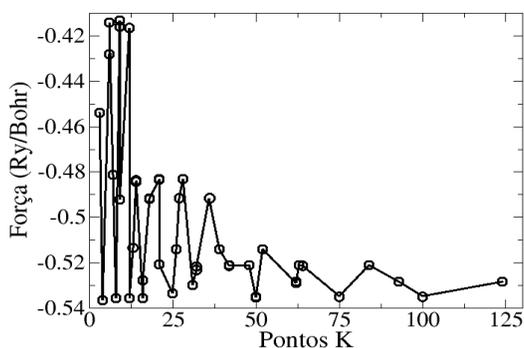


Figura 6: Força em um átomo de carbono do grafeno ao longo da componente cartesiana \hat{i} em função do número de pontos.

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.

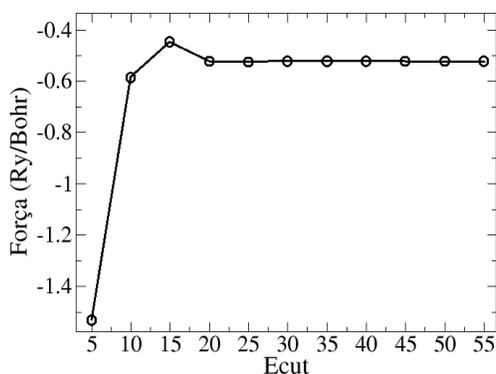


Figura 7: Força em um átomo de carbono do grafeno ao longo da componente cartesiana \hat{i} em função da energia de corte.

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 .

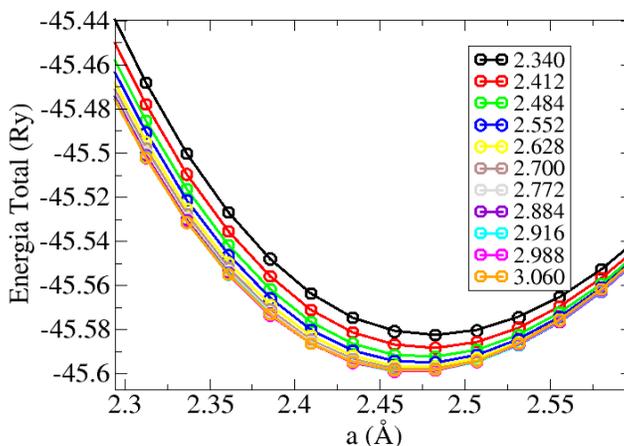


Figura 8: Energia total em função do parâmetro de rede a . As linhas indicam os valores de c/a considerados.

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.

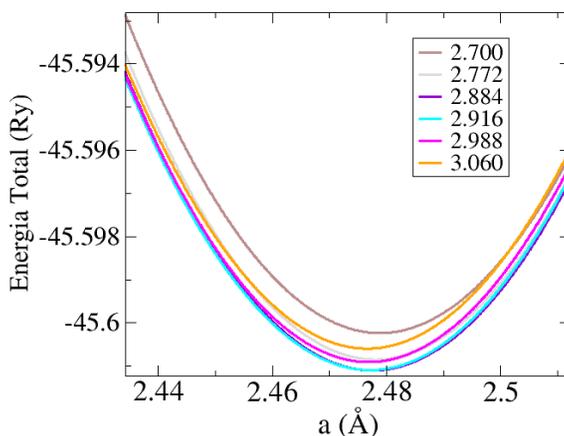


Figura 9: Ajuste quadrático da Energia Total em função do parâmetro de rede a em torno do mínimo. As diferentes curvas representam valores de c/a .

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 σ e π 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 π) e (2) geometria com um átomo de carbono da borda do nanoporo passivado por dois átomos de hidrogênio (presença de ligação σ , 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 σ .

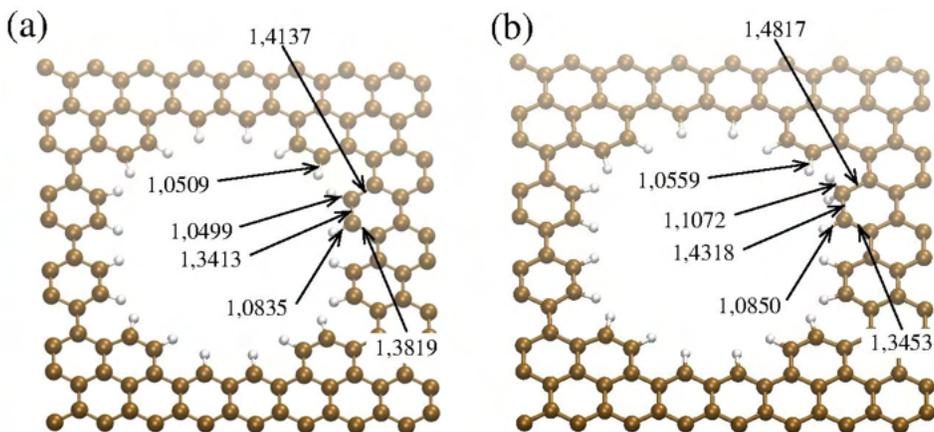


Figura 10: (a) Nanoporo com átomos de carbono de borda passivados com um átomo de hidrogênio. (b) Nanoporo com um átomo de carbono passivado com dois átomos de hidrogênio. As distâncias de ligação apontadas nas imagens estão em Å.

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 σ 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 π ou σ , 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-CaCO₃ 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 

contato@atenaeditora.com.br 

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

www.facebook.com/atenaeditora.com.br 


Ano 2022



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

www.atenaeditora.com.br 

contato@atenaeditora.com.br 

@atenaeditora 

www.facebook.com/atenaeditora.com.br 


Ano 2022