

# O PAPEL DA QUÍMICA

ENTRE AS CIÊNCIAS NATURAIS

2

CLEISEANO EMANUEL DA SILVA PANIAGUA  
(ORGANIZADOR)

# O PAPEL DA QUÍMICA

---

ENTRE AS CIÊNCIAS NATURAIS

2

CLEISEANO EMANUEL DA SILVA PANIAGUA  
(ORGANIZADOR)

**Editora chefe**

Prof<sup>a</sup> Dr<sup>a</sup> Antonella Carvalho de Oliveira

**Editora executiva**

Natalia Oliveira

**Assistente editorial**

Flávia Roberta Barão

**Bibliotecária**

Janaina Ramos

**Projeto gráfico**

Camila Alves de Cremo

Ellen Andressa Kubisty

Luiza Alves Batista

Nataly Evilin Gayde

Thamires Camili Gayde

**Imagens da capa**

iStock

**Edição de arte**

Luiza Alves Batista

2023 by Atena Editora

Copyright © Atena Editora

Copyright do texto © 2023 Os autores

Copyright da edição © 2023 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

Prof<sup>a</sup> Dr<sup>a</sup> Alana Maria Cerqueira de Oliveira – Instituto Federal do Acre

Prof<sup>a</sup> Dr<sup>a</sup> Ana Grasielle Dionísio Corrêa – Universidade Presbiteriana Mackenzie

Prof<sup>a</sup> Dr<sup>a</sup> Ana Paula Florêncio Aires – Universidade de Trás-os-Montes e Alto Douro

Prof. Dr. Carlos Eduardo Sanches de Andrade – Universidade Federal de Goiás

Prof<sup>a</sup> Dr<sup>a</sup> Carmen Lúcia Voigt – Universidade Norte do Paraná

- Prof. Dr. 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  
Prof<sup>a</sup> Dr<sup>a</sup> Érica de Melo Azevedo – Instituto Federal do Rio de Janeiro  
Prof. Dr. Fabrício Menezes Ramos – Instituto Federal do Pará  
Prof. Dr. Fabrício Moraes de Almeida – Universidade Federal de Rondônia  
Prof<sup>a</sup> Dr<sup>a</sup> Glécilla Colombelli de Souza Nunes – Universidade Estadual de Maringá  
Prof<sup>a</sup> Dr<sup>a</sup> Iara Margolis Ribeiro – Universidade Federal de Pernambuco  
Prof<sup>a</sup> 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  
Prof<sup>a</sup> Dr<sup>a</sup> Luciana do Nascimento Mendes – Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia do Rio Grande do Norte  
Prof. Dr. Marcelo Marques – Universidade Estadual de Maringá  
Prof. Dr. Marco Aurélio Kistemann Junior – Universidade Federal de Juiz de Fora  
Prof<sup>a</sup> Dr<sup>a</sup> Maria José de Holanda Leite – Universidade Federal de Alagoas  
Prof. Dr. Miguel Adriano Inácio – Instituto Nacional de Pesquisas Espaciais  
Prof. Dr. Milson dos Santos Barbosa – Universidade Tiradentes  
Prof<sup>a</sup> Dr<sup>a</sup> Natiéli Piovesan – Instituto Federal do Rio Grande do Norte  
Prof<sup>a</sup> Dr<sup>a</sup> Neiva Maria de Almeida – Universidade Federal da Paraíba  
Prof. Dr. Nilzo Ivo Ladwig – Universidade do Extremo Sul Catarinense  
Prof<sup>a</sup> Dr<sup>a</sup> Priscila Tessmer Scaglioni – Universidade Federal de Pelotas  
Prof<sup>a</sup> Dr Ramiro Picoli Nippes – Universidade Estadual de Maringá  
Prof<sup>a</sup> Dr<sup>a</sup> Regina Célia da Silva Barros Allil – Universidade Federal do Rio de Janeiro  
Prof. Dr. Sidney Gonçalo de Lima – Universidade Federal do Piauí  
Prof. Dr. Takeshy Tachizawa – Faculdade de Campo Limpo Paulista

## O papel da química entre as ciências naturais 2

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

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

P214 O papel da química entre as ciências naturais 2 /  
Organizador Cleiseano Emanuel da Silva Paniagua. -  
Ponta Grossa - PR: Atena, 2023.

Formato: PDF  
Requisitos de sistema: Adobe Acrobat Reader  
Modo de acesso: World Wide Web  
Inclui bibliografia  
ISBN 978-65-258-1809-2  
DOI: <https://doi.org/10.22533/at.ed.092231010>

1. Química. I. Paniagua, Cleiseano Emanuel da Silva  
(Organizador). II. Título.

CDD 540

Elaborado por Bibliotecária Janaina Ramos – CRB-8/9166

## 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. Declararam 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.

O e-book: “O papel da química entre as ciências naturais 2” é constituído por cinco capítulos de livros que abordaram: *i)* contextualização do ensino de química; *ii)* técnicas instrumentais aplicadas na identificação de compostos e; *iii)* utilização de um adsorvente modificado aplicado a remediação ambiental.

O primeiro capítulo analisou os pressupostos teóricos das narrativas (auto)biográficas, a partir da apresentação da história de vida de uma professora de química quilombola. Os autores acreditam que entender a própria história se constitui em instrumentalizar a busca pela valorização da própria memória e que esta permaneça viva. Além disso, as narrativas podem apontar para um maior diálogo entre todas as partes que compõem o âmbito escolar.

O capítulo 2 apresentou uma revisão bibliográfica em relação ao conhecimento das estratégias e desafios em relação a análise quantitativa de compostos complexos por Cromatografia Líquida de Alta Eficiência (HPLC). O autor ressaltou a versatilidade da técnica em função da quantificação de analitos de interesse nas mais diversas matrizes.

O terceiro capítulo descreveu a importância da Química Computacional na identificação estrutural de compostos orgânicos a partir de dados: espectroscópicos, cálculos teóricos, métodos computacionais, análises estatísticas e a química quântica. Os autores concluíram que a química computacional é uma ferramenta extremamente útil na elucidação estrutural de compostos orgânicos e facilita na investigação e identificação de novas substâncias orgânicas.

O capítulo 4 apresentou um estudo no qual avaliou-se a importância das atividades experimentais para o melhor processo de ensino-aprendizagem de química. Para tanto, os autores elaboraram um trabalho que abordou as métricas da Química Verde. Os pesquisadores concluíram que a atividade foi bem-sucedida e significativa para o aprendizado dos alunos, sem implicar em nenhum prejuízo ambiental.

Por fim, o quinto capítulo apresenta um estudo que utilizou uma argila saponita com zircônio, a fim de adsorver o fármaco ciprofloxacina em matrizes aquosas. Inúmeros testes de caracterização foram empregados e demonstraram o aumento do espaçamento basal (de 1,12 a 1,64 nm) da argila após o processo de pilarização. Além disso, os testes de atividade antibacteriana demonstraram que a ciprofloxacina manteve sua atividade antibacteriana em relação a bactérias gram-positivas e gram-negativas.

Nesta perspectiva, a Atena Editora vem trabalhando de forma a estimular e incentivar cada vez mais pesquisadores do Brasil e de outros países, a publicarem seus trabalhos com garantia de qualidade e excelência em forma de livros, capítulos de livros e artigos científicos.

<b>CAPÍTULO 1 .....</b>	<b>1</b>
NARRATIVAS (AUTO)BIOGRÁFICAS: UM ESTUDO SOBRE OS PRESSUPOSTOS TEÓRICOS PARA A PRODUÇÃO DE HISTÓRIA DE VIDA DE UMA PROFESSORA DE QUÍMICA QUILOMBOLA	
Michele Morais Pinto	
Graziele Borges de Oliveira Pena	
 <a href="https://doi.org/10.22533/at.ed.0922310101">https://doi.org/10.22533/at.ed.0922310101</a>	
<b>CAPÍTULO 2 .....</b>	<b>14</b>
ANÁLISE QUANTITATIVA DE COMPOSTOS COMPLEXOS POR HPLC ESTRATÉGIAS E DESAFIOS	
Erick da Silva Polycarpo	
 <a href="https://doi.org/10.22533/at.ed.0922310102">https://doi.org/10.22533/at.ed.0922310102</a>	
<b>CAPÍTULO 3 .....</b>	<b>25</b>
INVESTIGAÇÃO QUÍMICA: A ESPECTROSCOPIA E A COMPUTAÇÃO COMO ALIADAS NA IDENTIFICAÇÃO ESTRUTURAL DE COMPOSTOS ORGÂNICOS	
Vitor Cunha Baía	
André Filipe Leite Cardoso Araujo	
Elson Santiago Alvarenga	
 <a href="https://doi.org/10.22533/at.ed.0922310103">https://doi.org/10.22533/at.ed.0922310103</a>	
<b>CAPÍTULO 4 .....</b>	<b>44</b>
PILHA DE ALIMENTOS: CONSTRUÇÃO DE UMA PILHA DE ALIMENTOS USANDO OS PRINCÍPIOS E MÉTRICAS DA QUÍMICA VERDE	
Matheus Willian Santos de Freitas	
Matheus César Côrtes Dias	
Marya Luísa Damasceno Oliveira	
Ana Paula Bernardo dos Santos	
Lívia Tenorio Cerqueira Crespo Vilela	
Queli Aparecida Rodrigues de Almeida	
 <a href="https://doi.org/10.22533/at.ed.0922310104">https://doi.org/10.22533/at.ed.0922310104</a>	
<b>CAPÍTULO 5 .....</b>	<b>56</b>
PILARIZAÇÃO DE ARGILA COM ZIRCÔNIO PARA FOTOESTABILIZAÇÃO DE ANTIBIÓTICO: UMA ESTRATÉGIA NA REMEDIAÇÃO AMBIENTAL	
Dihêgo Henrique Lima Damacena	
Polyana de Aragão Trigueiro	
Josy Anteveli Osajima	
Marcelo Barbosa Furtini	
Idglan Sá de Lima	
Luzia Maria Castro Honório	
Edson Cavalcante da Silva-Filho	
 <a href="https://doi.org/10.22533/at.ed.0922310105">https://doi.org/10.22533/at.ed.0922310105</a>	
<b>SOBRE O ORGANIZADOR .....</b>	<b>70</b>
<b>ÍNDICE REMISSIVO .....</b>	<b>71</b>

# CAPÍTULO 1

## NARRATIVAS (AUTO)BIOGRÁFICAS: UM ESTUDO SOBRE OS PRESSUPOSTOS TEÓRICOS PARA A PRODUÇÃO DE HISTÓRIA DE VIDA DE UMA PROFESSORA DE QUÍMICA QUILOMBOLA

*Data de submissão: 15/08/2023*

*Data de aceite: 02/10/2023*

**Michele Morais Pinto**

PPGE/IE/UFMT

Cuiabá – Mato Grosso

<http://lattes.cnpq.br/1593495488344883>

**Grazielle Borges de Oliveira Pena**

PPGE/IE/UFMT

Cuiabá – Mato Grosso

<http://lattes.cnpq.br/3751753277403309>

**RESUMO:** As narrativas (auto)biográficas, com o embasamento teórico do método autobiográfico, utilizadas para compor uma análise com ênfase nas narrativas de histórias de vida pessoais/profissionais de professores pode revelar a constituição de diversos aspectos de interesse de uma investigação educacional. Este trabalho teve como objetivo realizar um levantamento bibliográfico das Narrativas autobiográficas e analisar os seus pressupostos teóricos para produção de História de vida de uma professora de Química Quilombola. Procedeu-se um levantamento da literatura no ano 2022 referente ao período de 2016 a 2021, nas bases de dados Periódicos CAPES e Google Acadêmico. Os descritores utilizados foram: “Autobiografias” OR “Pesquisa autobiográfica” AND “Narrativas”

AND “Quilombola” AND “Química”.

Selecionaram oito (08) trabalhos segundo os critérios de elegibilidade no idioma português, nos últimos cinco anos. Os critérios de exclusão foram artigos de revisão. Explicitaram-se que os pressupostos teóricos sobre a metodologia de narrativas e o uso delas com o caráter autobiográfico relativas às trajetórias profissionais dos professores tem-se revelado de grande importância para o processo formativo pessoal e profissional no contexto da educação escolar Quilombola.

**PALAVRAS-CHAVE:** Autobiografia. Pesquisa (auto)biográfica. Narrativa. Quilombola. Química.

(AUTO)BIOGRAPHICAL  
NARRATIVES: A STUDY ON THE  
THEORETICAL ASSUMPTIONS  
FOR THE PRODUCTION OF THE  
LIFE STORY OF A QUILOMBOLA  
CHEMISTRY TEACHER

**ABSTRACT:** The (auto)biographical narratives with the theoretical basis of the autobiographical method used to compose an analysis with emphasis on the narratives of teachers' personal/professional life stories can reveal the constitution of several

aspects of interest in an educational research. This article aimed to carry out a bibliographical survey and analyze the theoretical assumptions of the autobiographical narratives for the life story output of a Quilombola Chemistry teacher. A literature survey was carried out in the year 2022 about the period from 2016 to 2021, in the periodical CAPES and Google Scholar databases. The descriptors used were the following: "Autobiographies" OR "Autobiographical research" AND "Narratives" AND "Quilombola" AND "Chemistry". That being so, eight studies were selected, being included according to the eligibility criteria of studies in the Portuguese language, in the last five years. Exclusion criteria were review articles. We highlight that the theoretical assumptions about the narratives methodology and their use with an autobiographical mold related to the teachers' professional trajectories have proved to be of great importance for the personal and professional training process in the context of Quilombola school education.

**KEYWORDS:** Autobiography. (auto)biographical research. Narrative. Quilombola. Chemistry.

## 1 | INTRODUÇÃO

### 1.1 NARRATIVAS (AUTO)BIOGRÁFICAS: O ESTUDO DE NARRATIVAS EM EDUCAÇÃO

As Narrativas (auto)biográficas constituem uma forma de pesquisa que permite captar os movimentos de profissionalização dos professores. Entretanto, a própria construção da metodologia de investigação de um trabalho, pautado na metodologia de uso de narrativas, já se constitui numa narrativa, pois não se pode dissociar a fase de recolha de dados dos percursos singulares que foram sendo construídos pelo pesquisador, de suas próprias histórias como professores e/ ou como pesquisador, pois são histórias que dialogaram entre si durante a construção.

Segundo Bolívar (2002) a pesquisa com o uso de narrativas não se refere apenas a uma metodologia qualitativa, mas a uma perspectiva específica para a pesquisa em Educação, a qual pressupõe uma mudança no que se entende como conhecimento em ciências sociais.

Portanto, as narrativas como metodologia de pesquisa valorizam e exploram as dimensões pessoais dos sujeitos, seus afetos, sentimentos e trajetórias de vida, e levam à percepção da complexidade das interpretações que os sujeitos pesquisados fazem de suas experiências e ações, sucessos e fracassos e dos problemas que enfrentam.

Logo, a investigação narrativa recorre às explicações dadas pelos indivíduos para entender as causas, as intenções e os objetivos que estão por trás das ações humanas (Bolívar, 2002, p. 3).

### 1.2 A (AUTO)BIOGRAFIA E ESCRITAS DE SI: QUESTÕES TEÓRICO-METODOLÓGICAS

O uso de Narrativas (auto)biográficas, isto é, de acordo com método autobiográfico,

implica a possibilidade de captar com maior riqueza os significados expostos na narrativa da ação humana e valoriza a singularidade de cada sujeito de pesquisa.

Então, o que podem nos oferecer a metodologia de narrativas e o método autobiográfico?

A metodologia de narrativas trata de casos diversos com ênfase em determinadas tipologias narrativas que não necessariamente necessitam ser de cunho autobiográfico. O método autobiográfico, como já descrito possui sua especificidade e trata somente das trajetórias de vida pessoais/ profissionais dos sujeitos.

Portanto, ambas as formas de lidar com a pesquisa são opostas às metodologias tradicionais de pesquisa por valorizarem a subjetividade para compreender o que existe por trás da ação humana e, apesar disso, demonstram grande proximidade quanto ao uso de narrativas orais e/ou escritas advindas dos relatos.

Assim, as narrativas (auto)biográficas com o embasamento teórico do método (auto)biográfico utilizadas para compor uma análise com ênfase nas narrativas de histórias de vida pessoais /profissionais de professores pode revelar a constituição de diversos aspectos de interesse de uma investigação educacional., haja vista que a escolha desse método qualitativo, que vai além das metodologias qualitativas tradicionais, viabiliza o diálogo, a análise e a discussão sobre diversos aspectos que auxiliam na formação de professores.

### **1.3 HISTÓRIAS DE VIDA**

Entende-se a história de vida como uma estratégia de pesquisa que integra a abordagem biográfica, tratando-se de um registro escrito ou oral, baseado em narrativas pessoais de partes significativas de uma vida ou de toda uma vida (Denzin, 1989), possuindo, assim, uma contextualização pessoal, histórica, social, institucional e/ou política das narrativas.

Os proponentes da história de vida têm suas origens na década de 1920, com abordagens usadas por antropólogos para descreverem culturas Americanas Nativas. A década de 30 enfatizou as análises de histórias de vida, interligando Antropologia e Psicologia. Um subgrupo da área da Antropologia se voltou para a fenomenologia e para a hermenêutica a fim de melhorar a compreensão interpretativa da condição humana (Hatch; Wisniewski, 1995).

Seu reconhecimento epistemológico e metodológico remonta a esse período, com o surgimento da Escola de Chicago, mas o reconhecimento do valor desse método, bem como o interesse pela sua aplicação nas ciências sociais ressurgiu apenas na década de 80.

Já no final do século XX, iniciou-se o movimento de utilização das narrativas de trajetórias de vida em formação de professores. O ano de 1984 é considerado o ponto de viragem, quando foi lançado o livro *O professor é uma pessoa*, de Ada Abraham (Nóvoa, 1995).

A partir daí a literatura pedagógica foi invadida por obras e estudos sobre a vida dos professores, as barreiras e os percursos profissionais, as biografias e autobiografias docentes ou o desenvolvimento pessoal e profissional dos professores.

Assim começou-se a “produzir outro tipo de conhecimento, mais próximo das realidades educativas e do cotidiano dos professores” (Nóvoa, 1995, p.19), recolocando os professores no centro dos debates educativos e das problemáticas da investigação e complementando os estudos educacionais com um olhar sobre a pessoa do professor.

Iniciou-se, então, o uso da abordagem conhecida hoje como História de Vida ou Método (Auto)Biográfico nos estudos sobre os professores e sua formação.

Segundo Souza (2003), os termos *Metodologia da História de Vida*, *Método (Auto) Biográfico*, *Relato Oral*, *História Oral de Vida*, entre outros, fazem parte de um rol de expressões utilizadas para designar os estudos baseados em narrativas, lembranças e memórias de histórias individuais e coletivas e todas elas se utilizam, preferencialmente, de fontes orais.

Apesar de possuírem aspectos metodológicos que as distinguem, “são modalidades tipificadas da expressão polissêmica da História Oral” (Souza, 2003, p. 42). Os termos Histórias de Vida e Método (Auto)biográfico são mais utilizados quando se trata de estudos em educação.

O interesse pela abordagem biográfica para estudar processos de aprendizagem na área da Educação é expressivo, como se verifica, despertado especialmente pelos trabalhos que enfocam a formação, sobretudo a de adultos (Josso, 1999). Nesse sentido, a história de vida pode pertencer à vida individual e coletiva de um grupo, à organização ou à comunidade (Denzin, 1989).

Pineau; Le Grand (1996) apontam diversas influências filosóficas nas práticas de Histórias de Vida, tais como a do pensamento existencialista de Sartre, a de correntes marxistas e críticas ou a tradição fenomenológica derivada dos estudos de Husserl, dentre outras.

Assim, não é de se admirar a diversidade de escolas de pensamento entre os estudos sociológicos com base em relatos de vida surgidos após anos de abandono, a partir dos anos 80 (Bertaux, 1980).

#### **1.4 PROCESSOS METODOLÓGICOS NAS PESQUISAS COM NARRATIVAS (AUTO)BIOGRÁFICAS E HISTÓRIAS DE VIDA**

O uso de Narrativas (auto)biográficas como fonte de investigação e método de pesquisa se assenta no pressuposto do reconhecimento da legitimidade da criança, do adolescente, do adulto, como sujeitos de direitos, capazes de narrar sua própria história e de refletir sobre ela.

Para recolher informações biográficas, é preciso pensar em possibilidades metodológicas que sejam sensíveis ao caráter polifônico do discurso narrativo, à sua

complexidade e sequência temporal e às diferentes vozes, histórias e contextos que a narrativa pode revelar.

O modo de recolher informação autobiográfica é variado, existem muitos instrumentos para a produção de “dados biográficos”: relatos, observações, escritos autobiográficos, questionários, entre outros.

Os materiais que são utilizados no emprego do método de Histórias de Vida seguem especificação, em especial: documentos pessoais – diários, correspondência, fotografias, vídeos, matéria publicada etc., além de documentos oficiais e registros biográficos (registros obtidos pela pesquisadora por meio da pesquisa), histórias de vida de relatos cruzados (Pujadas, 1992, p. 14).

## 1.5 OS LIMITES DA INTERPRETAÇÃO E DA ANÁLISE DOS DADOS

Na busca de expor o caminho trilhado para coleta e análise do material empírico, entende-se que é relevante conceituar quais materiais são considerados fontes de dados na pesquisa narrativa de cunho (auto)biográfico. Nesse sentido, Ferrarotti (2010) orienta sobre a especificidade do método biográfico.

Ele inicia considerando que há dois tipos de materiais biográficos que podem ser utilizados nessa abordagem: os primários, ou seja, as narrativas ou relatos autobiográficos recolhidos por um pesquisador, geralmente por meio de entrevistas realizadas “face a face”; e os secundários – aqueles de toda espécie, são eles: correspondências, diários, narrativas diversas, documentos oficiais, fotografias, cartas etc., cuja produção e existência não tiveram por objetivo inicial servir a uma investigação.

Em defesa desse ponto, Ferraroti (2010) enfatiza que os pesquisadores devem utilizar mais das narrativas autobiográficas, como método de pesquisa, pois são elas que trazem e explicitam com toda a força a subjetividade do sujeito. É, pois, uma metodologia voltada para a forma como o indivíduo interpreta o mundo e como se configuram suas interações sociais.

Para Shütze (2010, p. 212), essa abordagem compõe-se de três partes:

com uma questão narrativa orientada autobiograficamente desencadeia-se – como primeira parte – a narrativa autobiográfica inicial. Na medida em que o objeto da narrativa seja efetivamente a história de vida do informante e transcorrendo compreensível de forma que o ouvinte possa seguirla, não deverá ser interrompida pelo pesquisador-entrevistador. [...] Na segunda parte central da entrevista, o pesquisador-entrevistador inicia explorando o potencial narrativo tangencial de fios temáticos narrativos transversais, que foram cortados na fase inicial em fragmentos pouco plausíveis ou de uma vaguidade abstrata, por se tratarem de situações dolorosas, estigmatizadoras ou de legitimação problemática para o narrador, bem como em fragmentos nos quais o próprio informante demonstra não ter clareza sobre a situação. [...] A terceira parte consiste, por um lado, no incentivo à descrição abstrata de situações, de percursos e contextos sistemáticos que se repetem, bem como da respectiva forma de apresentação do informante (Shütze, 2010, p.

De acordo com Shütze (2010), não se trata apenas do curso externo dos fatos, mas também dos acontecimentos e de sua elaboração interpretativa por meio de modelos de análise que encaminham a uma apresentação pormenorizada da história narrada. Desse modo, “o resultado é um texto narrativo que apresenta e explicita de forma continuada o processo social de desenvolvimento e mudança de uma identidade biográfica” (Shütze, 2010, p. 213). Para que isso se concretize, faz-se necessário que o pesquisador evite intervir ou suprimir informações decorrentes de sua abordagem metodológica ou dos seus pressupostos teóricos.

Conforme Jovchelovitch e Bauer (2002), o pesquisador deve ambientar uma situação que encoraje e estimule o participante a contar a história sobre algum evento importante de sua vida e do contexto social. O nome da técnica se origina da palavra latina “narrare”, relatar, contar uma história. Nessa perspectiva, os autores realçam dois elementos que precisam ser considerados ao adotar a entrevista narrativa como estratégia metodológica:

busca evidenciar a relação entre o objeto e/ou as práticas de formação numa perspectiva colaborativa, seus objetivos e o processo de investigação-formação, tendo em vista apreender regularidades e irregularidades de um conjunto de narrativas orais ou escritas, partem sempre da singularidade das histórias e das experiências contidas nas narrativas individuais e coletivas dos sujeitos implicados em processos de pesquisa e formação (JOVCHELOVITCH; BAUER, 2002).

Para tanto, Souza (2014) sugere a interpretação dos dados a partir da leitura em três tempos, pois ele considera o tempo de “lembrar, narrar e refletir sobre o vivido” (p. 43). A partir daí, a interpretação acontece desde o momento inicial da investigação-formação tanto para o pesquisador quanto para os sujeitos envolvidos no projeto de formação.

À análise interpretativa das entrevistas, Souza (2014, p. 43) chama de “ideia metafórica em três tempos: o tempo de lembrar, narrar e refletir sobre o vivido. “Tempo I – Pré-análise, leitura cruzada; Tempo II – leitura temática – unidades de análises descritivas; Tempo III – leitura interpretativa-compreensiva do corpus, numa perspectiva metodológica, recíproca e dialógica”.

Desse modo, o Tempo I – Pré-análise, leitura cruzada –, “revele-se como singular, tendo em vista a construção do perfil do grupo pesquisado, tanto na perspectiva individual, quanto coletiva” (Souza, 2014, p. 43).

Em relação ao Tempo II – Leitura temática – unidades de análise temática ou descritiva, “articula-se às leituras cruzadas, porque evidencia regularidades, irregularidades, peculiaridades e subjetividades com base na interpretação e no agrupamento temático e compreensivo dos textos narrativos” (Souza, 2014, p. 44).

Nesse intento, o Tempo II se articula com o Tempo I, por meio da continuidade do cruzamento de informações dos perfis dos colaboradores. Ao considerar os fragmentos

de entrevistas como unidades de análises temáticas, Souza, (2014, p. 44) apresenta a relevância da leitura analítica e da interpretação temática, cujo objetivo é:

reconstituir o conjunto das narrativas, no que se refere à representação e agrupamento, através das unidades temáticas de análise, a fim de apreender sutilezas, o indizível, as subjetividades, as diferenças e as regularidades históricas que comportam e contêm as fontes (auto)biográficas (Souza, 2014, p. 44).

Em relação ao Tempo III – análise interpretativa-compreensiva – “vincula-se ao processo de análise, desde seu início, visto que exige leitura e releituras individuais e em seu conjunto do corpus das narrativas, recorrendo aos agrupamentos das unidades de análise temática e/ou ao conjunto das narrativas e das fontes utilizadas” (SOUZA, 2014, p. 46).

## 2 | MATERIAIS E MÉTODOS

O levantamento da literatura foi realizado no ano de 2022 e se refere ao período de 2016 a 2021. Na pesquisa bibliográfica, foram utilizadas as bases SciELO, Lilacs, Medline, Scopus, Periódicos CAPES, Science Direct, BVS Saúde e Google Acadêmico. Foi utilizada na busca dos trabalhos a combinação dos descritores: “Autobiografia” OR “Pesquisa autobiográfica” AND “Narrativas” AND “Quilombolas” AND “Química”.

Desse modo, foram selecionados 08 trabalhos, incluídos segundo os critérios de elegibilidade, conforme a Figura 1. Os critérios de inclusão foram: artigos no idioma português, nos últimos cinco anos, envolvendo os pressupostos teóricos das Narrativas autobiográficas e Histórias de vida de uma professora de Química Quilombola.

Foram ainda excluídos os capítulos de livro, resumos de eventos, relatos de caso, editoriais, revisões sistemáticas e artigos de opinião.

## 3 | RESULTADOS

Os resultados deste estudo se encontram na Tabela 1.

O demonstrativo dos artigos que integram a Revisão Sistemática se encontra na Tabela 2.

<b>Identificação</b>	<b>Quantidade</b>
Artigos encontrados nas Bases de Dados	18.220
Estudos excluídos pelo título	18.145
Estudos duplicados removidos	0
Artigos completos para avaliar a elegibilidade	75
Artigos excluídos pelo resumo	35
Artigos excluídos a partir da leitura do texto completo	29
Artigos excluídos a partir da leitura do texto completo	08

**Tabela 1: Critérios de seleção e inclusão dos trabalhos.**

<b>N</b>	<b>Data</b>	<b>Título</b>	<b>Autores</b>	<b>Periódico</b>
1	2020	Autobiografia docente: o percurso da construção da identidade ético-racial de uma professora	Sabrina Aparecida Gonçalves Tania Regina de Souza Romero Márcia Fonseca de Amorim	Revista Travessias
2	2019	Multiculturalidade no ensino de ciências em uma escola do município de Vila Bela da Santíssima Trindade – MT	Lineuza Leite Moreira	Banco de Teses do Programa de Pós-Graduação em Educação da Universidade Federal de Mato Grosso
3	2019	Identidades docentes: reflexões sobre disposições, saberes e formação continuada	Kety Cristina Nunweiler	Banco de Dissertações da Escola de Artes, Ciências e Humanidades da Universidade de São Paulo
4	2019	Estudos sobre o projeto de extensão cultura e negritude: Suas implicações no âmbito da cultura e da formação com ênfase nas religiões de matriz africana	Lorena Penna Silva	Banco de Dissertações do Programa de Pós-graduação Estudos Interdisciplinares Sobre a Universidade, Universidade Federal da Bahia.

5	2018	Tecendo histórias... Entrelaçando narrativas: tecituras que constroem a docência de professores bacharéis	Julia Bolsson Dolwitsch	Banco de Teses do Curso de Pós-Graduação em Educação, da Universidade Federal de Santa Maria (UFSM, RS).
6	2018	Aproximações e distanciamentos entre necessidades formativas de futuros professores de ciências bolsistas e não bolsistas do Pibid	Daiane Lourene Soares Dantas	Banco de Dissertações do Programa de Pós-Graduação em Educação da Universidade Federal do Rio Grande do Norte.
7	2017	A educação das relações étnico-raciais: olhares na formação docente em ensino de ciências/ química	Maria Camila de Lima Brito	Banco de Dissertações do Núcleo de Pós-Graduação em ensino de ciências e matemática – NPGECEMA
8	2017	Nas constituições dos discursos sobre afro-brasileiros: uma análise histórica da ação de militantes negros e dos documentos oficiais voltados a promoção do negro brasileiro (1978 a 2010)	Mírian Cristina de Moura Garrido	Banco de Teses da Faculdade de Ciências e Letras e Assis – UNESP – Universidade Estadual Paulista

Tabela 2 – Demonstrativo dos artigos que integram a Revisão Sistemática.

## 4 | DISCUSSÃO

O objetivo deste estudo foi realizar uma revisão integrativa da literatura a fim de compreender os pressupostos teóricos das Narrativas (auto)biográficas para a produção de Histórias de vida de uma professora de Química Quilombola.

Assim, o trabalho de Gonçalves; Romero e Amorim (2020), apresentado na forma de artigo, teve como objetivo refletir sobre as questões sociais e raciais pertinentes ao exercício da docência no contexto escolar. Os fatos ocorridos demonstram que a educação libertadora ainda está distante dos alunos, principalmente dos afrodescendentes.

Tais comentários revelam o preconceito que vem do discurso de alguns docentes e da própria comunidade que desmotiva o estudante, a (auto)biografia tem-se mostrado como um papel fundamental nessa luta, que é de refletir e pensar, a partir dessa perspectiva, em novos meios de ensino, como forma de uma educação libertadora dentro de sala de aula, desde os primeiros anos escolares.

Já o estudo de Moreira (2019), apresentado na forma de Tese ao Programa de Pós-Graduação em Educação/UFMT, objetivou compreender como professores de Ciências que atuam no Ensino Fundamental e no Ensino Médio Regular e Integrado de uma escola quilombola, situada no município de Vila Bela da Santíssima Trindade – MT, constroem seus conhecimentos e abordam as Ciências em um espaço multicultural. Os resultados apontam um quadro docente heterogêneo, de múltiplas identidades.

A complexidade presente nessa escola, a forma como se organiza em relação à Educação Escolar Quilombola, à diversidade, ao ensino de Ciências vão se revelando à medida que histórias pessoais, profissionais e coletivas são narradas e, em meio a essa

construção de sentidos, muitos desafios e dilemas também se revelam num espaço tridimensional.

Nunweiler (2019), em seu trabalho de Dissertação, intentou compreender como se constituem as identidades de docentes de educação básica, os quais atuam nos anos finais do ensino fundamental e estão inseridos em processos de formação continuada *in loco*. Os resultados revelam que, na trajetória social, os sujeitos constituíram disposições que contribuem para o exercício profissional e para o desenvolvimento dos saberes docentes.

Silva (2019), em seu trabalho de Dissertação, empenhou-se em entender as práticas formativas descolonizadas, multiculturais e em dialogicidade com o território de inserção, além das suas contribuições para as políticas afirmativas no Recôncavo e as discussões da Lei 11.645, de 10 de março de 2008, que inclui no currículo oficial da Rede de Ensino a obrigatoriedade da temática “História e Cultura Afro-brasileira e Indígena”.

O projeto se mostrou relevante pela riqueza das atividades apresentadas nas edições, cujas ações foram sendo ampliadas e incluídas nas pautas locais, em especial, as do Bembé do Mercado. A comunidade acadêmica comprehende a potência do Bembé, e vislumbra a possibilidade de realizar ações integradas, por meio da conexão de saberes com a Cultura e a Negritude, com o propósito de assumir essa experiência cultural como política de formação étnico-racial.

Dolwitsch (2018), em seu trabalho de Tese, pretendeu depreender as trajetórias de vida de professores bacharéis egressos do Programa Especial de Graduação de Formação de Professores para a Educação Profissional (PEG) a fim de investigar os processos formativos que levaram à construção da docência.

Nesse sentido, a construção da docência não tem uma definição exata, sendo construída nos percursos vividos pelos sujeitos, nos modos de escritas de si e no entrelaçar das tramas, por meio do “tear biográfico”. Tramas que carregam histórias singulares, mas que, ao mesmo tempo, são atravessadas por uma pluralidade de contextos, memórias e identidades.

O objetivo de Dantas (2018), em seu trabalho de Dissertação, foi compreender os significados e sentidos que os futuros professores de Ciências atribuem às suas trajetórias de formação e, assim, desvelar suas necessidades no âmbito da formação inicial. Foram constatadas mais necessidades formativas que se entrecruzam do que se opõem entre bolsistas e não bolsistas.

Em suma, constatou-se que não há tanto distanciamento quanto se quer fazer existir entre as trajetórias de formação e às necessidades formativas de futuros docentes de Ciências pibidianos e não pibidianos.

Brito (2018), em seu trabalho de Dissertação, almejou investigar as conexões estabelecidas entre as trajetórias de vida de licenciadas em Química, de uma turma de Mestrado em Ensino de Ciências e Matemática 2015, e suas opiniões acerca da inserção da Educação nas relações étnico-raciais nas práticas pedagógicas.

Garrido (2017), em seu trabalho de Tese, buscou compreender a atuação da militância negra brasileira contemporânea, tendo, por data simbólica, 1978, com a formação do Movimento Negro Unificado Contra a Discriminação Racial, e como se têm configurado as políticas de valorização da cultura e história dos afro-brasileiros, desde o início dessa articulação até 2010.

A constituição do ser brasileiro se dá de forma histórica e cultural, em um processo de disputas que tende a silenciar a presença africana e afrodescendente. Espera-se, que esta pesquisa, que a princípio tomava apenas os documentos oficiais como fonte, tenha possibilitado a apreensão do protagonismo de diferentes agentes da história com a introdução da “fala” do militante.

## 5 | CONCLUSÃO

O objetivo deste estudo foi analisar os pressupostos teóricos das Narrativas (auto) biográficas para produção de História de vida de uma professora de Química Quilombola.

Portanto, considerando a Educação Escolar Quilombola como uma política sociocultural que visa à melhoria da educação nas comunidades quilombolas, é importante a presença nesse contexto de professores que refletem também sobre os currículos e sobre suas práticas pedagógicas considerando todos os aspectos históricos, sociais e culturais da realidade local.

Logo, acredita-se que entender a própria história é também se instrumentalizar em busca de direitos e igualdade, pois, ao valorizar a própria memória, também se está lutando para que ela permaneça viva e seja ressignificada.

Portanto, as narrativas apontam que diálogos entre professores, gestão escolar e alunos viabilizam práticas educativas que considerem a igualdade construída na diferença, de identidade e alteridade. Esta pesquisa se revelou significativa ao mostrar o quanto importante é o papel de um professor de Ciências multiculturalmente engajado em um contexto educacional que tende a ser cada dia mais plural.

Ademais, considera-se este estudo relevante por abordar tanto a trajetória social anterior ao início da carreira docente quanto os aspectos da prática pedagógica e a formação, utilizando-se as Narrativas autobiográficas como instrumentos de pesquisa, o que contribui para a compreensão da importância de cada um desses elementos na construção das identidades.

Embora poucos foram os trabalhos que abordassem os assuntos relacionados ao tema proposto, principalmente ao que se refere à formação específica para Educação escolar Quilombola, em alguns deles, os professores destacaram a necessidade de formação continuada para essa especificidade.

Logo, trabalhos com os conceitos ligados à reflexão sobre a prática profissional tornaram-se um dos caminhos de construção do conhecimento docente, pois possibilitam

aos profissionais da educação a (re) significação de saberes e práticas, realçando, assim, a importância desse método de pesquisa.

## REFERÊNCIAS

BOLÍVAR, Antonio. De nobis ipsis silemus? Epistemología de la investigación biográfico-narrativa. Revista Electrónica de Investigación Educativa (REDIE), vol. 4, 2002.

BRITO, Maria Camila de Lima. **A educação das relações étnico-raciais:** 2017. 113 f. Dissertação (Mestrado em Ensino de Ciências e Matemática) - Universidade Federal de Sergipe, São Cristóvão/SE, 2017.

DANTAS, Daiane Lourene Soares. **Aproximações e distanciamentos entre necessidades formativas de futuros professores de ciências bolsistas e não bolsistas do Pibid.** 2018. 113 f. Dissertação (Mestrado em Educação) - Universidade Federal do Rio Grande do Norte, Rio Grande do Norte, 2018.

DENZIN, Norman. **Interpretive biography.** Newbury Park: Sage, 1989.

DOLWITSCH, Julia Bolsson. **Tecendo histórias...** Entrelaçando narrativas: tecituras que constroem a docência de professores bacharéis. 2018. 271 f. Tese (Doutorado em Educação) - Universidade Federal de Santa Maria, Santa Maria, 2018.

FERRAROTTI, Franco. Sobre a autonomia do método biográfico. In: NÓVOA, Antonio.; FINGER, Matthias. (Orgs.). **O método (auto) biográfico e a formação.** Natal: EDUFRN; São Paulo: Paulos, 2010, p. 29-56.

GARRIDO, Mírian Cristina de Moura. **Nas constituições dos discursos sobre afro-brasileiros:** uma análise histórica da ação de militantes negros e dos documentos oficiais voltados a promoção do negro brasileiro (1978 a 2010). 2017. 310 f. Tese (Doutorado em História) - Universidade Estadual Paulista, ASSIS, 2017.

GONÇALVES, Sabrina Aparecida; ROMERO, Tania Regina de Souza; AMORIM, Márcia Fonseca de. Autobiografia docente: o percurso da construção da identidade étnico-racial na formação de uma professora. **Travessias,** Cascavel, v. 14, n. 1, p. 281-298, 2020.

HATCH, J. Amos; WISNIEWSKI, Richard. Life history and narrative: questions, issues and exemplary works. In: **Life history and narrative.** HATCH, J.; WISNIEWSKI, R. (Eds.). London: RoutledgeFalmer, 1995, p. 113-135.

JOSSO, Marie-Christine. **História de vida e projeto: a história de vida como projeto e as “histórias de vida” a serviço de projetos.** Educação e Pesquisa, v.25, n. 2. São Paulo, jul./dez. 1999.

JOVCHELOVITCH, Sandra; BAUER, Martin W. Entrevista narrativa. In: BAUER, Martin W.; GASKELL, George (editores). Tradução de Pedrinho A. Guareschi. **Pesquisa qualitativa com texto, imagem e som: um manual prático.** 3. ed. - Petrópolis, RJ: Vozes, 2002, p. 90- 113.

MOREIRA, Lineuza Leite. **Multiculturalidade no ensino de ciências em uma escola do município de Vila Bela da Santíssima Trindade – MT.** 2019. 185 f. Tese (Doutorado em Educação) – Instituto de Educação, Universidade Federal de Mato Grosso, Cuiabá, 2019.

NÓVOA, Antônio. **Vidas de professores**. Porto: Porto Editora, 1995.

NUNWEISLER, Kety Cristina. **Identidades docentes**: 2019. 157 f. Dissertação (Mestrado em Filosofia) - Universidade de São Paulo, São Paulo, 2019.

PINEAU, Gaston; LE GRAND, Jean-Louis. **Les histories de vie**. Paris: Presses Universitaires de France, 1996.

SCHÜTZE, Fritz. Pesquisa biográfica e entrevista narrativa. In: WELLER, Vivian; PFAFF, Nicolle (Orgs.). **Metodologia da pesquisa qualitativa em educação**. Petrópolis: Vozes, 2010, p. 210-238.

SILVA, Lorena Penna. **Estudos sobre o projeto de extensão cultura e negritude**: 2019. 121 f. Dissertação (Mestrado) - Universidade Federal da Bahia, Bahia, 2019.

SOUZA, João Valdir Alves de, DINIZ, Margareth, OLIVEIRA, Maria Gomes. **Formação de Professores (a) e condição docente**. Belo Horizonte: Editora UFMG: 2014 p. 09-12.

SOUZA, Elizeu Clementino de. História de vida e formação de professores: um olhar sobre a singularidade das narrativas (auto)biográficas. In: MACEDO, R. S.; SILVA, G. M. E TORRES, M. M. **Curriculum e docência: tensões contemporâneas, interfaces pós-formais**. Salvador: Editora UNEB, 2003.

## CAPÍTULO 2

# ANÁLISE QUANTITATIVA DE COMPOSTOS COMPLEXOS POR HPLC ESTRATÉGIAS E DESAFIOS

---

Data de aceite: 02/10/2023

**Erick da Silva Polycarpo**

Graduado em Química pela Universidade  
Cidade de São Paulo  
Limeira – SP  
<http://lattes.cnpq.br/7262216012767207>

**RESUMO:** Os compostos complexos demandam por averiguações singulares em variadas aplicações no período hodierno. Objetivou-se, assim, aprofundar o conhecimento sobre as estratégias e desafios envolvidos na análise quantitativa de compostos complexos por cromatografia líquida de alta eficiência. Justificou-se este tema através da notoriedade tanto da precisão quanto da sensibilidade analítica nos principais campos onde esta técnica é empregada, além da contribuição para o desenvolvimento de produtos e processos, monitoramento e controle ambiental e conformidades regulatórias. No campo metodológico, aplicou-se uma revisão bibliográfica exploratória e documental por vias de uma pesquisa com abordagem descritiva e observacional. Os principais resultados ressaltam a versatilidade do HPLC na análise de compostos complexos, permitindo a separação eficaz

e a quantificação precisa de analitos em diversas matrizes. Ainda mais, estratégias de detecção, como UV-Vis, fluorescência e espectrometria de massas, oferecem opções para analisar diferentes tipos de analitos, aperfeiçoando a seletividade e a sensibilidade da análise.

**PALAVRAS-CHAVE:** Compostos Complexos; HPLC; Estratégias; Adversidades.

QUANTITATIVE ANALYSIS OF  
COMPLEX COMPOUNDS BY HPLC  
STRATEGIES AND CHALLENGES

**ABSTRACT:** Complex compounds demand unique investigations in various applications in the modern period. Thus, the objective was to deepen the knowledge about the strategies and challenges involved in the quantitative analysis of complex compounds by high-performance liquid chromatography. This theme was justified by the notoriety of both precision and analytical sensitivity in the main fields where this technique is used, in addition to the contribution to the development of products and processes, monitoring and environmental control and regulatory compliance. In the methodological field, an exploratory and

documental bibliographical review was applied through a research with a descriptive and observational approach. The main results highlight the versatility of HPLC in the analysis of complex compounds, allowing efficient separation and precise quantification of analytes in different matrices. Furthermore, detection strategies such as UV-Vis, fluorescence and mass spectrometry offer options for analyzing different types of analytes, improving the selectivity and sensitivity of the analysis.

**KEYWORDS:** Complex Compounds; HPLC; Strategies; Adversities.

## INTRODUÇÃO

A análise quantitativa de compostos complexos denota-se como fundamental no campo da química analítica, tendo implicações abrangentes nas áreas farmacêutica, química ambiental e alimentícia.

A necessidade de quantificar a concentração de compostos complexos em matrizes diversas é fidedigna para garantir a qualidade, a segurança e a eficácia em inúmeras aplicações, oportunizando assim a inovação em diferentes setores.

Outrossim, a precisão e a confiabilidade dessas análises são de grande valia para garantir o cumprimento de normas regulatórias, promover a inovação e assegurar tanto a saúde pública quanto a proteção ambiental. Este trabalho propõe-se, singularmente, a explorar as estratégias e desafios envolvidos na análise quantitativa de compostos complexos por cromatografia líquida de alta eficiência (HPLC).

Justificou-se a seleção deste tema pela demanda crescente por precisão e sensibilidade analítica nos principais campos onde esta técnica é empregada, além da contribuição para o desenvolvimento de produtos e processos, monitoramento e controle ambiental e as exigências quanto à conformidade regulatória.

Assim, o objetivo geral deste trabalho consiste em aprofundar o conhecimento sobre as estratégias e desafios envolvidos na análise quantitativa de compostos complexos por cromatografia líquida de alta eficiência. Em relação aos objetivos específicos, espera-se caracterizar os fundamentos da cromatografia líquida de alta eficiência, descrever os compostos complexos e suas aplicações por visas de estratégias para análise quantitativa e evidenciar as adversidades enfrentadas durante este processo avaliativo.

Para tanto, a problemática norteadora para este estudo advém da seguinte questão: Quais são as estratégias eficazes para superar os desafios intrínsecos à análise quantitativa de compostos complexos por cromatografia líquida de alta eficiência e como essas estratégias podem ser aplicadas com êxito para garantir a qualidade, segurança e eficácia nas análises?

Metodologicamente, incorporou-se uma revisão bibliográfica documental, descritiva e exploratória em harmonia com uma pesquisa observacional, embasando-se nas seguintes palavras-chave: “compostos complexos”, “HPLC”, “estratégias” e “adversidades”.

## METODOLOGIA

No eixo metodológico, este estudo embasa-se em uma revisão bibliográfica exploratória do tipo documental partindo de uma pesquisa de abordagem descritiva e observacional. As investigações desta natureza são fundamentadas pelo:

[...] exame de materiais que ainda não receberam um tratamento analítico ou que podem ser reexaminados com vistas a uma interpretação nova ou complementar. Pode oferecer base útil para outros tipos de estudos qualitativos e possibilita que a criatividade do pesquisador dirija a investigação por enfoques diferenciados. Esse tipo de pesquisa permite o estudo de pessoas a que não temos acesso físico (distantes ou mortas). Além disso, os documentos são uma fonte não-reativa e especialmente propícia para o estudo de longos períodos de tempo (NEVES, 1996, p. 4).

De acordo com Godoy (1995, p. 21), as pesquisas deste campo não se apresentam como uma “proposta rigidamente estruturada, ela permite que a imaginação e a criatividade levem os investigadores a propor trabalhos que explorem novos enfoques”. Através do método observacional, engloba-se o desenvolvimento de uma pesquisa ampla direcionada aos intuições do pesquisador, haja vista que:

[...] o método observacional é o início de toda pesquisa científica, pois serve de base para qualquer área das ciências. O método observacional fundamenta-se em procedimentos de natureza sensorial, como produto do processo em que se empenha o pesquisador no mundo dos fenômenos empíricos. É a busca deliberada, levada a efeito com cautela e predeterminação, em contraste com as percepções do senso comum. O objetivo da observação naturalmente pressupõe poder captar com precisão os aspectos essenciais e acidentais de um fenômeno do contexto empírico. Dentro das ciências sociais, a literatura costuma chamar esses aspectos de fatos; o produto de um ato observado e registrado denomina-se dado [...] (FACHIN, 2005, p. 38).

Realizou-se, assim, uma busca em bases de dados como Scielo e Google Acadêmico, com ênfase em referências brasileiras e estrangeiras dos últimos 10 anos (2013-2023), salvaguardando espaço para citações de autores clássicos que são imprescindíveis para a contextualização temática.

Excluiu-se, entretanto, informações advindas de obras incompletas ou fragmentos de textos e artigos acadêmicos que não se adequaram ao delineamento temporal ou às definições prévias de linguagem (português, espanhol e inglês).

## RESULTADOS E DISCUSSÃO

### Fundamentos da Cromatografia Líquida de Alta Eficiência (HPLC)

A evolução da cromatografia líquida representa, do ponto de vista histórico, um marco positivo na progressão da ciência analítica, marcada por desenvolvimentos conceituais e instrumentais que transformaram radicalmente a capacidade de separar e analisar compostos complexos em solução. A trajetória da cromatografia líquida é correlata

à demanda contínua por métodos analíticos precisos nas ciências químicas (SANTI *et al.*, 2014).

A cromatografia líquida enraíza-se tanto na cromatografia em papel quanto na cromatografia de partição, sendo técnicas iniciais que permitiam a separação de misturas complexas por diferenciação de afinidade entre os componentes e uma fase estacionária sólida. Todavia, o advento da cromatografia líquida, com uma fase estacionária líquida, representou um salto qualitativo na capacidade de separação (CHEIRAN, 2018).

A primeira aplicação documentada da cromatografia líquida ocorreu em 1903, quando Mikhail Tswett, um cientista russo, utilizou uma coluna preenchida com sílica gel e uma solução de éter de petróleo como fase móvel para separar pigmentos vegetais. Sua inovação reside no uso de uma fase estacionária sólida, que permitiu a separação de uma ampla gama de compostos, e na observação da eluição sequencial de diferentes pigmentos (LIMA, 2022).

Durante a primeira metade do século XX, a cromatografia líquida evoluiu principalmente como uma técnica analítica qualitativa, sendo empregada na identificação de compostos orgânicos em amostras complexas. No entanto, a revolução verdadeira ocorreu com o desenvolvimento da cromatografia líquida de alta eficiência nas décadas de 1960 e 1970 (SANTI *et al.*, 2014).

A HPLC trouxe consigo avanços significativos, incluindo a utilização de colunas mais eficientes, bombas de alta pressão, detectores sensíveis e sistemas de automação, permitindo a análise quantitativa de compostos complexos em níveis de sensibilidade e precisão sem precedentes. A cromatografia líquida de alta eficiência tornou-se uma ferramenta indispensável em uma variedade de disciplinas, incluindo química analítica, química farmacêutica, ciências ambientais, biologia molecular e indústria de alimentos. Hoje, a cromatografia líquida continua a evoluir com o advento de novos tipos de colunas, avanços em técnicas de detecção, automação mais sofisticada e desenvolvimentos em software analítico. Sua aplicação se estende a campos tão diversos quanto a proteômica, a farmacocinética, a pesquisa de drogas, o controle de qualidade industrial e a análise de poluentes ambientais (LIMA, 2022).

Os são intrinsecamente dependentes da interação complexa entre a fase estacionária e a fase móvel. A HPLC baseia-se na distribuição diferencial de componentes de uma amostra entre duas fases imiscíveis: a fase estacionária e a fase móvel. A fase estacionária, localizada dentro de uma coluna cromatográfica, é escolhida com base em sua afinidade seletiva pelos analitos de interesse (CHEIRAN, 2018).

Na cromatografia de fase reversa, a fase estacionária é hidrofóbica, enquanto a fase móvel consiste em uma mistura de solventes miscíveis em água. Analitos mais hidrofóbicos têm uma afinidade maior pela fase estacionária e, portanto, eluem mais lentamente, ao passo que analitos hidrofílicos eluem de forma mais rápida. Já na cromatografia de fase normal, a fase estacionária é polar, e a fase móvel consiste em um solvente orgânico menos

polar. A separação é baseada na afinidade relativa dos analitos pela fase estacionária polar. Por fim, a cromatografia de troca iônica emprega uma fase estacionária que contém grupos iônicos. A separação ocorre devido às interações eletrostáticas entre os íons presentes na fase estacionária e os analitos carregados que estão na amostra (LIMA, 2022).

A fase móvel, por sua vez, é responsável por transportar os analitos através da coluna. A composição da fase móvel, a sua taxa de fluxo e a sua polaridade são ajustadas para otimizar a separação dos analitos de interesse. Mudanças na composição da fase móvel podem ser usadas para controlar a eluição dos analitos e afetar a seletividade da separação (ABRÃO *et al.*, 2013).

A eluição dos analitos da coluna ocorre com base nas diferenças nas interações entre os analitos e a fase estacionária em relação à fase móvel. Compostos que interagem mais fortemente com a fase estacionária permanecem na coluna por mais tempo, enquanto aqueles que têm maior afinidade pela fase móvel eluem mais rapidamente (SANTI *et al.*, 2014).

Um sistema HPLC, amplamente utilizado na química analítica e em diversas outras áreas científicas e industriais, é composto por um conjunto de componentes interligados, cada um desempenhando um papel crucial na separação e análise de compostos complexos. A bomba HPLC é um componente essencial, responsável por fornecer a fase móvel ao sistema a uma taxa de fluxo precisa e constante. A alta pressão gerada pela bomba é fundamental para manter a eficiência da separação, especialmente em colunas de alta eficiência. O injetor, por sua vez, é o componente responsável por introduzir a amostra a ser analisada no fluxo da fase móvel. Em sistemas HPLC modernos, frequentemente utiliza-se um injetor automático, o que garante uma injeção precisa de volumes definidos de amostra e, assim, reproduzibilidade nos resultados (CHEIRAN, 2018).

A coluna de cromatografia é o elemento central do sistema, onde ocorre a separação dos analitos. Essas colunas são preenchidas com uma fase estacionária que pode variar em natureza e química, dependendo da aplicação específica. A escolha criteriosa da coluna e da fase estacionária é determinante para a seletividade da separação. O detector HPLC é responsável por monitorar os analitos à medida que são eluídos da coluna e gerar sinais detectáveis. Existem diferentes tipos de detectores, incluindo UV-Vis, de fluorescência, de índice de refração, de condutividade e de espectrometria de massas, sendo a escolha dependente da natureza dos analitos e dos propósitos da análise (SANTI *et al.*, 2014).

Para aquisição e análise de dados, são utilizados sistemas de coleta de dados, como computadores, e software dedicado. O software controla os parâmetros do sistema, coleta dados do detector e permite a análise quantitativa e qualitativa dos resultados cromatográficos. Além desses componentes principais, sistemas de controle e regulagem de temperatura são frequentemente utilizados para manter a temperatura da coluna estável, o que é crítico para a retenção e a resolução dos analitos (SILVA, 2017).

Em algumas aplicações, como na preparação de amostras para análises posteriores,

é utilizado um coletor de frações para recolher e armazenar os picos cromatográficos separadamente. Esses componentes formam um sistema integrado, e a escolha adequada e a manutenção cuidadosa de cada um deles são fundamentais para o sucesso de uma análise por HPLC. Compreender o papel de cada componente e sua interação é essencial para a execução eficiente e precisa das análises cromatográficas (LIMA, 2022).

Isto posto, existem diversos tipos de colunas HPLC, cada uma projetada para atender a diferentes necessidades analíticas e abordar a separação de compostos complexos. Os tipos mais comuns de colunas HPLC incluem colunas de fase reversa, colunas de fase normal e colunas de troca iônica (TEIXEIRA *et al.*, 2018).

As colunas de fase reversa são amplamente utilizadas na cromatografia líquida de alta eficiência devido à sua versatilidade e aplicabilidade a uma ampla gama de compostos. Essas colunas possuem uma fase estacionária não polar, geralmente à base de sílica modificada com grupos hidrofóbicos, como cadeias alquilas. A fase móvel consiste em uma mistura de solventes polar e não polar, sendo os compostos mais hidrofóbicos retidos na coluna por mais tempo. As colunas de fase reversa são ideais para separar compostos orgânicos apolares ou fracamente polares, como compostos farmacêuticos, lipídios, pesticidas e muitos outros. A capacidade de ajustar a polaridade da fase móvel permite uma ampla variação nas condições de separação.

As colunas de fase normal apresentam uma fase estacionária polar, como sílica não modificada, e uma fase móvel não polar. Essas colunas são usadas principalmente para separar compostos polares ou iônicos, como aminoácidos, açúcares, metabólitos ácidos, entre outros. A retenção de analitos em colunas de fase normal ocorre devido a interações polares entre a fase estacionária e os compostos. A separação em colunas de fase normal é útil em aplicações que envolvem compostos polares que não interagem bem com fases reversas. No entanto, elas requerem cuidados específicos, pois são sensíveis à umidade e tendem a fornecer picos largos para compostos menos polares.

Colunas de troca iônica são usadas principalmente para separar íons e compostos iônicos. A fase estacionária é modificada com grupos funcionais que podem atrair ou repelir íons, dependendo de sua carga e tamanho. A fase móvel é uma solução tampão que facilita a eluição controlada de íons. Essas colunas são frequentemente aplicadas em análises de aminoácidos, íons metálicos, íons orgânicos e polímeros iônicos. A seletividade na troca iônica é controlada pela escolha da fase estacionária e da composição do tampão da fase móvel (SANTI *et al.*, 2014).

Além desses tipos principais, existem colunas especializadas, como colunas de afinidade, colunas quiral e colunas de tamanho. Cada tipo de coluna HPLC tem suas vantagens e limitações, e a escolha adequada depende da natureza dos analitos e dos objetivos da análise. A compreensão das características e da aplicabilidade de cada tipo de coluna é fundamental para a otimização das separações cromatográficas em HPLC (SANTI *et al.*, 2014).

Ainda mais, a seleção do detector depende da natureza dos analitos, dos objetivos da análise e da sensibilidade necessária. Alguns dos principais tipos de detectores HPLC incluem o Detector UV-Vis (Ultravioleta-Visível), o Detector de Fluorescência, a Espectrometria de Massas (MS), o Detector de Índice de Refração (RID), Detector de Condutividade e o Detector de Eletroquímica (SILVA, 2017).

Na cromatografia líquida, os solventes são necessários, pois exercem influência direta na separação dos analitos. A seleção e composição adequadas dos solventes são determinadas pelo tipo de cromatografia e pelos analitos em análise. O solvente utilizado como fase móvel é responsável por transportar a amostra através da coluna cromatográfica e exerce impacto superior na retenção e eluição dos analitos. É verossímil que esse solvente seja de alta pureza, visando evitar a contaminação da coluna. A composição da fase móvel pode variar consideravelmente, abrangendo misturas de solventes orgânicos, água e tampões, de acordo com as exigências da aplicação em questão.

No contexto da cromatografia iônica, o eluente constitui uma solução que varia em concentração iônica e pH, sendo empregado para eluir íons de interesse da coluna de troca iônica. A escolha do eluente depende intrinsecamente da natureza dos analitos e das interações específicas que se deseja promover (SANTI *et al.*, 2014).

Um aspecto de extrema relevância diz respeito à qualidade dos solventes empregados. Solventes de alta qualidade revelam-se fundamentais para prevenir contaminações e a formação de picos de base larga durante as análises cromatográficas. Práticas comuns incluem a filtragem e a degaseificação, visando assegurar a pureza do solvente utilizado no processo.

## Compostos Complexos e Suas Aplicações: Estratégias para Análise Quantitativa

Os compostos complexos, no panorama químico, são substâncias moleculares que possuem uma estrutura química intricada e composta por uma grande variedade de átomos, por vezes incluindo múltiplas ramificações, grupos funcionais e/ou ligações químicas diversificadas. Esses compostos são caracterizados por sua elevada complexidade estrutural e podem ser encontrados em diversas áreas da química, desempenhando papéis significativos em produtos farmacêuticos, alimentos, poluentes ambientais e muitas outras aplicações (TEIXEIRA *et al.*, 2018).

Neste prisma, os compostos complexos são uma parte essencial do mundo químico, e sua diversidade estrutural e funcionalidade têm aplicações significativas em diversas áreas, desde a medicina até a indústria alimentícia e a preservação ambiental. Compreender a natureza complexa desses compostos é essencial para seu estudo e aplicação em diferentes contextos científicos e industriais (ALVES FILHO, 2014).

A precisão na determinação da concentração de compostos complexos é fidedigna em uma variedade de campos, como a química farmacêutica, onde a dosagem precisa de

princípios ativos em medicamentos é crítica para a segurança e eficácia do tratamento. Da mesma forma, na indústria de alimentos, a quantificação de componentes, como vitaminas e aditivos, é vital para atender a regulamentos e garantir a qualidade dos produtos (SILVA, 2017).

Na área ambiental, a análise quantitativa é essencial para monitorar a presença de poluentes em água, solo e ar, permitindo avaliar o impacto das atividades humanas no meio ambiente e tomar medidas corretivas quando necessário. A quantificação precisa de poluentes orgânicos, como pesticidas e hidrocarbonetos, é crucial para garantir que os níveis estejam dentro dos limites estabelecidos (ALVES FILHO, 2014).

Além disso, em pesquisas acadêmicas, a análise quantitativa de compostos complexos auxilia em estudos de cinética, termodinâmica e outras investigações científicas que exigem dados quantitativos confiáveis. A falta de precisão nessas análises pode levar a conclusões equivocadas e interpretações errôneas (CHEIRAN, 2018).

Antes da introdução da HPLC, os métodos analíticos tradicionais para a análise de compostos complexos eram baseados em técnicas manuais e menos eficazes, tais como: cromatografia em papel, cromatografia em camada delgada, espectrofotometria UV-Vis, métodos de titulação (FREITAS, 2013).

Nos últimos anos, avanços graduais na análise de compostos complexos por HPLC transformaram essa técnica em uma ferramenta altamente eficaz e versátil. Esses avanços englobam colunas de alta eficiência, detecção avançada, automação, software e técnicas avançadas de preparo de amostras (AVILA *et al.*, 2021).

Esses desenvolvimentos recentes tornaram o HPLC uma ferramenta indispensável para a análise quantitativa de compostos complexos em uma variedade de áreas, oferecendo sensibilidade, precisão e eficiência excepcionais. Isso tem implicações profundas no avanço da pesquisa científica, no controle de qualidade industrial e na proteção do meio ambiente, garantindo resultados analíticos confiáveis e informações valiosas (AVILA *et al.*, 2021).

Inobstantemente, há duas técnicas de calibração comuns em HPLC, que são a curva de calibração e os padrões internos. No método da curva de calibração, uma série de padrões de concentrações conhecidas do analito de interesse é preparada e injetada no sistema HPLC. A resposta do detector (por exemplo, a área do pico cromatográfico) é registrada para cada padrão. Uma curva de calibração é construída plotando a resposta do detector em função da concentração dos padrões. Essa curva é usada para calcular a concentração de analitos nas amostras desconhecidas com base em suas respostas cromatográficas (FIGUEIREDO; TFOUNI, 2013).

Os padrões internos, por sua parte, são compostos adicionados às amostras e que são quimicamente semelhantes aos analitos de interesse, mas não estão presentes naturalmente nas amostras. Após a separação cromatográfica, a razão entre a área do pico do analito e a área do pico do padrão interno é calculada. Isso corrige variações nas condições experimentais e na resposta do detector. A concentração do analito é calculada

comparando essa razão com a de padrões conhecidos (FIGUEIREDO; TFOUNI, 2013).

A preparação de amostras representa uma etapa crítica e determinante na análise por cromatografia líquida de alta eficiência e sua escolha depende da natureza da matriz da amostra e dos analitos em questão. Uma das técnicas frequentemente empregadas é a extração líquido-líquido. Nesse método, busca-se extrair os analitos da matriz da amostra para um solvente orgânico imiscível, seguido pela separação da fase orgânica e posterior injeção dessa fase no sistema HPLC. Essa abordagem se mostra útil em amostras que contenham analitos apolares. Outra técnica relevante é a extração em fase sólida (SPE), que envolve a passagem da amostra por uma coluna preenchida com uma fase sólida seletiva. Nesse processo, os analitos são retidos enquanto as impurezas são lavadas. Posteriormente, os analitos são eluídos da coluna e introduzidos no sistema HPLC (AVILA *et al.*, 2021).

Em situações em que a extração não é necessária, a diluição simples da amostra com um solvente apropriado pode ser suficiente. No entanto, é crucial planejar essa diluição com cuidado para evitar diluições excessivas que possam impactar a sensibilidade da análise. Por fim, em análises de amostras biológicas, como plasma ou soro, pode ser necessária a precipitação de proteínas. Isso é geralmente realizado mediante o uso de solventes orgânicos ou ácidos, visando à remoção das proteínas antes da injeção da amostra no sistema HPLC (ALVES FILHO, 2014).

O controle de qualidade e a validação são procedimentos de extrema importância na garantia da precisão e confiabilidade dos resultados obtidos por meio da HPLC. Primordialmente, a preparação de padrões de calibração com concentrações conhecidas representa um passo essencial para a quantificação precisa dos analitos. A elaboração criteriosa desses padrões e sua análise paralela com as amostras são práticas inegociáveis (FREITAS, 2013).

A reprodutibilidade do método deve sermeticulosamente verificada por meio da realização de análises em diferentes momentos, por distintos operadores e, se aplicável, em equipamentos diversos. A determinação dos Limites de Detecção (LOD) e de Quantificação (LOQ) é crucial para avaliar a sensibilidade do método. O LOD representa a menor concentração detectável, enquanto o LOQ corresponde à menor concentração que pode ser quantificada com precisão (AVILA *et al.*, 2021).

A avaliação da recuperação dos analitos é realizada mediante a adição de quantidades conhecidas de analitos às amostras, seguida da comparação dos resultados com as concentrações teóricas esperadas. Os parâmetros de precisão e exatidão são determinados por meio da análise de amostras de controle de qualidade e sua comparação com os valores de referência, garantindo a robustez do método. A linearidade do método deve ser verificada em uma faixa de concentrações apropriada, proporcionando uma avaliação abrangente da resposta analítica. Por fim, a estabilidade das amostras e dos padrões é um ponto crucial, visando a assegurar que não ocorram alterações significativas

durante o armazenamento (AVILA *et al.*, 2021).

A implementação rigorosa de práticas de controle de qualidade e validação é essencial para garantir que o método de HPLC seja confiável, preciso e esteja em conformidade com os requisitos regulatórios, quando aplicáveis. Essas medidas são indispensáveis para garantir a qualidade dos resultados analíticos em diversos campos de aplicação, desde pesquisas científicas até a indústria farmacêutica e de alimentos (CHEIRAN, 2018).

## CONCLUSÃO

A análise quantitativa de compostos complexos por cromatografia líquida de alta eficiência demonstrou ser um recurso essencial em diversas áreas, incluindo a química farmacêutica, a química ambiental e a indústria de alimentos. Dessarte, explorou-se nesta investigação as estratégias, desafios e avanços associados a essa técnica analítica, abordando questões que vão desde a seleção de colunas e condições de execução até a importância da calibração e controle de qualidade.

Os principais resultados destacam a versatilidade do HPLC na análise de compostos complexos, permitindo a separação eficaz e a quantificação precisa de analitos em uma ampla gama de matrizes. As estratégias de detecção, como a detecção UV-Vis, a detecção de fluorescência e a espectrometria de massas, garantem opções positivas para abordar variados tipos de analitos, aumentando a seletividade e a sensibilidade da análise.

Enfatizou-se, ainda, a relevância da calibração e do controle de qualidade por serem etapas fidedignas para garantir resultados confiáveis, bem como a validação do método para atender a requisitos regulatórios.

Por conseguinte, sugere-se que pesquisas futuras investiguem a integração de técnicas de HPLC com outras tecnologias analíticas avançadas na prática, como a espectrometria de massas de alta resolução e a cromatografia líquida acoplada à espectrometria de fluorescência. Além disso, a otimização de métodos de preparo de amostras e a busca por abordagens mais sustentáveis na cromatografia líquida representam direções promissoras para os avanços constantes da química contemporânea.

## REFERÊNCIAS

ABRÃO, Lailah Cristina de Carvalho *et al.* Desenvolvimento de um disco de extração em fase sólida molecularmente impresso para a pré-concentração seletiva de tetraciclinas em amostras de água seguida de análise por HPLC-UV. 2013. Disponível em: <http://bdtd.unifal-mg.edu.br:8080/>. Acesso em: 30 ago. 2023.

ALVES FILHO, Elenilson de Godoy. Análises de compostos orgânicos não específicos no esgoto sanitário doméstico através das técnicas RMNq e HPLC-(UV/MS)-SPE-ASS-NMR. 2014. Disponível em: <https://repositorio.ufscar.br/>. Acesso em: 02 set. 2023.

AVILA, Milena Pendeza de *et al.* **Determinação de compostos aromáticos nitrogenados fixos e voláteis em matrizes asfálticas empregando cromatografia líquida de alta eficiência (HPLC).** 2021. Disponível em: <https://repositorio.ufsm.br/>. Acesso em: 01 set. 2023.

CHEIRAN, Kamila Patikowski. **Determinação do perfil de compostos fenólicos e nitrogenados de cervejas artesanais por HPLC-DAD-ESI-MS/MS.** 2018. Disponível em: <https://www.lume.ufrgs.br/>. Acesso em: 29 ago. 2023.

FACHIN, O. **Fundamentos de Metodologia.** 5<sup>a</sup> edição. Revista e atualizada pela norma da ABNT 14724, de 30/12/2005 Ed. Hora Saraiva. Disponível em: <http://maratavarespsictics.pbworks.com/>. Acesso em: 28 ago. 2023.

FIGUEIREDO, Leonardo Elias; TFOUNI, Elia. **Síntese, caracterização, reatividade química e atividade biológica de nitrosilo complexos de rutênio ligados ao peptídeo penetrador de células TAT-48-60 e ao anticorpo contra células tumorais mamárias transtuzumab.** 2013. Disponível em: <https://repositorio.usp.br/>. Acesso em: 02 set. 2023.

FREITAS, Daniela Cristina Parrinha. **Caracterização fenólica de azeites virgens provenientes da cultivar galega vulgar e validação do método por HPLC.** 2013. Instituto Politécnico de Beja. Escola Superior Agrária. Disponível em: <http://repositorio.ipbeja.pt:8080/>. Acesso em: 05 set. 2023.

GODOY, A. S. **Introdução à pesquisa qualitativa e suas possibilidades.** RAE - Revista de Administração de Empresas, São Paulo, v. 35, n. 2, p. 57-63, 1995. Disponível em: <https://www.scielo.br/>. Acesso em: 28 ago. 2023.

LIMA, Margarida Lago. **Separação, identificação e caracterização dos compostos neutros da Pitch por HPLC-MS, ESI-MS/MS, GC-MS, FTIR-ATR e RMN e avaliação da sua atividade antioxidante e antibacteriana.** 2022. Disponível em: <https://repositorium.sdum.uminho.pt/>. Acesso em: 31 ago. 2023.

NEVES, J. L. **Pesquisa Qualitativa – Características, Usos e Possibilidades.** Caderno de Pesquisas em Administração, São Paulo, v.1, nº 3, 2º Sem./1996. Disponível em: <https://www.hugoribeiro.com.br/>. Acesso em: 28 ago. 2023.

SANTI, M. M. *et al.* **Determinação do perfil fitoquímico de extrato com atividade antioxidante da espécie medicinal Cordia verbenacea DC por HPLC-DAD.** Revista Brasileira de Plantas Medicinais, v. 16, p. 256-261, 2014. Disponível em: <https://www.scielo.br/>. Acesso em: 28 ago. 2023.

SILVA, Danielle Fernandes da. **Eficácia dos flavonóides hesperidina e naringenina e o fenol ácido isovanilílico complexados com Mg (II), para o controle da bactéria xanthomonas citri ssp. citri.** 2017. Disponível em: <https://repositorio.ufscar.br/>. Acesso em: 01 set. 2023.

TEIXEIRA, Natércia *et al.* **Estudo dos compostos fenólicos presentes em tintas ferrogállicas medievais obtidas através do uso de reconstruções históricas.** 2018. Disponível em: <https://sites.fct.unl.pt/>. Acesso em: 31 ago. 2023.

## CAPÍTULO 3

# INVESTIGAÇÃO QUÍMICA: A ESPECTROSCOPIA E A COMPUTAÇÃO COMO ALIADAS NA IDENTIFICAÇÃO ESTRUTURAL DE COMPOSTOS ORGÂNICOS

*Data de submissão: 07/09/2023*

*Data de aceite: 02/10/2023*

### **Vitor Cunha Baía**

Departamento de Química, Universidade  
Federal de Viçosa  
Viçosa – Minas Gerais  
<http://lattes.cnpq.br/1140822469366350>

### **André Filipe Leite Cardoso Araujo**

Departamento de Química, Universidade  
Federal de Viçosa  
Viçosa – Minas Gerais  
<http://lattes.cnpq.br/5823316354957654>

### **Elson Santiago Alvarenga**

Departamento de Química, Universidade  
Federal de Viçosa  
Viçosa – Minas Gerais  
<http://lattes.cnpq.br/7312563315673167>

**RESUMO:** Este capítulo descreve o papel da química computacional na identificação estrutural de compostos orgânicos. Analogia entre as investigações criminais e científicas é realizada para explicar as ferramentas computacionais utilizadas pelos químicos para obterem sucesso em suas pesquisas. Será mostrado a espectroscopia, os cálculos teóricos, os principais métodos computacionais, análises estatísticas, além de uma breve viagem ao mundo da química quântica, base para a investigação

através da modelagem molecular. Pesquisas mais recentes de elucidação estrutural envolvendo análise dos dados espectroscópicos com o auxílio de cálculos teóricos realizados na Universidade Federal de Viçosa serão apresentados.

**PALAVRAS-CHAVE:** Identificação estrutural, espectroscopia, química computacional, cálculos teóricos, métodos estatísticos.

### **CHEMICAL INVESTIGATION: SPECTROSCOPY AND COMPUTING AS ALLIES IN THE STRUCTURAL IDENTIFICATION OF ORGANIC COMPOUNDS**

**ABSTRACT:** This chapter describes the role of computational chemistry in the structural identification of organic compounds. An analogy between criminal and scientific investigations is made to explain the computational tools used by chemists to succeed in their research. Spectroscopy, theoretical calculations, the main computational methods, statistical analysis will be shown, in addition to a brief journey into the world of quantum chemistry, the basis for investigation through molecular modeling. More recent research on structural

elucidation involving analysis of spectroscopic data with the aid of theoretical calculations performed at the Universidade Federal de Viçosa will be presented.

**KEYWORDS:** Structural identification, spectroscopy, computational chemistry, theoretical calculations, statistical methods.

## INVESTIGACIÓN QUÍMICA: LA ESPECTROSCOPIA Y LA COMPUTACIÓN COMO ALIADAS EN LA IDENTIFICACIÓN ESTRUCTURAL DE COMPUESTOS ORGÁNICOS

**RESUMEN:** Este capítulo describe el papel de la química computacional en la identificación estructural de compuestos orgánicos. Se establecen analogías entre la investigación criminal y la científica para explicar las herramientas computacionales que utilizan los químicos para tener éxito en sus investigaciones. Se mostrarán la espectroscopia, los cálculos teóricos, los principales métodos computacionales, los análisis estadísticos y un breve viaje al mundo de la química cuántica, base de las investigaciones de modelización molecular. Se presentarán investigaciones más recientes de elucidación estructural que implican el análisis de datos espectroscópicos con la ayuda de cálculos teóricos realizados en la Universidad Federal de Viçosa.

**PALABRAS CLAVE:** Identificación estructural, espectroscopia, química computacional, cálculos teóricos, métodos estadísticos.

### 1 | INTRODUÇÃO

Existem inúmeras histórias presentes em livros, filmes e séries que nos cativam do começo ao fim, repletas de tramas intrigantes, reviravoltas, mistérios e suspense que têm um impacto significativo em nossas vidas. Sempre que nos deparamos com um enigma a ser desvendado, parece que isso aciona nosso instinto “detetive” e desperta nossa curiosidade. Se você já teve a oportunidade de ler histórias investigativas com personagens como Hercule Poirot (dos livros de Ágatha Christie), Sherlock Holmes (criado por Sir Arthur Conan Doyle), Arsène Lupin (Maurice Leblanc) ou já assistiu a filmes e séries como *Os Suspeitos*, *Roubando Vidas*, *Os Homens que não Amavam as Mulheres*, *Seven: Os Sete Crimes Capitais*, *C.S.I.: Investigação Criminal*, entre outros, comprehende exatamente do que estamos falando. A sensação de recompensa em desvendar o verdadeiro assassino, seguir as pistas e solucionar o crime é imensamente gratificante. Mas, espere um momento! Por que estamos mencionando livros, filmes e séries, se o tema deste capítulo é a química? Qual a conexão entre esses dois assuntos aparentemente distintos? Fique tranquilo, vamos explicar.

A química é uma ciência investigativa, assim como as histórias que acabamos de mencionar. E os cientistas são como os detetives, que estão em busca de respostas para diversas questões envolvendo átomos, moléculas e substâncias. Por exemplo, a investigação da fórmula molecular e estrutural de uma substância extraída da natureza, bem como a elucidação da estrutura de um produto sintetizado em laboratório, são

experiências cotidianas para os químicos. Tais investigações demandam um grande esforço, assemelhando-se ao trabalho de um detetive. É necessário seguir pistas, organizar informações, perseguir o alvo e, por fim, solucionar o problema. Esse é apenas um dos papéis da química entre as ciências naturais. Neste capítulo, abordaremos as ferramentas tecnológicas utilizadas pelos químicos orgânicos para a identificação ou elucidação estrutural de novas substâncias.

A Química Computacional emerge como uma poderosa aliada na elucidação estrutural de moléculas orgânicas, desempenhando um papel crucial no avanço da ciência e revolucionando nossa compreensão e projeto de moléculas. Os significativos avanços tecnológicos do século XX e início do século XXI proporcionaram uma abundância de dados de alta qualidade em diversas áreas científicas. O que antes era escasso, agora é profuso, impondo desafios na análise e processamento dessa avalanche de informações (Sayão e Sales, 2015; Hey e Trefethen, 2003).

A década de 1950 foi palco de uma verdadeira revolução instrumental (Sporer, 1961) que impactou não somente a química, mas todas as esferas científicas de maneira incontestável. O advento de novas tecnologias permitiu a obtenção confiável e em alta velocidade de dados experimentais, transformando radicalmente a forma como conduzimos nossas investigações científicas.

Embora os computadores tenham sido utilizados em química desde o avanço dos métodos espectroscópicos na década de 1950, foi apenas na década de 1980 que a Química Computacional ganhou notoriedade com a publicação pioneira de estudos nessa área (Rodrigues e Caridade, 2022). Ao combinar a “Química Teórica” com a mecânica quântica, a Química Computacional se revelou como uma peça-chave na investigação conformacional de compostos. Um marco crucial nesse percurso foi alcançado na década de 1980 com o desenvolvimento de uma sofisticada máquina automatizada, que funcionava como uma lente de aumento, permitindo análises precisas e eficientes do código genético contido nas biomoléculas (Araújo *et al.*, 2008). Atualmente, a comunidade científica recorre cada vez mais à utilização de computadores para enfrentar desafios que ultrapassam os limites da paciência e habilidades humanas (Sporer, 1961).

À medida que exploramos a elucidação estrutural de moléculas orgânicas, é imperativo compreender a grande importância da Química Computacional e dos cálculos teóricos como ferramentas complementares nesse processo. Nesta primeira seção, mergulharemos nos princípios e nas notáveis contribuições da espectroscopia para a identificação de substâncias. Adicionalmente, discorreremos sobre as aplicações de alguns métodos de análise e interpretação de dados estruturais.

## 2 | INICIANDO A INVESTIGAÇÃO: A ESPECTROSCOPIA COMO FERRAMENTA

A química é uma ciência belíssima! É considerada a ciência central e está conectada

a outras áreas das ciências naturais, como biologia, física, geologia e astronomia. Também faz parte das ciências exatas, juntamente com a física e a matemática, e tem um valor imenso para a humanidade. Dentro desse vasto campo da química, encontramos a química dos produtos naturais, que está intimamente ligada à química dos compostos de carbono, chamada química orgânica (Almeida Junior, 2021; Granato *et al.*, 2005).

Os pesquisadores dessa área se dedicam a isolar, quantificar e identificar a estrutura de substâncias naturais produzidas por plantas, animais e microrganismos. A identificação ou elucidação estrutural é uma etapa importante para os químicos orgânicos e é realizada com o auxílio de métodos espectroscópicos. A espectroscopia é baseada na interação das ondas eletromagnéticas com a matéria. A Figura 1 apresenta o espectro eletromagnético e os tipos de radiação existentes.

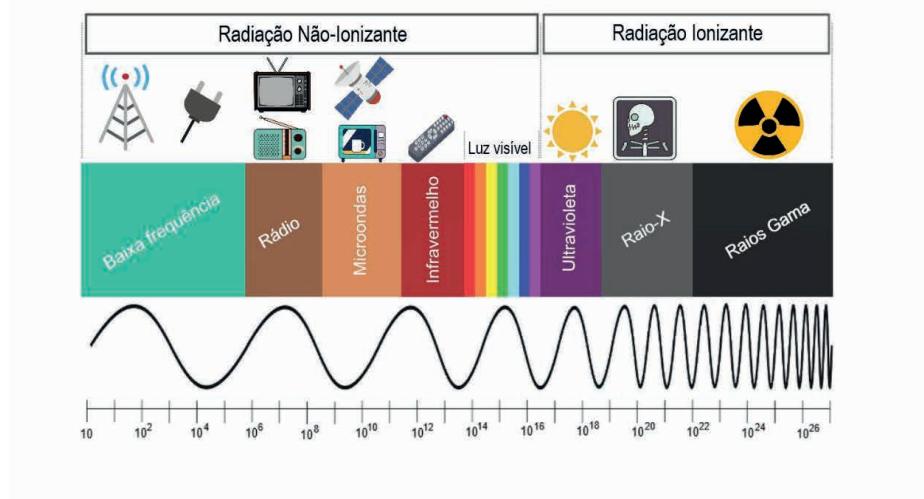


Figura 1 – Espectro Eletromagnético

Fonte: os autores.

Ao expor a matéria a um determinado tipo de radiação, ocorrem interações que resultam em mudanças na frequência e amplitude dessa radiação. Essas mudanças podem ser medidas e representadas graficamente como espectros de absorção. Como a absorção da radiação é específica para cada substância, cada espectro fornece informações que permitem ao pesquisador identificar alguns detalhes da substância analisada (Dieguez *et al.*, 2018). Os espectros fornecem pistas para desvendar o mistério envolvendo a estrutura molecular.

A Ressonância Magnética Nuclear (RMN) é um dos métodos espectroscópicos mais utilizados na identificação de substâncias, pois fornece informações específicas sobre a fórmula estrutural. Por meio da RMN é possível identificar as conexões existentes nas ligações carbono-carbono e carbono-hidrogênio presentes na molécula e assim propor

sua estrutura. Esse método é considerado uma forma de espectroscopia de absorção, baseado na absorção da radiação eletromagnética na faixa das ondas de rádio. As ondas de rádio não são ionizantes (veja no espetro eletromagnético da Figura 1), possuem baixa frequência e energia. Isso significa que durante uma análise de ressonância magnética nuclear, a potencial degradação da matéria não está associada a radiação proveniente desta técnica (Casabianca, 2020; Nascimento, 2016).

O fenômeno da RMN foi inicialmente descrito e publicado em 1946 por dois grupos de pesquisadores independentes. Um grupo da Universidade de Harvard, formado pelos físicos Purcell, Torrey e Pound; e outro da Universidade de Stanford, formado pelos físicos Bloch, Hansen e Packard. Em menos de dez anos após a sua descoberta, o primeiro espetrômetro de RMN para núcleos de hidrogênio já estava em uso para estudos relacionados a identificação estrutural de compostos orgânicos (Slichter, 1990; Abragam, 1983).

Na RMN, quando uma amostra contendo núcleos de hidrogênio ( $^1\text{H}$ ) e carbono ( $^{13}\text{C}$ ) é exposta a um campo magnético, ela tem a capacidade de absorver radiação na região das ondas de rádio. Esse processo ocorre devido a um fenômeno chamado precessão, em que o núcleo gira em torno do seu próprio eixo (à semelhança de um pião cambaleando) com uma frequência proporcional ao campo magnético aplicado. Quando a amostra é exposta a ondas de rádio com essa mesma frequência, ocorre a absorção de energia. Esse é o momento em que o núcleo entra em ressonância com a onda eletromagnética incidente. É por isso que essa técnica é chamada de Ressonância Magnética Nuclear (Nascimento, 2016; Pavia *et al.*, 2015).

A instrumentação da RMN comprehende um ímã supercondutor (magneto), um console (controlador onde os pulsos de radiofrequência são gerados) e um computador de onde os comandos são enviados para o console para aquisição dos espetros. Os espetros obtidos são armazenados no computador (Figura 2).

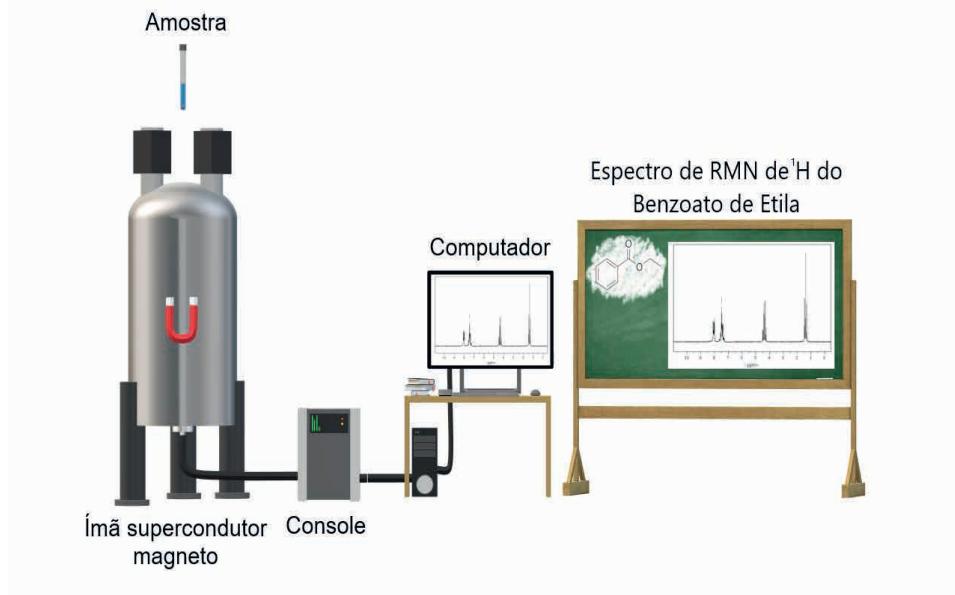


Figura 2 – Representação esquemática de um equipamento de RMN

Fonte: os autores.

Uma das vantagens do uso da RMN está no fato de ser uma técnica não invasiva e não destrutiva, preservando a amostra de alterações químicas garantindo sua integridade. Outra vantagem está no tempo de análise, com a obtenção de resultados mais rápidos em espectrômetros modernos (Pinto, Teixeira e Alvarenga, 2020; Silverstein, Webster e Kiemle, 2014).

Além da RMN, existem outros métodos espectrométricos que são utilizados na elucidação estrutural de compostos orgânicos (Tabela 1). Essas técnicas incluem a absorção no Ultravioleta-Visível (UV/Vis), Infravermelho (IV), Dicroísmo Circular Vibracional (VCD), Difração de Raios-X (DRX) e Espectrometria de Massas (EM). Cada uma dessas técnicas possui sua aplicação específica e contribui para o avanço das pesquisas em produtos naturais.

A absorção UV/Vis é usada para analisar a absorção de luz na faixa do ultravioleta e do visível por uma substância, fornecendo informações sobre a presença de certos grupos funcionais e conjugações eletrônicas. O IV é usado para analisar as vibrações moleculares, fornecendo informações sobre a presença de ligações químicas e grupos funcionais específicos. O VCD fornece informações sobre a configuração absoluta quando presentes em um composto orgânico. A DRX é usada para determinar a estrutura cristalina de compostos, revelando a disposição espacial dos átomos na rede cristalina (Pavia *et al.*, 2015; Barbosa, 2007; Napolitano *et al.*, 2007; Perkampus, 1992).

A espectrometria de massas é uma técnica usada na determinação da massa

molecular de um composto e fornece informações sobre a composição elementar e a estrutura da molécula. Esses métodos espectrométricos são essenciais para a identificação e caracterização dos compostos, permitindo a compreensão de suas propriedades e comportamento químico (Silverstein, Webster e Kiemle, 2014).

Métodos	Região do Espectro Eletromagnético	Principal informação obtida
Ressonância Magnética Nuclear (RMN)	Ondas de rádio	Arranjo específico de cada átomo de carbono e hidrogênio do composto orgânico
Infravermelho (IV)	Infravermelho	Grupos funcionais presentes no composto
Ultravioleta-visível (UV-Vis)	Visível e ultravioleta	Ligações π conjugadas presentes no composto
Difração de Raios-X (DRX)	Raio-X	Organização espacial dos átomos
Dicroísmo Circular Vibracional (VCD)	Infravermelho	Determinação da configuração absoluta e relativa de grupos quirais presentes no composto
Espectrometria de Massas (EM)	Radiação ionizante	Determinação da massa molecular do composto

Tabela 1 – Principais métodos espectroscópicos utilizados em elucidação estrutural de compostos orgânicos

No entanto, é importante mencionar que, apesar dos avanços dessas técnicas, há casos em que a identificação estrutural apenas pela interpretação dados espectrométricos podem produzir inconsistências. Alguns compostos podem ter estruturas complexas ou características que não são facilmente discerníveis por essas técnicas. Nesses casos, é comum utilizar uma combinação de várias técnicas analíticas para obter uma caracterização mais completa e precisa da estrutura do composto em estudo (Baía *et al.*, 2023; Pinto *et al.*, 2022; Oliveira *et al.*, 2018).

De fato, a complexidade de muitas estruturas orgânicas, bem como os desafios associados ao isolamento e purificação de produtos naturais, são fatores que limitam o estabelecimento, de forma inequívoca, da estrutura e estereoquímica correta de compostos orgânicos. Nesses casos a química computacional e suas ferramentas que envolvem cálculos teóricos têm sido uma grande aliada dos químicos.

### 3 I AMPLIANDO A INVESTIGAÇÃO: CÁLCULOS TEÓRICOS COMO FERRAMENTA COMPLEMENTAR

Nas últimas décadas, temos testemunhado um considerável avanço nas Tecnologias da Informação e Comunicação (TICs), abrangendo o uso da computação para produzir, transmitir, armazenar, acessar e utilizar diversos tipos de informações. Atualmente, é praticamente impossível afastar-se da tecnologia, pois muitas atividades do nosso dia a dia

dependem da internet e de dispositivos eletrônicos.

Na área da química, a computação desempenha um papel importante no estudo de átomos e moléculas, por meio de uma técnica chamada *modelagem molecular*. Podemos definir modelagem molecular como um conjunto de métodos computacionais aplicados para fazer previsões sobre diferentes sistemas moleculares como sólidos, líquidos, gases, plasmas, interfaces e até mesmo organismos biológicos – tudo através de programas de computador. Além disso, a computação também é utilizada para realizar cálculos e obter informações sobre propriedades de moléculas reais ou mesmo de moléculas que ainda não foram sintetizadas. A combinação dessas duas áreas, química e computação, resulta no campo da química computacional (Paulo, Rodrigues e Caridade, 2022).

Através dos programas de computador para modelagem molecular é possível desenhar e manipular a estrutura química na tela do computador, criando conexões entre átomos ou moléculas. Com uma interface gráfica de usuário, a estrutura pode ser visualizada em três dimensões (estrutura 3D). O computador interpreta a estrutura desenhada como um sistema de coordenadas espaciais. Grande parte dos programas utiliza coordenadas cartesianas no espaço xyz. A Figura 3 ilustra a representação da molécula de etanol na forma de coordenadas cartesianas xyz.

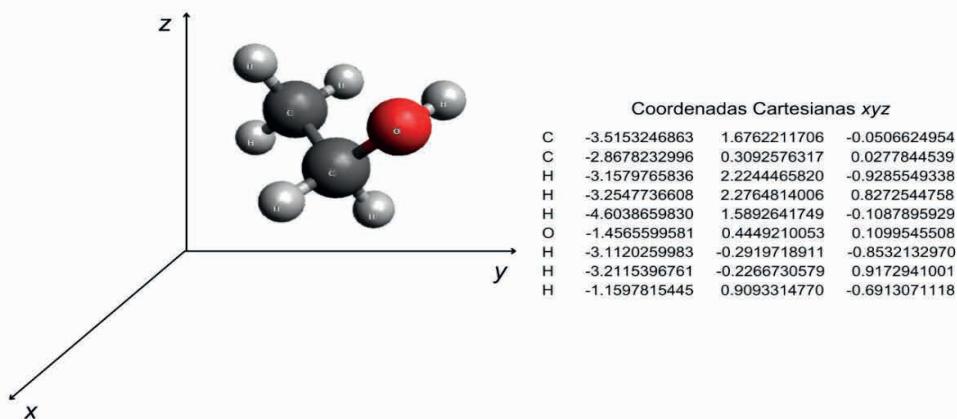


Figura 3 – Coordenadas cartesianas da molécula de etanol, obtidas através do software Avogadro (gratuito)

Fonte: os autores.

Muitos químicos orgânicos têm utilizado a química computacional como uma ferramenta complementar para realizar cálculos teóricos de deslocamento químico de RMN, visando a identificação de compostos. Os cálculos funcionam como provas adicionais para determinar a estrutura correta da molécula, assim como provas adicionais auxiliam os

detetives a solucionarem um mistério.

Os cálculos envolvem algumas etapas, descritas a seguir e ilustradas na Figura 4. Inicialmente, é criada a estrutura tridimensional (3D) da molécula, que é submetida a uma busca conformacional para encontrar as diferentes conformações possíveis. Posteriormente, os conformeros são submetidos à otimização de geometria, onde o programa busca a estrutura molecular mais estável, ou seja, a posição dos átomos que representa um mínimo de energia. Outra etapa envolve a determinação das constantes de blindagem de RMN, que podem ser convertidas em valores de deslocamentos químicos (Bachrach, 2014; Jensen, 2007). Cada uma dessas etapas utiliza um método computacional específico e um conjunto de bases (falaremos mais sobre eles adiante). A etapa final consiste em avaliar estatisticamente se os valores de deslocamento químico calculados estão bem correlacionados com os valores experimentais, aqueles obtidos por meio da análise espectroscópica.

Os cálculos são realizados através de programas de computador desenvolvidos para este fim e disponíveis para diferentes sistemas operacionais. O avanço da tecnologia e a fabricação de processadores mais robustos propiciaram maior velocidade na obtenção dos resultados. Softwares como Gaussian, Spartan, ACD/Labs, ChemBioDraw, Chemcraft, Avogadro, MestreNova e Origin estão disponíveis e recebem atualizações recorrentes (Carvalho, 2018; Bachrach, 2014).

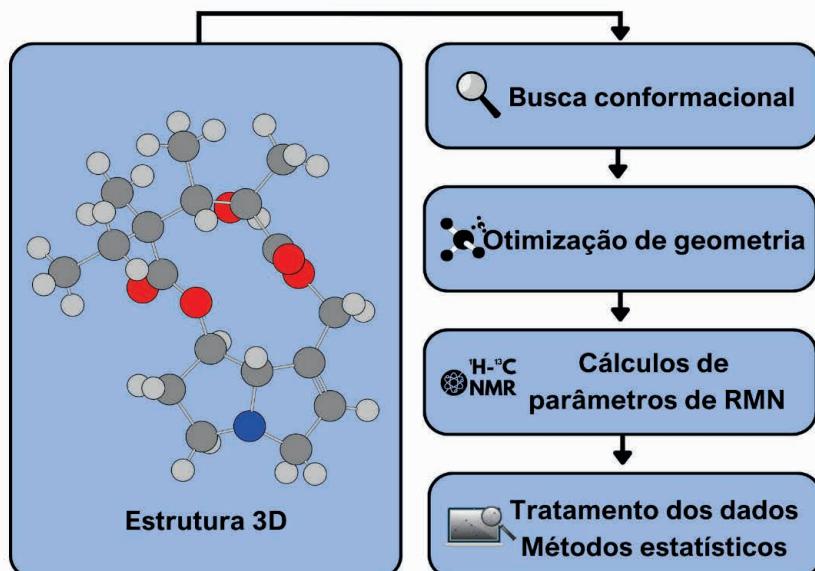


Figura 4 – Principais etapas para identificação estrutural assistida por cálculos teóricos

Fonte: os autores.

Na última década, muitos artigos científicos relatando identificação de produtos naturais e sintéticos foram publicados (Costa *et al.*, 2021; Sá *et al.*, 2020). Na última seção deste capítulo, forneceremos as referências das pesquisas mais recentes desenvolvidas pelo Grupo de Pesquisa de Produtos Naturais e Síntese de Agroquímicos da Universidade Federal de Viçosa (UFV).

Muitas estruturas orgânicas relatadas na literatura estão sendo revistas e corrigidas com o auxílio dessas ferramentas, favorecendo ainda mais a área de química orgânica. Por meio de cálculos teóricos de parâmetros de RMN, Martorano e colaboradores (2021) contribuíram para a confirmação da estrutura de derivados de Helianuol, uma classe de sesquiterpenos isolados de esponjas marinhas e estudados inicialmente por Morimoto e colaboradores (2006).

Os cálculos teóricos são acompanhados de análises estatísticas para comparação dos dados experimentais com os dados calculados. Elas fornecem resultados confiáveis sobre quais deslocamentos químicos de RMN calculados mais se ajustam aos deslocamentos químicos de RMN experimentais (Baía *et al.*, 2023; Pinto *et al.*, 2022).

O estudo de moléculas envolvendo química computacional pode ser feito por meio de duas abordagens distintas: a mecânica molecular, que utiliza as leis da física clássica para prever as propriedades moleculares, e a teoria da estrutura eletrônica proposta pela mecânica quântica. A partir da década de 1990, com o avanço da computação, os métodos que envolvem cálculos teóricos baseados na mecânica quântica se tornaram mais populares entre os químicos. Isso aconteceu porque esses métodos oferecem uma descrição mais precisa e detalhada das moléculas, levando em consideração os efeitos quânticos que podem afetar suas propriedades (Paulo, Rodrigues e Caridade, 2022; Alcacer, 2019). Para entendermos melhor os métodos computacionais utilizados na química, é importante relembrar a contribuição de Schrödinger para a mecânica quântica.

## 4 | SCHRÖDINGER E A INVESTIGAÇÃO QUÂNTICA

No século XX, com o surgimento da mecânica quântica, cientistas começaram a desenvolver métodos matemáticos para estudar as propriedades da matéria e resolver problemas que não podiam ser explicados pela mecânica clássica. Diversos cientistas renomados, como Planck, Einstein, Bohr, Schrödinger, Heisenberg, Dirac e outros, fizeram contribuições significativas para o desenvolvimento dessa área, em resposta a questões relacionadas à dualidade onda-partícula da matéria e energia (Lewars, 2011; Einstein, 2006).

Na década de 1920, Erwin Schrödinger propôs uma descrição amplamente conhecida pelos químicos, que envolve a aplicação de uma equação para explicar a dinâmica dos sistemas eletrônicos. Essa equação, conhecida como Equação de Schrödinger, descreve o comportamento dos átomos e moléculas em termos de funções de onda (Alcacer, 2019;

Lewars, 2011).

A solução da Equação de Schrödinger fornece um conjunto de funções de onda que descrevem o comportamento dos átomos ou moléculas. Essas funções de onda representam as densidades de probabilidades de encontrar elétrons ao redor do núcleo. Essa abordagem matemática permite aos químicos obterem informações sobre as propriedades eletrônicas dos sistemas, que são essenciais para compreender a estrutura molecular, a reatividade química e uma variedade de propriedades das substâncias, como energia de ligação, espectros eletrônicos e propriedades magnéticas (Bachrach, 2014).

Portanto, a solução da Equação de Schrödinger e as funções de onda associadas desempenham um papel fundamental na descrição dos átomos e moléculas, fornecendo uma base teórica sólida para a química computacional permitindo a realização de cálculos teóricos precisos para uma ampla gama de aplicações químicas.

Um grande desafio surge quando tentamos resolver a equação de Schrödinger. Ela possui solução exata apenas para o átomo de hidrogênio devido à sua simplicidade. Quando se trata de moléculas mais complexas (com mais de um elétron), a equação se torna difícil e sem solução analítica (Levine, 2014).

Para contornar o problema, ao longo dos anos foram desenvolvidas diversas abordagens e métodos computacionais para resolver a Equação de Schrödinger para sistemas com mais de um elétron (átomos polieletônicos). Essas abordagens envolvem simplificações e aproximações que permitem obter resultados úteis e precisos o suficiente para muitas aplicações químicas. A seguir, abordaremos algumas das estratégias comumente utilizadas na resolução aproximada da Equação de Schrödinger.

## 5 | DESVENDANDO O MISTÉRIO: OS MÉTODOS COMPUTACIONAIS

Os métodos utilizados na simulação de substâncias químicas podem ser classificados em três categorias, que, por sua vez, se subdividem em classificações mais específicas. São elas: (1) o método empírico, representado pela estratégia de **mecânica molecular**; (2) métodos quânticos, representados pelo **método semiempírico, ab initio** e **funcional da densidade**; e, por fim, (3) os métodos híbridos, que combinam as duas abordagens anteriores (Oliveira, 2018).

O **método de mecânica molecular** interpreta a estrutura da molécula unicamente em termos da mecânica clássica de Newton, baseando-se no modelo de “bolas e molas” como representações das ligações químicas.

O **método semiempírico** utiliza aproximações para resolver a equação de Schrödinger, empregando parâmetros experimentais como forma de simplificação dos cálculos. Isso reduz substancialmente o custo computacional dos cálculos (Alcacer, 2019; Levine, 2014).

O **método ab initio** (expressão latina que significa: *desde o início*) não utiliza

parâmetros experimentais do sistema molecular, mas aplica várias aproximações matemáticas para resolver a equação de Schrödinger, através do uso de funções de onda para descrever orbitais atômicos para o cálculo de propriedades moleculares (Latour, 2017; Levine, 2014).

O método **Teoria do Funcional da Densidade** (DFT, do inglês *Density Functional Theory*) determina propriedades a partir de cálculos baseados na densidade eletrônica do sistema molecular. A grande vantagem desse método é que a densidade eletrônica é uma variável que depende apenas das coordenadas do espaço ( $x$ ,  $y$ ,  $z$ ) do sistema (Lewars, 2011; Jensen, 2007). É muito utilizada nas áreas da química orgânica e química dos produtos naturais, pois oferece um bom equilíbrio entre o custo operacional e a exatidão nos resultados. Para o cálculo da densidade eletrônica, utilizamos aproximações desenvolvidas por diversos pesquisadores, chamados funcionais. Por isso o nome Teoria do *Funcional da Densidade*.

Becke foi quem desenvolveu o primeiro funcional a ser amplamente utilizado e é geralmente denominado como “B”. Lee, Yan e Parr desenvolveram o funcional “LYP”. Essas duas propostas deram origem ao funcional B3LYP, um dos mais conhecidos e utilizados na química orgânica computacional (Becke e Axel, 1988; 1993a,b; Lee, Yang e Parr, 1988). Outros funcionais existentes incluem o M06-2X, mPW1PW91, CAM e FT97.

Agora, você pode estar se perguntando: como vamos fazer esses cálculos? Parece complexo, não é mesmo? Sim, apesar da complexidade, pois são muitas informações e equações envolvidas, os principais softwares de química computacional dispõe, com apenas alguns cliques do mouse, de boa parte dos métodos que acabamos de resumir. Se tudo o que relatamos é apenas um resumo, e já deixa nossos neurônios “queimando”, imagine o que é estudar a fundo a mecânica quântica? Tudo isso é excepcional! Entretanto, ainda não acabamos a investigação. Precisamos concluir-la.

## 6 | CONCLUINDO A INVESTIGAÇÃO: OS MÉTODOS ESTATÍSTICOS

Para fins de elucidação estrutural de compostos orgânicos, apenas o uso dos métodos computacionais descritos na seção anterior não é suficiente para afirmar se a metodologia escolhida foi aplicada corretamente para a estrutura da molécula estudada. Com os resultados dos cálculos nas mãos, ou melhor, com os resultados dos cálculos disponíveis na tela do computador, são necessários o tratamento e a interpretação desses dados. Para isso, existem métodos ou parâmetros estatísticos, cujo objetivo consiste em avaliar a qualidade do ajuste dos dados calculados e experimentais. Muitos métodos simples foram desenvolvidos, como o MAE, CMAE e RMSD; e outros mais complexos como o CP3, DP4, DP4+, DP5 e ANN-PRA têm sido amplamente utilizados na elucidação estrutural de produtos naturais complexos (Ermanis *et al.*, 2019, 2016).

O **erro absoluto médio** (MAE, do inglês *Mean Absolute Error*), é um método de

simples correlação que representa o desvio médio entre os valores de deslocamentos químicos calculados ( $\delta_{\text{calc}}$ ) e experimentais ( $\delta_{\text{exp}}$ ), obtido através da média aritmética do somatório do valor absoluto da diferença entre os deslocamentos químicos calculados e experimentais, conforme equação abaixo:

$$MAE = \frac{\sum_n |\delta_{\text{calc}} - \delta_{\text{exp}}|}{n}$$

O **erro absoluto médio corrigido** (CMAE, do inglês *Corrected Mean Absolute Error*) é similar à equação do MAE, porém utiliza os valores de deslocamentos químicos calculados escalonados ( $\delta_{\text{esc}}$ ). Os valores escalonados são obtidos por meio de fatores de escalonamento e visam reduzir possíveis erros sistemáticos dos deslocamentos calculados. A equação do CMAE é expressa por:

$$CMAE = \frac{\sum_n |\delta_{\text{esc}} - \delta_{\text{exp}}|}{n}$$

O **desvio médio quadrático** (RMSD, do inglês *Root Mean Square Deviation*) utiliza a raiz quadrada da média aritmética do somatório do valor absoluto da diferença entre os deslocamentos químicos calculados e experimentais elevados ao quadrado, conforme abaixo:

$$RMSD = \sqrt{\frac{\sum_n |\delta_{\text{calc}} - \delta_{\text{exp}}|^2}{n}}$$

O método estatístico denominado **CP3** foi desenvolvido por Smith e Goodman (2009) e propõe a comparação de dois conjuntos de dados experimentais com os valores calculados para duas estruturas candidatas, indicando a correlação do conjunto de dados com a estrutura candidata correspondente (Smith e Goodman, 2009).

Smith e Goodman (2010) também desenvolveram o método **DP4**, que compara um conjunto disponível de dados experimentais com duas ou mais estruturas candidatas, indicando aquela que mais se aproxima dos dados experimentais. Esses métodos estatísticos podem ser encontrados no endereço eletrônico do grupo de pesquisa de Smith e Goodman, mantido pela Universidade de Cambridge (<https://www-jmg.ch.cam.ac.uk/tools/nmr/>).

O **DP4+** é o método DP4 modificado por Grimblat e colaboradores (2015), que propuseram uma alteração na formulação estatística de Smith e Goodman, obtendo resultados precisos e confiáveis. O DP4+ foi construído com 16 parâmetros estatísticos [ $\mu$  (média),  $\sigma$  (desvio padrão), e  $v$  (graus de liberdade)], que dependem do nível de teoria utilizado. Este método está disponível para uso através de uma planilha no formato Excel, no endereço eletrônico mantido pelos desenvolvedores (<https://sarotti-nmr.weebly.com>).

Recentemente, Howarth e Goodman (2022) apresentaram o método **DP5**, que

de forma semelhante ao DP4, fornece a probabilidade de uma estrutura candidata ser correta. No entanto, em contraste com a DP4, a DP5 calcula probabilidades autônomas normalizadas, isto é, permite que o usuário apresente uma ou várias estruturas candidatas sem a necessidade de presumir que alguma delas esteja correta. Como resultado, a DP5 é capaz de abordar perguntas distintas daquelas tratadas pela DP4.

Outro método estatístico é o **ANN-PRA**, baseado em rede neural artificial, que compara um conjunto de dados experimentais a uma estrutura candidata, usando um conjunto de diferentes parâmetros estatísticos (MAD, RMSD, erro máximo, inclinação, interceptação e  $R^2$ , entre outros) obtido a partir da correlação entre dados experimentais e calculados de RMN de  $^{13}\text{C}$  para a estrutura estudada (Sarotti, 2013).

Lembramos que, como estamos na era da inteligência artificial, novas ferramentas estatísticas deverão surgir no futuro. Isso é só o começo!

## 7 | AS INVESTIGAÇÕES MAIS RECENTES

Esta seção se destina a apresentar os trabalhos mais recentes do grupo de pesquisa de Produtos Naturais e Síntese de Agroquímicos da Universidade Federal de Viçosa. As referências deverão ser utilizadas para leitura dos trabalhos na íntegra.

Baía e colaboradores (2023) realizaram o isolamento e identificação estrutural de um novo alcaloide pirrolizidínico obtido da planta *Crotalaria paulina*. A elucidação estrutural foi feita por meio de interpretação de dados espectroscópicos de RMN e cálculos teóricos de DFT. Alcaloides pirrolizidínicos (APs) são metabólitos secundários encontrados em diversas plantas e são conhecidos por possuírem diversas atividades biológicas.

Oliveira e colaboradores (2018) também isolaram e elucidaram um novo alcaloide pirrolizidínico, que foi denominado etilcrotalina. O composto foi isolado e purificado das partes aéreas de *Crotalaria paulina*. A elucidação estrutural foi assistida por cálculos teóricos.

Ainda utilizando a *Crotalaria paulina*, Oliveira e pesquisadores (2017) isolaram o alcaloide monocrotalina, que possui potencial aplicação na medicina. O composto foi caracterizado por espectroscopia no infravermelho (IR) e Raman com o apoio de cálculos de DFT.

Um novo alcaloide pirrolizidínico também foi isolado e purificado a partir das partes aéreas de *Crotalaria retusa* L. A pesquisa, conduzida por Pinto e colaboradores (2022), envolveu elucidação estrutural do alcaloide por meio de análises de espectros de RMN e cálculos computacionais.

Onze produtos naturais, incluindo um novo composto, foram obtidos do caule da planta *Conchocarpus mastigophorus*. As estruturas de todos os compostos foram elucidadas por métodos espectroscópicos. Para o novo composto, além da espectroscopia, foi utilizado cálculos teóricos para a determinação da configuração absoluta (Pinto *et al.*,

2022).

Cálculos teóricos também foram utilizados para confirmar a estrutura de uma lactama (amida cíclica), isolada das sementes de *Bunchosia glandulifera*. As lactamas são conhecidas por apresentarem diversas atividades farmacológicas, incluindo atividades antibacterianas e anti-inflamatórias (Blank *et al.*, 2023).

Pesquisas envolvendo síntese de agroquímicos têm se beneficiado da química computacional para identificação estrutural de seus produtos. Derivados de imidas cílicas foram elucidadas com sucesso por meio de cálculos teóricos. Ensaios biológicos demonstraram ótima atividade herbicida desses derivados (Torrent e Alvarenga, 2021).

Martins e colaboradores (2022) produziram um novo análogo de *a*-santonina, uma lactona sesquiterpêlica de origem natural conhecida por sua atividade antimalária. A substância foi caracterizada por espectroscopia e confirmada por cálculos teóricos.

Dois novos compostos dibromados também foram elucidados por meio da espectroscopia de RMN e cálculos computacionais. Adicionalmente, aspectos teóricos como energia de reação foi obtido por meio da computação (Carneiro, Aguiar e Alvarenga, 2020).

Além das pesquisas mencionadas, outros trabalhos com aplicação da química computacional foram realizados por nosso grupo de pesquisa. Podemos citar a determinação da estereoquímica relativa de isobenzofuranonas (Alvarenga *et al.*, 2019), interpretação de espectros vibrationais e cálculos teóricos de um álcool triterpeno isolado de *Mucuna pruriens* (Castaneda *et al.*, 2020), síntese e elucidação estrutural de um análogo de metabólito secundário (Pinto, Teixeira e Alvarenga, 2020) e a atribuição estereoquímica de dois novos epóxidos (Moraes *et al.*, 2018).

Concluímos este capítulo, reafirmando o poder da química computacional e suas ferramentas para a elucidação estrutural, tanto de novas substâncias quanto aquelas que necessitam de revisão e confirmação. Através da computação, a investigação tornou-se mais eficiente e os detetives da ciência tornaram-se mais capazes de desvendar mistérios.

## REFERÊNCIAS

ABRAMAG, A. **The Principles of Nuclear Magnetism**. Clarendon Press, 614 p., 1983.

ALCACER, L. **Introdução à Mecânica Quantica, com Aplicações à Química Computacional Moderna**. 3. ed., 352 p., IST Press, 2019.

ALMEIDA JUNIOR, S (Org). **Produtos Naturais e Suas Aplicações: da comunidade para o laboratório**. 330 p., Editora Científica Digital, 2021. v. 1.

ALVARENGA, E. S.; TEIXEIRA, M. G.; LOPES, D. T.; DEMUNER, A. J. **Computation and structural elucidation of compounds formed via epoxide alcoholysis**. Magnetic Resonance in Chemistry, v. 57, n. 4, p. 101–107, 1 abr. 2019.

ARAÚJO, N. D. DE; FARIAS, R. P. DE; PEREIRA, P. B.; FIGUEIRÊDO, F. M. DE; MORAIS, A. M. B. DE; SALDANHA, L. C.; GABRIEL, J. E. **A Era da Bioinformática: seu potencial e suas implicações para as ciências da saúde**. Estudos de Biologia, v. 30, n. 70/72, 2008.

BACHRACH, S. M. **Computational Organic Chemistry**. 2. ed. Department of Chemistry, Trinity University, San Antonio, TX: John, 2014.

BAIA, V. C.; OLIVEIRA, R. P.; ALVARENGA, E. S.; PINTO, B. N. S.; DEMUNER, A. J. **Exploring pyrrolizidine alkaloids in *Crotalaria paulina*: Isolation and identification of a promising compound**. Journal of Molecular Structure, v. 1292, p. 136171, 2023.

BARBOSA, L. C. A. **Espectroscopia no infravermelho: na caracterização de compostos orgânicos**. 189 p., Ed. UFV, 2007.

BECKE, A. D. **Density-functional exchange-energy approximation with correct asymptotic behavior**. Physical Review A, v. 38, n. 6, p. 3098–3100, 1 set. 1988.

\_\_\_\_\_. **Density-functional thermochemistry. III. The role of exact exchange**. The Journal of Chemical Physics, v. 98, n. 7, p. 5648–5652, 1993a.

\_\_\_\_\_. **A new mixing of Hartree–Fock and local density-functional theories**. The Journal of Chemical Physics, v. 98, n. 2, p. 1372–1377, 1993b.

BLANK, D. E.; DEMUNER, A. J.; BAÍA, V. C.; ALVARENGA, E. S.; CERCEAU, C. I.; MOURA, N. F. DE. **Structural elucidation of a lactam isolated from *Bunchosia glandulifera* and antioxidant activity**. Peer Review, v. 5, n. 1, p. 1–14, jul. 2023.

CARNEIRO, V. M. T.; AGUIAR, A. R.; ALVARENGA, E. S. **Assignment of the relative stereochemistry of two novel vicinal dibromo compounds using NMR and DFT-GIAO calculations**. Journal of Molecular Structure, v. 1212, 15 jul. 2020.

CARVALHO, F. S. **Cálculos teóricos e computacionais de estrutura eletrônica**. Dissertação (Mestrado) – Universidade Federal de Minas Gerais, 2018.

CASABIANCA, L. B. **Calculating nuclear magnetic resonance chemical shifts in solvated systems**. Magnetic Resonance in Chemistry, n. December 2019, p. 611–624, 2020.

CASTANEDA, S. M. B.; ALVARENGA, E. S.; DEMUNER, A. J.; GUIMARAES, L. M. **Vibrational spectra and theoretical calculations of a natural pentacyclic triterpene alcool isolated from Mucuna pruriens**. Structural Chemistry, v. 31, n. 2, p. 599–607, 1 abr. 2020.

COSTA, F. L. P.; ALBUQUERQUE, A. C. F. DE; FIOROT, R. G.; LIÃO, L. M.; MARTORANO, L. H.; MOTA, G. V. S.; VALVERDE, A. L.; CARNEIRO, J. W. M.; SANTOS JUNIOR, F. M. DOS. **Structural characterisation of natural products by means of quantum chemical calculations of NMR parameters: new insights**. Organic Chemistry Frontiers, v. 8, n. 9, p. 2019–2058, 1 jan. 2021.

DIEGUEZ, C. M. T.; MONTANHEIRO, L. V; CLETO, L. B.; BONFIM, M. J. C. **Os fundamentos quânticos da Ressonância Magnética Nuclear**. v. 40, p. 1–9, 2018.

EINSTEIN, A. **Física e realidade**. Revista Brasileira de Ensino de Física, v. 28, n. 1, p. 9–22, 2006.

ERMANIS, K.; PARKES, K. E. B.; AGBACK, T.; GOODMAN, J. M. **Expanding DP4: Application to drug compounds and automation.** *Organic and Biomolecular Chemistry*, v. 14, n. 16, p. 3943–3949, 2016.

\_\_\_\_\_. The optimal DFT approach in DP4 NMR structure analysis—pushing the limits of relative configuration elucidation. *Organic and Biomolecular Chemistry*, v. 17, n. 24, p. 5886–5890, 2019.

GRANATO, A. C.; OLIVEIRA, J. H. H. L. DE; SELEGHIM, M. H. R.; ROCHA, R. M.; PESSOA, C. O.; MORAES, M. O. **Produtos Naturais e Suas Aplicações.** *Quimica Nova*, v. 28, n. 2, p. 192–198, 2005.

GRIMBLAT, N.; ZANARDI, M. M.; SAROTTI, A. M. **Beyond DP4: An Improved Probability for the Stereochemical Assignment of Isomeric Compounds using Quantum Chemical Calculations of NMR Shifts.** *Journal of Organic Chemistry*, v. 80, n. 24, p. 12526–12534, 2015.

HEY, T.; TREFETHEN, A. **The Data Deluge: An e-Science Perspective.** Grid Computing. John Wiley & Sons, Ltd, 2003. p. 809–824.

HOWARTH, A.; GOODMAN, J. M. **The DP5 probability, quantification and visualisation of structural uncertainty in single molecules.** *Chemical Science*, v. 13, n. 12, p. 3507–3518, 2022.

JENSEN, F. **Introduction to computational chemistry.** 2. ed. West Sussex, England: John Wiley and Sons Ltd, 2007.

LATOUR, R. A. **Molecular Simulation Methods to Investigate Protein Adsorption Behavior at the Atomic Level.** Ducheyne, P. (Ed.). Comprehensive Biomaterials II. Oxford: Elsevier, 2017. p. 268–294.

LEE, C.; YANG, W.; PARR, R. G. **Development of the Colle-Salvetti correlation-energy formula into a functional of the electron density.** *Physical Review B*, v. 37, n. 2, p. 785–789, 15 jan. 1988.

LEVINE, I. N. **Quantum Chemistry.** 7. ed. Pearson, 700 p., 2014.

LEWARS, E. G. **Computational chemistry: Introduction to the theory and applications of molecular and quantum mechanics.** 2. ed. Springer Dordrecht, 664 p., 2011.

MARTINS, L. M. O. S.; SANTOS, J. O.; HOYE, T.; ALVARENGA, E. S. **Synthesis of a novel naphthalenone endoperoxide and structural elucidation by nuclear magnetic resonance spectroscopy and theoretical calculation.** *Magnetic Resonance in Chemistry*, v. 60, n. 1, p. 139–147, 2022.

MARTORANO, L. H.; BRITO, J. T.; ALBUQUERQUE, A. C. F. DE; FIOROT, R. G.; RIBEIRO, M. R.; VALVERDE, A. L. **Estudo das Estruturas Químicas dos Helianuois G e H por Cálculos Teóricos dos Deslocamentos Químicos de RMN de  $^1\text{H}$ .** v. 13, n. 5, p. 1140–1146, 2021.

MORAES, F. C.; ALVARENGA, E. S.; DEMUNER, A. J.; VIANA, V. M. **Assignment of the relative and absolute stereochemistry of two novel epoxides using NMR and DFT-GIAO calculations.** *Journal of Molecular Structure*, v. 1164, p. 109–115, 15 jul. 2018.

MORIMOTO, S.; SHINDO, M.; YOSHIDA, M.; SHISHIDO, K. **Syntheses of helianuois G and H; structure revision of the natural products.** *Tetrahedron Letters*, v. 47, n. 41, p. 7353–7356, 2006.

NAPOLITANO, H. B.; CAMARGO, A. J.; MASCARENHAS, Y. P.; VENCATO, I.; LARIUCCI, C. **Análise da difração dos Raios X. Revista Processos Químicos**, v. 1, n. 1, p. 35–45, 2007.

NASCIMENTO, C. **Ressonância Magnética Nuclear**. São Paulo, SP: Blucher, 2016.

OLIVEIRA, A. M. **Introdução à Modelagem Molecular para Química, Engenharia e Biomédicas: Fundamentos e Exercícios**. 1. ed. Appris Editora, 2018.

OLIVEIRA, R. P.; DEMUNER, A. J.; ALVARENGA, E. S.; BARBOSA, L. C. A.; MELO SILVA, T. DE. **A novel alkaloid isolated from *Crotalaria paulina* and identified by NMR and DFT calculations**. Journal of Molecular Structure, v. 1152, p. 337–343, 15 jan. 2018.

OLIVEIRA, R. P.; DEMUNER, A. J.; ALVARENGA, E. S.; PARMA, M. C.; BARBOSA, L. C. A.; MOURA GUIMARÃES, L. DE; AGUIAR, A. R. **Experimental and theoretical studies on the characterization of monocrotaline by infrared and Raman spectroscopies**. Journal of Molecular Structure, v. 1135, p. 228–233, 5 maio 2017.

PAULO, S.; RODRIGUES, J.; CARIDADE, P. **História da química computacional e do uso dos computadores em química**. História da Ciência e Ensino: construindo interfaces, v. 25, p. 140–153, 29 set. 2022.

PAVIA, D. L.; LAMPMAN, G. M.; KRIZ, G. S.; VYVYAN, J. R. **Introduction to Spectroscopy**. 5. ed. Stamford: Cengage Learning, 2015.

PERKAMPUS, H.-H. **UV-VIS Spectroscopy and Its Applications**. 1. ed. Berlin, Heidelberg: Springer Berlin Heidelberg, 1992.

PINTO, B. N. S.; ALVARENGA, E. S.; SANTOS, A. R.; OLIVEIRA, W. F.; PAULA, V. F. DE; OLIVEIRA, M. N.; JUNIOR, J. M. B.; ANDREA, A. N. **Structural Elucidation by NMR Analysis Assisted by DFT Calculations of a Novel Natural Product from *Conchocarpus Mastigophorus* (Rutaceae)**. Asian Journal of Organic Chemistry, v. 11, n. 6, 1 jun. 2022.

PINTO, B. N. S.; MOURA, G. A.; DEMUNER, A. J.; ALVARENGA, E. S. **Structural elucidation of a novel pyrrolizidine alkaloid isolated from *Crotalaria retusa* L.** Journal of Molecular Structure, v. 1254, 15 abr. 2022.

PINTO, B. N. S.; TEIXEIRA, M. G.; ALVARENGA, E. S. **Synthesis and structural elucidation of a phthalide analog using NMR analysis and DFT calculations**. Magnetic Resonance in Chemistry, v. 58, n. 6, p. 559–565, 1 jun. 2020.

ROBERT M. SILVERSTEIN, FRANCIS X. WEBSTER, DAVID J. KIEMLE, D. L. B. **Spectrometric Identification of Organic Compounds**. 8. ed. State University of New York: Wiley, 2014.

RODRIGUES, S. P. J.; CARIDADE, P. **História da química computacional e do uso dos computadores em química**. História da Ciência e Ensino: construindo interfaces, v. 25, p. 140–153, 2022.

SÁ, É. R. A. DE; COSTA, R. K. M.; SILVA, R. DOS S.; SILVA, A. F. S.; COELHO, T. L. S.; LIMA, F. DAS C. A. **Introduction to Computational Quantum Calculations in Ionic and Molecular Systems**. RCT - Revista de Ciência e Tecnologia, v. 6, n. 2020, p. 18, 2020.

SAROTTI, A. M. **Successful combination of computationally inexpensive GIAO  $^{13}\text{C}$  NMR calculations and artificial neural network pattern recognition: a new strategy for simple and rapid detection of structural misassignments**. Org. Biomol. Chem., v. 11, n. 29, p. 4847–4859, 2013.

SAYÃO, L.; SALES, L. **Guia de gestão de dados de pesquisa para bibliotecários e pesquisadores**. 90 p., 2015.

SLICHTER, C. P. **Principles of Magnetic Resonance**. Springer Series in Solid-State Sciences. v. 1, 1990.

SMITH, S. G.; GOODMAN, J. M. **Assigning the stereochemistry of pairs of diastereoisomers using GIAO NMR shift calculation**. Journal of Organic Chemistry, v. 74, n. 12, p. 4597–4607, 2009.

\_\_\_\_\_. **Assigning stereochemistry to single diastereoisomers by GIAO NMR calculation: The DP4 probability**. Journal of the American Chemical Society, v. 132, n. 37, p. 12946–12959, 2010.

SPORER, A. H. **The role of chemistry in computers**. Journal of Chemical Education, v. 38, n. 6, p. 323, 1 jun. 1961.

TORRENT, K. B. A.; ALVARENGA, E. S. **Synthesis and Identification of Epoxy Derivatives of 5-Methylhexahydroisoindole-1,3-dione and Biological Evaluation**. Molecules, v. 26, n. 7, 2021.

## CAPÍTULO 4

# PILHA DE ALIMENTOS: CONSTRUÇÃO DE UMA PILHA DE ALIMENTOS USANDO OS PRINCÍPIOS E MÉTRICAS DA QUÍMICA VERDE

---

Data da submissão: 08/09/2023

Data de aceite: 02/10/2023

### **Matheus Willian Santos de Freitas**

Instituto Federal do Rio de Janeiro,  
campus Duque de Caxias, Rio de Janeiro.  
<http://lattes.cnpq.br/8358686672178188>

### **Matheus César Côrtes Dias**

Instituto Federal do Rio de Janeiro,  
campus Duque de Caxias, Rio de Janeiro.  
<https://lattes.cnpq.br/0065074605506578>

### **Maryá Luísa Damasceno Oliveira**

Instituto Federal do Rio de Janeiro,  
campus Duque de Caxias, Rio de Janeiro.  
<http://lattes.cnpq.br/5763617309188819>

### **Ana Paula Bernardo dos Santos**

Instituto Federal do Rio de Janeiro,  
campus Duque de Caxias, Rio de Janeiro.  
<http://lattes.cnpq.br/8002861099949380>

### **Lívia Tenorio Cerqueira Crespo Vilela**

Instituto Federal do Rio de Janeiro,  
campus Duque de Caxias, Rio de Janeiro.  
<http://lattes.cnpq.br/0939589157675437>

### **Queli Aparecida Rodrigues de Almeida**

Instituto Federal do Rio de Janeiro,  
campus Duque de Caxias, Rio de Janeiro.  
<https://lattes.cnpq.br/5823429559444666>

**RESUMO:** As atividades experimentais no ensino de Química possuem um papel fundamental para aprendizagem eficaz dessa ciência, uma vez que possibilitam que os alunos consigam visualizar teorias trabalhadas em sala de aula, entendendo sua aplicação prática e permitem também a percepção e problematização de fenômenos químicos fora do ambiente escolar. Entretanto, muitas das vezes focamos apenas nos benefícios que tais atividades podem trazer, ignorando os impactos ruins que podem causar, principalmente ao meio ambiente. Pensando nisso, os autores elaboraram um trabalho utilizando métricas de Química Verde para mostrar que uma atividade experimental pode ser igualmente eficiente sem trazer tantos prejuízos ambientais como as práticas mais utilizadas.

**PALAVRAS-CHAVE:** *Química Verde, Métricas holísticas, Pilha de Alimentos.*

**FOOD BATTERY: BUILDING A FOOD STACK USING THE PRINCIPLES AND METRICS OF GREEN CHEMISTRY**

**ABSTRACT:** The experimental activities in the teaching of Chemistry have a

fundamental role for effective learning of this science, since they allow students to visualize theories worked in the classroom, understanding their practical application and also allow the perception and problematization of chemical phenomena outside the school environment. However, we often focus only on the benefits that such activities can bring, ignoring the bad impacts they can cause, especially to the environment. With this in mind, the authors developed a study using Green Chemistry metrics to show that an experimental activity can be equally efficient without bringing as much environmental damage as the most used practices.

**KEYWORDS:** Green Chemistry, Holistic Metrics, Food Battery.

## INTRODUÇÃO

Introduzir os princípios da Química Verde (QV) desde o ensino básico ajuda a criar um alicerce para a formação de profissionais conscientes capazes de desenvolver novas técnicas mais seguras para o ambiente, para os seres vivos e que poderão repassar essa filosofia para outros futuros profissionais e estudantes.

Autores como Lôbo (2008) e Silva (et al. 2009), durante anos, apontaram inquietações acerca dos processos de uma aprendizagem eficaz e concreta e ainda há entraves que impossibilitam a aprendizagem significativa. Em contrapartida, a importância do uso da experimentação aumenta e se apresenta como um modo de auxiliar os discentes a alcançar tal conhecimento efetivo. Quando experimentos são utilizados de forma complementar às aulas, possibilitam a exploração visual da teoria massiva que é trabalhada em sala. Isto permite que o aluno não só coloque em prática os assuntos, como também os relaciona a problemas de seu dia a dia.

Neste contexto, o eixo temático eletroquímica – que, segundo o Currículo Mínimo do estado do Rio de Janeiro, é desenvolvido no segundo semestre do terceiro ano do ensino médio, por parte dos discentes é considerado um conteúdo de difícil compreensão. Aliado a isto, está a preocupação recorrente com a sustentabilidade e a necessidade da implementação de seus conceitos na educação.

Nesta direção, o Programa de Educação Tutorial Química Supramolecular, Nanociênciа e Nanotecnologia (PETNANO) é um grupo que se debruça sobre a tríade universitária: ensino, pesquisa e extensão e está alocado no Instituto Federal do Rio de Janeiro – *campus Duque de Caxias*. O PETNANO possui diversos projetos, dentre eles, um denominado “Química Ao Vivo”, tendo como seu principal propósito, a simplificação de experimentos a partir de materiais acessíveis, de baixo custo e seguros que possam ser realizados dentro ou, especialmente, fora do ambiente laboratorial. Os experimentos são apresentados principalmente nas escolas da rede pública estadual do Rio de Janeiro a nível médio através de oficinas, feiras de ciência, circuito de experimentos e minicursos.

Parte dos experimentos realizados no projeto Química ao Vivo segue, mesmo sem ser de forma intencional, nos primórdios, o 12º princípio da Química Verde proposto por Anastas e Warner (2000) – Química intrinsecamente segura para a prevenção de acidentes

– uma vez que são pensados para serem executados fora de um laboratório de forma segura. Alguns outros experimentos seguem, mesmo que de forma não intencional, outros princípios da QV. Diante disso, os conceitos de Química Verde e a própria experimentação podem ser usados como estratégia para auxiliar esta questão.

Perceber a presença desses princípios é o primeiro passo para explorá-los na formação de alunos de Ensino Médio e, dessa maneira, auxiliar na formação de cidadãos conscientes, uma vez que podemos dizer que a base dos 12 princípios da QV é evitar agredir o meio ambiente e a saúde humana através de atitudes que evitem desperdícios de matéria prima e energia, utilizando materiais de origem renovável e biodegradáveis.

As concepções de QV podem ser trabalhadas junto a outras abordagens de forma colaborativa, visando não só a interdisciplinaridade, como também a percepção e possível aplicação dos conceitos além da sala de aula. Mas para isso, é necessário alcançar a aprendizagem significativa.

O objetivo deste trabalho é mostrar a capacidade de utilizar materiais como o produzido pelo PETNANO para abordar conceitos de Química Verde e o estudo das métricas dessa temática no ensino básico e superior, contribuindo assim para a formação de cidadãos e profissionais mais conscientes e preparados para estarem cientes dos problemas acerca do meio ambiente e, como a experimentação utilizando-se reagentes considerados não nocivos a este, pode ser tão eficaz para o ensino e representação visual dos conceitos que a Química Verde engloba.

## **PRODUÇÃO DO MATERIAL**

No ano de 2020, com a pandemia de COVID-19, tornou-se inviável a visita a escolas, entretanto, os petianos do Química ao Vivo deram continuidade a produção de materiais e elaboraram uma apostila voltada para o terceiro ano do ensino médio, com experimentos e materiais de acordo com o Currículo Mínimo do estado do Rio de Janeiro.

Esse material tem sua origem a partir de pesquisas realizadas na literatura em busca de experimentos que se adequassem à proposta do projeto. Em seguida, há a seleção dos experimentos a partir da viabilidade de reprodução e adaptação do mesmo para a etapa de testagem. Nessa fase a eficácia dos experimentos é avaliada na prática e ocorrendo adaptação para melhorar e simplificar a execução.

Por fim, os roteiros são escritos usando de embasamentos teóricos e compostos pelos seguintes itens: contextualização, o procedimento experimental, os materiais adaptados, a explicação e algumas curiosidades sobre o experimento ou a aplicação dele. Assim, assuntos como: Equilíbrio Químico, Eletroquímica e Química Orgânica, são abordados com experimentos tratando de diferentes conceitos.

## ESCOLHA DO EXPERIMENTO

Durante a disciplina de Química Verde, ofertada anualmente no IFRJ - Campus Duque de Caxias, foi sugerido pela professora que um experimento qualquer fosse escolhido e que as métricas de Química Verde fossem aplicadas, para elaborar a Matriz e a Estrela Verde.

Aliado com a vivência dentro do PETNANO, o experimento foi escolhido dentre aqueles selecionados para a apostila destinada ao terceiro ano do ensino médio. “Pilha de Comida” foi o experimento selecionado, relacionado a área de eletroquímica destinado ao segundo semestre do terceiro ano do ensino médio.

## MATERIAIS, REAGENTES E PROCEDIMENTO EXPERIMENTAL

Alimentos diversos	Moedas de cinco centavos	LED de 5mm	Calculadora que utilize uma pilha
Estilete	Pregos de ferro	Lixa	Solda
Fios de cobre	Multímetro		

Quadro 1: Materiais e reagentes

Inicialmente, os pregos precisam ser lixados caso possuam alguma parte oxidada. Em seguida, um prego e uma moeda de cobre são espetados em extremidades opostas de cada alimento. Então é feita a medição da diferença de potencial produzida em cada alimento diferente. O multímetro deve estar ajustado para voltagem em corrente contínua na escala adequada..

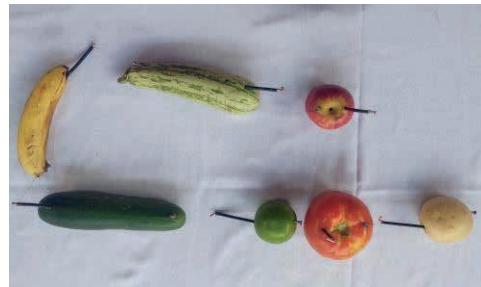
Os fios de cobre com as extremidades já decapadas são utilizados para conectar as células em série, a moeda de uma célula ligada ao prego de outra, mas as células das extremidades não são conectadas entre si, deixando livre uma moeda e um prego para que possa ser feita a medição. Por fim, após medir a DDP, as pilhas podem ser utilizadas para ligar a calculadora ou acender o LED.

Para ligar a calculadora, a voltagem das pilhas conectadas deve medir em torno de 1,5V, então basta conectar o prego livre no polo negativo da pilha e a moeda livre no polo positivo. Para ligar o LED, é necessário soldar um fio em cada extremidade do LED e então conectar uma extremidade do prego livre e a outra na moeda livre. Quanto maior a voltagem, mais forte será a luz emitida.

## EXPLICAÇÃO DOS CONCEITOS ENVOLVIDOS

O experimento foi pensado como uma opção mais acessível e segura e de forma lúdica serve como exemplo para ser utilizado fora do laboratório, ao utilizar materiais comuns do dia a dia, favorecendo assim o interesse por reproduzi-la em sala de aula.

Já que alguns alimentos são capazes de produzir corrente elétrica em determinadas condições por conta de substâncias químicas como ácidos e sais na composição, o experimento é uma forma de mostrar essa energia. Ao conectar frutas e legumes com o prego e a moeda, é possível perceber a eletricidade através de aparelhos como multímetro e calculadora. Para o experimento realizado, foram utilizados pepino, abobrinha, tomate, limão, batata, banana e maçã.



**Fonte:** Acervo particular dos autores

**Figura 1: Alimentos ligados em série**

A pilha é um dispositivo que gera corrente elétrica a partir de reações químicas, possui o anodo e o catodo que são responsáveis pelas semi-reações de oxidação e redução respectivamente. No experimento, é possível fazer uma analogia à pilha de Daniell. O anodo é o ferro do prego e o catodo o cobre da moeda, a ponte salina e as soluções eletrolíticas necessárias na pilha de Daniell podem ser comparadas com o próprio alimento, que possui sais, ácidos e água que servem para equilibrar as cargas formadas e também fornece o reagente a ser reduzido. Esses sais variam de acordo com o alimento utilizado, mas em geral, são sais de sódio, potássio, magnésio, fósforo, cálcio, ferro e outros metais que agem como micronutrientes para os seres vivos. Já o circuito externo é feito pelo equipamento conectado às pilhas e pelos fios de cobre que ligam uma célula à outra.

A semi-reação de oxidação:  $Fe(s) \leftrightarrow Fe^{2+} + 2e^- E^\circ = 0,44V$  ocorrerá na superfície do ferro, e o ferro oxidado formado se depositará no alimento. Já na superfície do cobre, por não possuir uma solução de sal de cobre para fornecer cátions de cobre para redução, podem ocorrer as seguintes semi-reações de redução:  $2 H^+(aq) + 2e^- \leftrightarrow H_2(g) E^\circ$  e  $2 H_2O(l) + 2e^- \leftrightarrow H_2(g) + 2 OH^-(aq) E^\circ = -0,83V$  sendo que a primeira ocorre mais intensamente em meios ácidos.

As duas semi-reações irão gerar uma tensão, que é a diferença de potencial (DDP), ao ligar as pilhas, unindo o polo positivo de uma pilha com o polo negativo de outra, essa tensão é somada e assim as pilhas ligadas em série se tornam capazes de alimentar aparelhos de pequeno de pequeno porte, como acender a luz de um led ou ligar uma calculadora pequena, conforme a figura abaixo.



Fonte: Acervo particular dos autores

Figura 2: Alimentos ligados em série fornecendo energia para uma calculadora

## APLICAÇÃO DA QUÍMICA VERDE NO EXPERIMENTO ESCOLHIDO

Os processos da QV podem ser divididos em três grandes categorias: O uso de fontes renováveis ou recicladas de matéria-prima; aumento da eficiência energética, ou a utilização de menos energia para produzir a mesma ou maior quantidade de produto; evitar o uso de substâncias persistentes, bioacumulativas e tóxicas.

É perceptível então que o experimento escolhido atende duas das três grandes categorias, utilizando alimentos no lugar de soluções salinas de origem não renovável, evitando também o uso de substâncias tóxicas. Buscando desenvolver e implementar produtos químicos que utilizem ou gerem uma quantidade menor de resíduos e substâncias tóxicas que causem dano ao meio ambiente e a saúde humana, a Química Verde se faz tão necessária no ensino, onde devemos ter formas de ensiná-la e aplicar essa filosofia nos experimentos destinados a práticas pedagógicas no Ensino Médio e Superior.

É de extrema importância que um procedimento experimental seja avaliado de acordo com a sua verdura dentro dos 12 princípios da Química Verde, definindo quais desses princípios serão relevantes ou não para cada estudo.

É possível prever e avaliar a verdura química dos experimentos através de métricas holísticas, como por exemplo as Matrizes Verdes (MV), podendo ser utilizada para experimentos elaborados em uma aula prática ou então em uma determinada pesquisa. Essa métrica pode estar associada a experimentos com síntese ou sem síntese e a partir dela pode-se descrever e avaliar as melhorias na sistemática desses experimentos (MACHADO, 2014). A MV se baseia na análise SWOT (Strengths, Weaknesses, Opportunities and Threats) avaliando o cumprimento de objetivos previamente definidos. Após definidos os objetivos, identificam-se os pontos fortes (Strengths) e fracos (Weaknesses), as oportunidades (Opportunities) e ameaças (Threats) que se tem para o cumprimento desses objetivos (DUARTE, RIBEIRO E MACHADO, 2015).

Uma outra métrica holística que foi utilizada é a Estrela Verde (EV). Ela considera os mesmos princípios e critérios da MV, porém, como tem uma natureza gráfica, permitindo

comparações visuais bem nítidas. Essa métrica é constituída por uma estrela com o número de pontas necessárias, de acordo com o número de princípios da Química Verde analisados em um determinado experimento (MACHADO, 2014).

## RESULTADOS E DISCUSSÃO

Inicialmente, a Estrela Verde foi montada utilizando os padrões definidos para experimentos sem síntese, apresentados na tabela abaixo, formando assim uma estrela de seis pontas, abrangendo os seis princípios aplicáveis para o experimento em questão.

Princípios da Química Verde	Critérios	Pontuação Total	Pontuação atribuída
P1 - Prevenção	Todos os resíduos são inócuos	3	3
	Formação de pelo menos um resíduo que envolva perigo moderado para a saúde e o ambiente	2	
	Formação de pelo menos um resíduo que envolva perigo elevado para a saúde e o ambiente	1	
P5 – Solventes e outras substâncias auxiliares mais seguras	Os solventes e as substâncias auxiliares não existem ou são inócuas	3	3
	Os solventes e as substâncias auxiliares usadas envolvem perigo moderado para a saúde e o ambiente	2	
	Pelo menos um dos solventes ou uma das substâncias auxiliares usadas envolve perigo elevado para a saúde e o ambiente	1	
P6 - Planificação para obtenção da eficiência energética	Temperatura e pressão ambientais	3	3
	Pressão ambiental e temperatura entre 0°C e 100°C que implique arrefecimento ou aquecimento	2	
	Pressão diferente da ambiental e/ou temperatura > 100°C menor do que 0°C	1	
P7 - Uso de matérias primas renováveis	Todos os reagentes/matérias-primas envolvidos são renováveis	3	2
	Pelo menos um dos reagentes/matérias-primas envolvidos é renovável, não se considera a água	2	
	Nenhum dos reagentes/matérias-primas envolvidos é renovável, não se considera a água	1	
P10 - Planificação para a degradação	Todas as substâncias envolvidas são degradáveis com os produtos de degradação inócuos	3	2
	Todas as substâncias envolvidas que não são degradáveis podem ser tratadas para obter a sua degradação com os produtos de degradação inócuos	2	
	Pelo menos uma das substâncias envolvidas não é degradável nem pode ser tratada para obter a sua degradação com produtos de degradação inócuos	1	
P12 - Química	As substâncias envolvidas apresentam perigo baixo de acidente químico	3	3

inerentemente mais segura quanto à prevenção de acidentes	As substâncias envolvidas apresentam perigo moderado de acidente químico	2	3
	As substâncias envolvidas apresentam perigo elevado de acidente químico	1	

Fonte: SANDRI e autores, 2017

Quadro 2: Parâmetros para confecção da Estrela Verde.

Cada ponta da estrela representa um princípio da Química Verde, sendo as áreas preenchidas em verde o quanto o princípio é atendido, com uma pontuação variando de 1 a 3, já as áreas em vermelho mostram o quanto o experimento não se adequa ao princípio.

Usando os parâmetros acima, foi possível montar a estrela verde abaixo para o experimento. O IPE mostrado na figura é o índice de preenchimento da estrela, ou seja, mostra a porcentagem dos tópicos atendidos para definir a verdura do experimento, que nesse caso, foi de 83,3%.

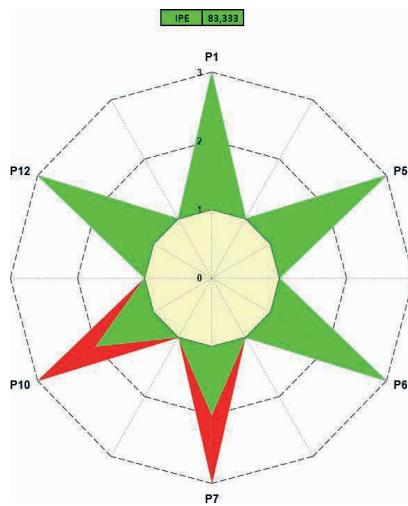


Figura 3: Estrela Verde gerada para o experimento

Fonte: educa.pt

Pode-se perceber que o experimento abordado atende totalmente quatro dos seis princípios aplicáveis. No princípio 1, não ocorre a produção significativa de óxidos ou hidróxidos para tratamento, os resíduos produzidos são biodegradáveis de modo geral. Para o princípio 5, não é necessário o uso de auxiliares ou solventes. Já no princípio 6, não há gasto energético atribuído ao experimento. No princípio 12, o experimento não oferece riscos de acidentes. Quanto aos princípios 7 e 10, o experimento atendeu parcialmente aos requisitos. Para o princípio 7, os metais utilizados são de origem não renovável, portanto, não atende completamente ao princípio. No princípio 10, de acordo com a tabela utilizada para preenchimento da estrela, a pontuação deveria ser 1, contudo, espera-se

que os metais utilizados sejam reutilizados. A moeda e o prego podem ser utilizados para sua função original ou para outros experimentos. Como a tabela não leva em conta a reutilização de materiais, foi decidido atribuir pontuação 2 para o tópico.

Por fim, foi elaborada a Matriz Verde, que permite analisar o experimento de forma a aprimorá-lo e atingir objetivos pré definidos o máximo possível, mas também permite perceber os pontos onde o experimento não pode ser alterado para atingir os objetivos. Para a construção da Matriz Verde, utilizamos alguns critérios descritos por Sandri e autores (2017) e os alunos envolvidos no trabalho preencheram e avaliaram esses critérios, buscando informações de todos os materiais envolvidos na ficha de informação e segurança dos produtos químicos – FISPQ.

Critérios de Análise		Pontos Fortes	Pontos Fracos
P1 - Prevenção	C1 - Riscos Físicos	Substâncias sem indicação de risco físico	Substâncias com indicação de riscos físicos (Explosivo - E; Inflamável - F ou F+)
	C2 - Riscos à saúde	Sem indicação de risco à saúde ou risco baixo (Prejudicial - Xn; Irritante - Xi)	Substâncias com indicação de toxicidade (Tóxico - T; Muito tóxico - T+; Corrosivo - C)
	C3 - Riscos ao ambiente	Sem indicação de riscos para o ambiente (N)	Substâncias tóxicas ao ambiente (N)
	C4 - Geração de resíduos	Não se formam resíduos ou geram-se resíduos inócuos	São gerados resíduos e estes representam perigos físicos, à saúde ou ao ambiente
P5 - Solventes e outras substâncias auxiliares	C5 - Consumo de solventes e auxiliares além dos reagentes iniciais	Não se faz necessário o uso de solventes e auxiliares ou estes são inócuos	Os solventes e/ou auxiliares representam perigo moderado ou elevado para a saúde ou meio ambiente
	C6 - Consumo de água como solvente ou reagente	Consumo baixo ( $V \leq 50 \text{ mL}$ )	Consumo elevado ( $V > 50 \text{ mL}$ )
	C7 - Consumo de água como facilidade (resfriamento/banhos)	Consumo baixo ( $V \leq 200 \text{ mL}$ )	Consumo elevado ( $V > 200 \text{ mL}$ )
	C8 - Consumo de outros solventes além de água	Consumo baixo ( $V \leq 50 \text{ mL}$ )	Consumo elevado ( $V > 50 \text{ mL}$ )
P6 - Eficiência energética	C9 - Consumo de energia	Realiza-se a temperatura e pressão ambientes	Realiza-se em temperatura ou pressão diferentes da do ambiente
P7 - Uso de substâncias renováveis	C10 - Utilização de substâncias renováveis	Todos os reagentes são renováveis	Pelo menos um dos reagentes não é renovável

P10 - Planificação para a degradação	C11 - Uso de produtos degradáveis a produtos inócuos (não considerar a água)	Todos os reagentes são degradáveis	Pelo menos uma das substâncias não é degradável ou gera substância nociva em sua decomposição
	C12 - Utilizam-se substâncias que podem ser reutilizadas em outras experiências ou recicladas após o uso	Utiliza-se	Não se utiliza
P12 - Química intrinsecamente segura	C13 - Riscos de acidentes devido às substâncias envolvidas	No caso de substâncias ( $X_i$ , $X_n$ ou sem indicação de riscos)	No caso de substâncias ( $T$ , $T+$ , $C$ , $O$ , $F$ , $F+$ )
	C14 - Devido ao uso de equipamentos	Com riscos baixos ou moderados	Com riscos elevados

**Quadro 3: Critérios utilizados para a construção da Matriz Verde dos experimentos executados**

**Fonte: SANDRI e Autores, 2017**

A MV para o experimento escolhido possui os pontos fortes e fracos demonstrando que existe diferentes experimentos que podem ser estudados através dessas métricas holísticas a fim de se obter métodos mais sustentáveis. Os pontos fortes que podemos destacar para esse experimento são: riscos a saúde ou perigo baixo, concentração de ferro oxidado formado é muito baixa para oferecer algum risco, não é necessário a utilização de água, de qualquer solvente ou outra substância auxiliar, realiza-se a temperatura e pressão ambiente e por fim, os eletrodos podem ser reutilizados em outra experiência ou ainda serem reciclados. O ponto fraco e inevitável é que mesmo com a troca de eletrodos, sempre será necessário utilizar algum metal ou material não renovável.

As métricas como a MV e EV podem auxiliar nesse trabalho, avaliando os pontos que podem ser aprimorados e aqueles que não podem para atender o máximo possível aos objetivos estabelecidos e consequentemente aos princípios de Química Verde. A avaliação de tais experimentos através da métrica holística permitiu que os alunos se envolvessem com tal análise, tendo um papel de protagonismo, estimulando um olhar mais crítico com relação às práticas no decorrer do seu curso.

Em todos os processos analisados, foi notório o ganho em sustentabilidade, sendo possível a realização dos mesmos com menor consumo de reagentes e originando produtos e/ou resíduos com menor potencial agressivo.

## CONCLUSÃO

Podemos perceber a possibilidade de realizar experimentos eficazes para o aprendizado dos alunos e, ao mesmo tempo, disseminar os princípios de Química Verde, trabalhando com experimentos com materiais acessíveis, de baixo custo, pouco poluentes

e com geração mínima de resíduos. Assim como a experimentação é importante, trabalhar questões ambientais também têm sua importância, e na área de Química, além de contextualizações com questões ambientais presentes no dia a dia e que poucos percebem, como chuva ácida por exemplo, a Química Verde trabalha para remediar contaminações ambientais causadas por sínteses e outros experimentos. Introduzir esses conceitos no ensino é fundamental para melhorar a sustentabilidade das indústrias e laboratórios de ensino no futuro.

O experimento não foi planejado para atender aos princípios de Química Verde, mas é notável que os atende. Baseando-se na explicação das duas vertentes dessa filosofia no Ensino de Corrêa e Zuin (2012), Sandri e Santin Filho (2017) - vertentes de técnica/instrumental e crítica - e, após analisar o experimento trabalhado, é possível notar que o mesmo pode ser executado para o ensino de Química de forma significativa utilizando as duas vertentes.

De modo mais simples, mas não menos eficaz, pode-se trabalhá-lo de acordo com a vertente crítica, abordando os princípios de QV utilizados no experimento, sem necessariamente trabalhar a implicação dos mesmos no meio ambiente e sociedade de forma geral. Entretanto, também é possível abordar segundo a vertente crítica, levando a discussão para as aulas teóricas, entendendo como a Química afeta e é afetada pela sociedade e pelo ambiente, apresentando os motivos da necessidade das técnicas verdes de um ponto de vista socioambiental.

Muitos dos experimentos mais clássicos utilizados em laboratório são muito prejudiciais não apenas ao ambiente, mas para a saúde de quem os realiza e, mesmo com o uso correto de epi's e epc's, existe o risco de acidentes e contaminações. Substituir esses experimentos por experimentos mais seguros e menos prejudiciais à saúde humana e ao ambiente e ao mesmo tempo eficazes para o ensino, é possível. Trabalhos como esse realizado pelo PETNANO, que por acaso se alinha com alguns princípios de Química Verde, podem ser o começo para remover alguns desses experimentos mais prejudiciais dos métodos de ensino ao longo do tempo.

A Química Verde se mostra como crítica aos processos tradicionais da química, mas através dela podemos melhorá-los. É de suma importância a disseminação dos princípios desta filosofia em todo o ensino de química, por meio de teorias e práticas, formando profissionais sob essa perspectiva, atentos aos desafios da sustentabilidade, responsáveis, éticos e capazes de rever e reorientar suas atividades, no âmbito da química.

## REFERÊNCIAS

ANASTAS, P. T.; WARNER, J. **Green Chemistry: Theory and Practice**. Oxford University Press: Great Britain, cap. 9, p. 94-95, 2000.

CORRÊA, A.G.; ZUIN, V.G. **Química Verde: Fundamentos e aplicações**. EdUFSCAR, 2012.

DUARTE, R.C.C.; RIBEIRO, G.T.C.; MACHADO, A. A.S.C. **Avaliação da Verdura de Atividades Laboratoriais de Sínteses de Química no Ensino Superior em Portugal**. Sociedade Portuguesa de Química, jul-Set./2015. Disponível em: <http://www.spq.pt/magazines/BSPQ/670/article/30001990/pdf>.

LOBÔ, S. F. O Ensino de Química e a Formação do Educador Químico, sob o Olhar Bachelardiano. **Ciência & Educação**, v. 14, n. 1, p. 89 – 100, 2008. Disponível em: <https://www.scielo.br/j/ciedu/a/HVjgHFFn3pQs7wmRPDs85Nm/abstract/?lang=pt>

MACHADO, A.A.S.C. **Introdução às Métricas da Química Verde: uma visão sistêmica**. 1 ed. Florianópolis: UFSC, 2014.

SANDRI, M C M; SANTIN FILHO, **Análise da Verdura Química de Experimentos Propostos para o Ensino Médio**. Actio: Docência em Ciências. v. 2, n. 2, p. 97- 118, Curitiba - jul./set. 2017

SILVA, C. S; CLEMENTE, A. D; PIRES, D. A. T. Uso da experimentação no ensino médio como metodologia facilitadora do processo de ensinar e aprender. **Revista Técnica e tecnológica CTS IFG** - Luziânia, 2015 – Vol 1, nº 1. Disponível em: <http://cts.luziania.ifg.edu.br/CTS1/article/view/31> Acesso em: 13 jan. 2022.

SILVA, R. T; CURSINO, A. C. T; AIRES, J. A; GUIMARÃES, O. M. Contextualização e Experimentação Uma Análise dos Artigos Publicados na Seção “Experimentação no Ensino de Química” da Revista Química Nova na Escola 2000-2008. **Ensaio Pesquisa em Educação em Ciências**, v. 11, n. 2, p. 26 – 46, 2009. Disponível em: <https://www.scielo.br/j/epec/a/kVzpWKrrjbXLV5bW5kypqSJ/abstract/?lang=pt>

## CAPÍTULO 5

# PILARIZAÇÃO DE ARGILA COM ZIRCÔNIO PARA FOTOESTABILIZAÇÃO DE ANTIBIÓTICO: UMA ESTRATÉGIA NA REMEDIAÇÃO AMBIENTAL

---

Data de aceite: 02/10/2023

### Dihêgo Henrique Lima Damacena

Universidade Federal do Piauí - UFPI,  
Laboratório Interdisciplinar de Materiais  
Avançados – LIMAV.  
Teresina – Piauí  
<http://lattes.cnpq.br/2080395780514633>

### Pollyana de Aragão Trigueiro

Universidade Federal do Maranhão -  
UFMA  
Imperatriz - Maranhão  
<http://lattes.cnpq.br/0669954377207418>

### Josy Anteveli Osajima

Universidade Federal do Piauí-UFPI,  
Laboratório Interdisciplinar de Materiais  
Avançados – LIMAV.  
Teresina - Piauí  
<http://lattes.cnpq.br/4805147682740024>

### Marcelo Barbosa Furtini

Universidade Federal do Piauí - UFPI,  
Departamento de Arquitetura e  
Urbanismo.  
Teresina - Piauí  
<http://lattes.cnpq.br/8250382504845592>

### Idgian Sá de Lima

Universidade Federal do Piauí – UFPI,  
Laboratório Interdisciplinar de Materiais  
Avançados – LIMAV.  
Teresina - Piauí  
<http://lattes.cnpq.br/8685525160644952>

### Luzia Maria Castro Honorio

Universidade Federal da Paraíba - UFPB  
Areia - Paraíba  
<http://lattes.cnpq.br/7184095082791748>

### Edson Cavalcante da Silva-Filho

Universidade Federal do Piauí – UFPI,  
Laboratório Interdisciplinar de Materiais  
Avançados - LIMAV  
Teresina - Pi  
<http://lattes.cnpq.br/7892423373858047>

**RESUMO:** O combate aos poluentes emergentes é um dos problemas de bastante relevância para os pesquisados, pois são substâncias utilizadas no nosso dia-a-dia como os medicamento, aditivos alimentares, fertilizantes, metabólicos, reguladores, etc. Os argilominerais são bastante utilizados na pilarização com metais, pois os mesmos possuem sua capacidade de adsorção melhorada quando pilarizados, devido ao aumento da sua área superficial. Esse trabalho tem como objetivo a pilarização da argila saponita com o zircônio, para posterior adsorção do medicamento ciprofloxacino com intuito de melhorar a fotoestabilidade desse fármaco. Os resultados de Drx, Mev e FTIR

demonstram que a pilzarização da argila com o metal ocorreu com sucesso, aumentando o espaçamento basal d001 de 1.12 nm para 1.64 nm. Os testes da atividade antibacteriana mostraram que o ciprofloxacino adsorvido na saponita manteve sua atividade antibacteriana contra bactérias gram-negativas e gram-positivas antes e depois das 200 horas de exposição à radiação ultravioleta.

**PALAVRAS-CHAVE:** saponita pilarizada; Fotólise de fármacos; fotoestabilidade; remediação Ambiental.

## PILLARIZATION OF CLAY WITH ZIRCONIUM FOR PHOTOSTABILIZATION OF ANTIBIOTICS: A STRATEGY IN ENVIRONMENTAL REMEDIATION

**ABSTRACT:** Combating emerging pollutants is one of the most relevant problems for researchers, as they are substances used in our day-to-day life, such as medicines, food additives, fertilizers, metabolites, regulators, etc. Clay minerals are widely used in the pillaring with metals, as they have their adsorption capacity improved when pillared, due to the increase of their surface area. The objective of this work is the pillarization of saponite clay with zirconium, for subsequent adsorption of the drug ciprofloxacin in order to improve their photostability. The results of Drx, Mev and FTIR demonstrate that the pilzarization of the clay with the metal occurred successfully, increasing the d001 basal spacing from 1.12 nm to 1.64 nm. The antibacterial activity tests showed that ciprofloxacin adsorbed on saponite maintained its antibacterial activity against gram-negative and gram-positive bacteria before and after 200 hours of exposure to ultraviolet radiation.

**KEYWORDS:** Pillared saponite; Photolysis of drugs; photostability; Environmental remediation.

### 1 | INTRODUÇÃO

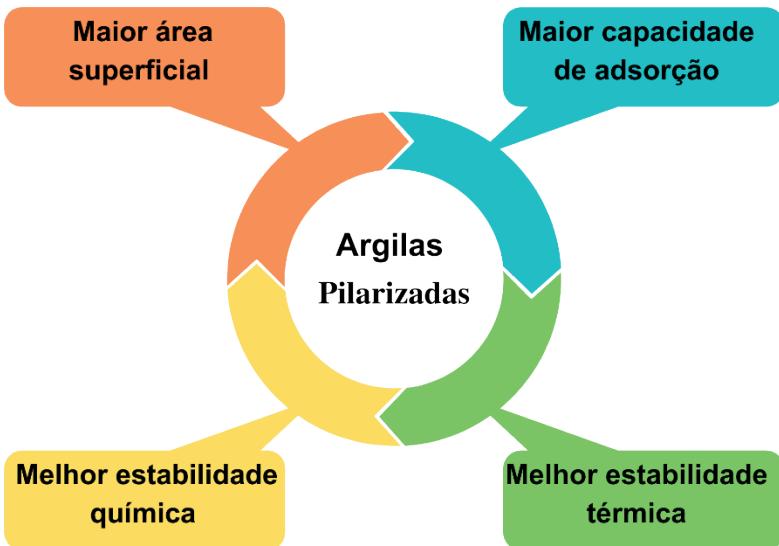
Uma das grandes preocupações atuais são os poluentes emergentes, os quais são provenientes dos excedentes de substâncias químicas e biológicas utilizadas pelo homem como: produtos farmacêuticos, hidrocarbonetos, reguladores, drogas ilícitas, aditivos alimentares, metabólicos, pesticidas, fertilizantes, etc.(PEÑA-GUZMÁN et al., 2019). Segundo a Organização Mundial de Saúde (OMS), estima-se que existem cerca de 3.000 poluentes emergentes estão disseminados pelo nosso planeta.(D'SOUZA et al., 2022).

A estabilidade dos fármacos é um pré-requisito para a eficácia e segurança de acordo com a resolução ANVISA/DC Nº 318 DE 06/11/2019. Portanto, a fotoestabilização de medicamentos é requisito essencial para saúde e segurança de quem toma e também para o meio ambiente. A fotólise de fármacos, pode liberar produtos bem mais agressivos ao meio ambiente, podendo alterar as propriedades químicas e físicas do mesmo, bem como a sua propriedade farmacinaética na ação em nosso organismo, ou no meio ambiente após o nosso consumo, pois alguns fotoproductos apresentam elevada toxicidade, sendo que alguns medicamentos sofrem fotodegradação mesmo após seu armazenamento. (DE LUCA et al., 2016)(ABOUNASSIF; EL-OBEID; GADKARIEM, 2005)(JAMRÓGIEWICZ; WIELGOMAS; STRANKOWSKI, 2014)

Uma das drogas bastante utilizadas é o ciprofloxacino, antibiótico que pertence à família das fluoroquinolonas, sendo um dos medicamentos mais utilizados no mundo. Pois possui ação curativa, atividade de amplo aspecto e tolerância não cruzada (SOPLAH et al., 2022)(FAN et al., 2022). O ciprofloxacino que é absorvido pelo organismo é excretada devido sua metabolização incompleta e posteriormente retorna para o meio ambiente(SOPLAH et al., 2022)(NIKOLAOU; MERIC; FATTA, 2007). As flouriquinolonas, quando irradiados, sofrem degradação fotoquímica, liberando fotoproductos que podem ser mais nocivos que o composto original, podendo multiplicar seu efeito inibitório ao metabolismo bacteriano, pois o anel FG não é afetado nas primeiras fases do evento fotolítico liberando vários subprodutos ativos contra bactérias gram-negativas e gram-positivas.(STURINI et al., 2012)(STURINI et al., 2015).

As argilas do grupo esmectitas, possuem estrutura em camadas, apresentando estrutura lamelar que pode hospedar substâncias orgânicas e inorgânicas. Essas propriedades são favoráveis para aplicação na adsorção de poluentes ambientais. Nesse cenário, a argila saponita, do grupo das esmectitas tipo 2:1, apresentam-se como auspiciosas devido suas elevadas estabilidades térmicas, elevada área superficial. Os argilominerais puros, são limitados apenas a cátions e moléculas orgânicas e inorgânicas, sendo necessária sua funcionalização para melhora de suas propriedades e se tornar passível de adsorção de moléculas positiva e negativas.(KENNE DEDZO et al., 2021) (MADEJOV, 2023).

Nesse contexto, argilas pilarizadas (PILC's - Pillared InterLayered Clays), têm despertado elevado interesse no seu uso como materiais adsorventes nos últimos anos, devido à inserção de policáticos metálicos no espaçamento interlamelar destes materiais e posterior calcinação para obtenção dos pilares de óxidos estáveis, promovendo ampliação do espaçamento interlamelar, aumento de área superficial, melhora na estabilidade térmica e química (GIL et al., 2011)(FATIMAH et al., 2019)(TRIGUEIRO et al., 2018a).



**Figura 1.** Eficácia da pilarização de argilas.

Alguns autores relatam a melhora da fotoestabilidade de pigmentos (TRIGUEIRO et al., 2018b), fármacos (DA ROCHA et al., 2019)(THOMA; KLIMEK, 1991), herbicidas (SI et al., 2004), agentes de biocontrole microbiano (COHEN; JOSEPH, 2009)e corantes (SAMUELS; MOR; RYTWO, 2013) (CUNHA et al., 2023)após a adsorção do mesmo em argilas.

Tendo em conta a melhora da capacidade de adsorção das argilas modificadas com metais, este trabalho teve como objetivo modificar o argilomineral saponita com Zircônio, para incorporação do fármaco ciprofloxacino com propósito de melhora da sua fotoestabilidade.

## 2 | MATERIAIS E MÉTODOS

### 2.1 Materiais

Os reagentes utilizados foram oxicloreto de zircônio IV (Neon  $\geq$  99%), argila saponita sintética. NaOH (Vetc,  $\geq$  99%) e HCl (Sigma Aldrich,  $\geq$  37%) foram usados para ajustar o pH. Ciprofloxacino foi fornecido pela farmafórmula farmácia de manipulação. A saponita sintética foi fornecida pelo Laboratoire d'Archéologie Moléculaire et Structurale(LAMS) França.

### 2.2 Caracterização

A difração de raio X foi feita em um Difratômetro de Raios – X (DRX) Shimadzu, XRD 6000 com fonte Cu-Ka. Os espectros de infravermelho foram obtidos utilizando o

equipamento de FTIR, Vertex 70v da Bruker, com 120 varreduras em uma faixa de 400 a 4000 cm<sup>-1</sup> e resolução de 4 cm<sup>-1</sup>. As medidas foram realizadas por transmissão, utilizando pastilhas de brometo de potássio (KBr). As imagens foram obtidas usando um microscópio eletrônico de emissão de campo JEOL JSM-7401F em uma tensão de aceleração de 5,0 kV, um detector de elétrons secundário SEI, uma distância de trabalho variando de 3,0 mm e uma resolução de 1,5 nm, com EDS.

### 2.3 Pilarização da saponita com Zr (Zr-Sap)

A pilarização das argilas com cátions de Zr<sup>2+</sup> foi realizada de acordo com (BAHRANOWSKI et al., 2015), onde uma solução de ZrOCl<sub>2</sub> · 8H<sub>2</sub>O a 0,1 M deixada sob agitação por 5 h, foi adicionada a uma suspensão de argila para atingir uma concentração final de 2,5 mmol de Zr g<sup>-1</sup> de argila. A mistura foi deixada reagindo durante 3 h a temperatura ambiente sob agitação constante. O material resultante foi centrifugado, lavado e seco a 50 °C e peneirado em malha de 200 mesh. A argila pilarizada foi obtida após calcinação em ar estático a 400 °C (taxa de aquecimento 5 ° min<sup>-1</sup>) durante 3 h.

### 2.4 Determinação do Ponto de Carga Zero (pcz)

Para determinar o pcz, pesou-se aproximadamente 20 mg da Zr-Sap e adicionou-se uma solução de NaCl com pH variando de 2 a 12 em batelada em um pHmetro modelo HI 2221 da HANNA Instruments. Após 24 horas realizou a medida do Ph final.

### 2.5 Síntese dos híbridos Zr-Sap-Ci.

A preparação do híbrido Zr-Sap e o fármaco ciprofloxacino (Zr-Sap-Ci), foi realizada utilizando o procedimento de adsorção, em que foi preparado uma solução de 500 ppm de ciprofloxacino em água destilada, cujo pH de 4.68 foi medido em um pHmetro da marca Hanna Instruments, modelo HI 2221. Em seguida 0,5 g de Zr-Sap foram adicionados em 100 mL da solução do fármaco e deixada em agitação por 24 horas. Posteriormente o material foi centrifugado, lavado e seco a temperatura ambiente.

### 2.6 Teste de fotoestabilidade

A fotoestabilidade dos híbridos foi realizada utilizando uma lâmpada de vapor de mercúrio de 160 W. O material foi disperso em uma placa de Petri, colocados a uma distância de 15 cm abaixo da lâmpada e irradiados por 200 horas.

### 2.7 Atividade antibacteriana

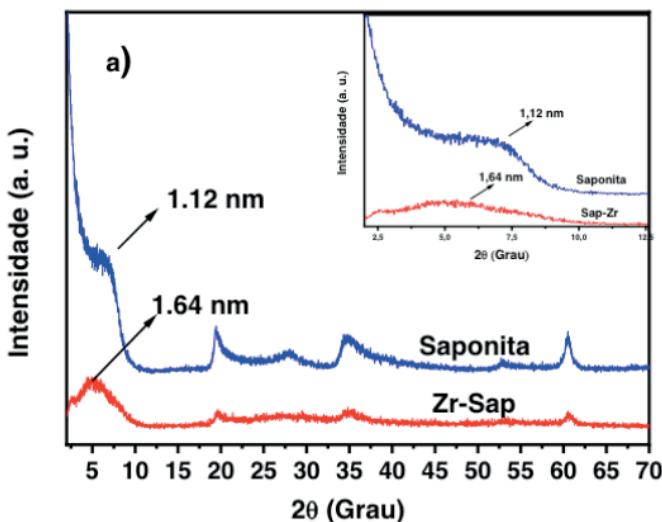
Nos teste antibacterianos foram utilizados as cepas padrão de espécies Gram-positivas a *Staphylococcus aureus* ATCC 25.923 (SA) e Gram-negativo para *Escherichia coli* ATCC 25.922(EC), fornecidos pelo Laboratório de Pesquisa em Microbiologia da Universidade Federal do Piauí (UFPI). Pra a obtenção da cultura, o estoque de crescimento

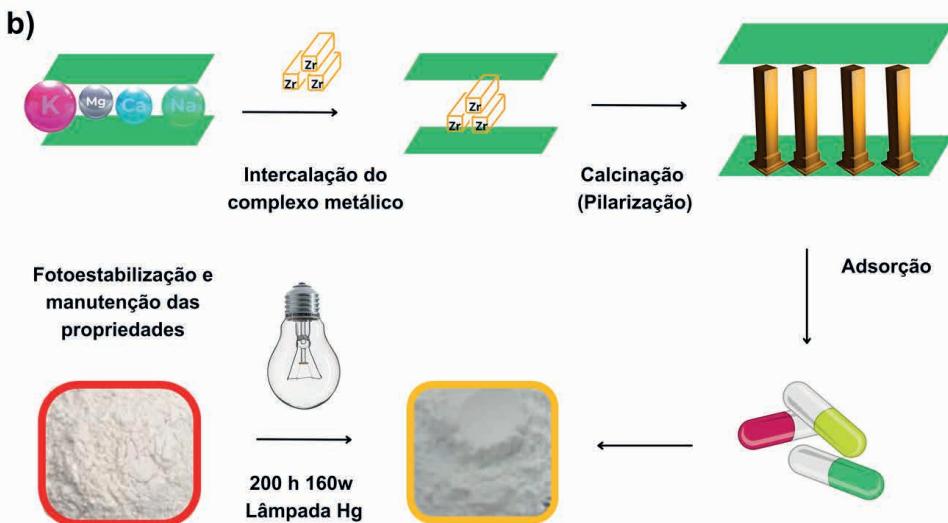
bacteriano para ativação para um tubo falcon contendo 3,0 mL de Brain Heart Infusion (BHI), seguido de incubação a 37 °C por 24 h. Em seguida 10 mg de cada material testado foram transferidos para 1 mL do suspensão de inóculo padrão a  $1,5 \times 10^8$  formador de colônia unidades por mL (UFC/mL). Posteriormente, 100  $\mu\text{L}$  das soluções foram transferidos para placas de Petri contendo ágar Mueller Hinton médio e semeado com uma alça de Drigalski. Viabilidade bacteriana foi realizado por teste de contato direto em meio sólido(SÁ et al., 2022). Para calcular o efeito inibitório foi utilizado a equação  $\eta = (N1-N2)/N1 \times 100\%$ , onde  $\eta$  é definido como o efeito inibitório, N1 é a aritmética média das UFC das placas de controle, e N2 é a média aritmética das UFCs de cada uma das soluções testadas.

### 3 | RESULTADOS E DISCUSSÃO

#### 3.1 Difração de raio X

A figura 2a reúne os difratogramas de DRX da saponita antes e após a pilarização com policátons de zircônio. Analisando os difratogramas por meio do programa crystallographica Search -match, as reflexões típicas da saponita (ref. Código 12 160) foram observadas em 7,02°, 19,41°, 34,36° e 60,56° ( $2\theta$ ). Esses valores também são correspondentes na argila pilarizada, onde podemos observar um aumento do espaçamento basal d001 de 1.12 nm para 1.64 nm, demonstrando que a formação dos pilares de argila foi bem sucedida. A formação dos pilares de Zircônio ocorre sem a formação de fase, observando apenas a expansão de distância da lamela da argila (BAHRANOWSKI et al., 2015). Outro fator observado é a diminuição da intensidade do pico d001, podendo inferir sobre a diminuição da aperiocidade na estrutura da argila após a inserção dos policátons de zircônio (CHAUHAN et al., 2022).

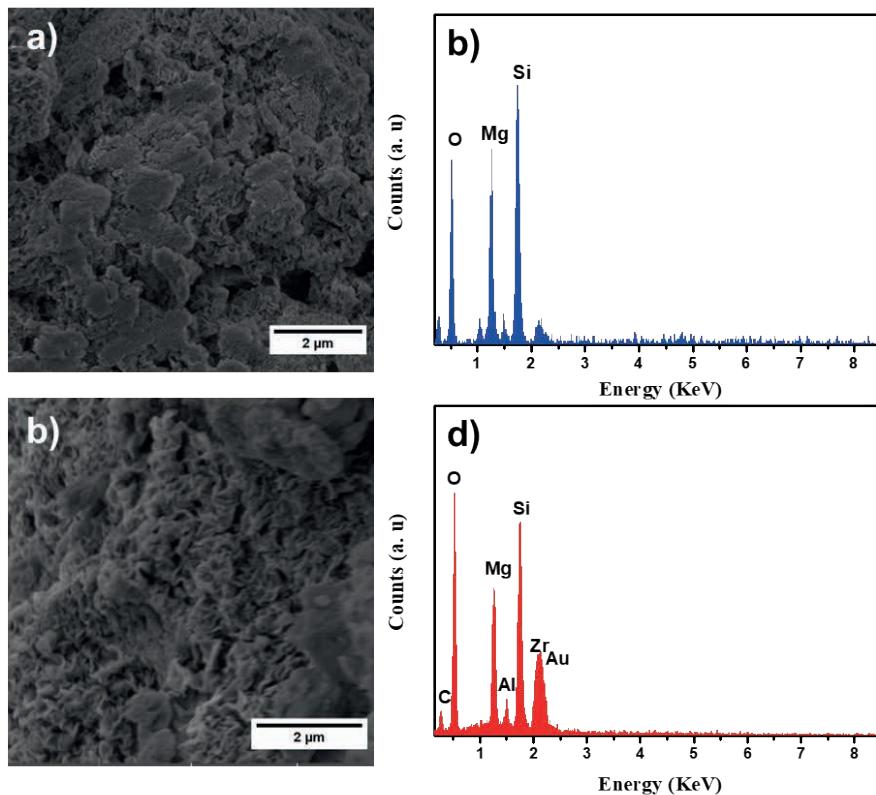




**Figura 2.** a) Padrões DRX da Saponita e Zr-Sap e b) Esquema de pilarização e fotoestabilização de antibióticos.

### 3.2 Microscopia eletrônica de varredura

A avaliação morfológica da Saponita pura e a saponita pilarizada são mostradas na figura 3a e 3c. As imagens SEM revelam que antes da pilarização a argila saponita possuía partículas de formas irregulares e estrutura típica de uma argila esmectita. Após a modificação com Zr, podemos ver a formação de uma superfície escamosa, com maior área superficial, fato relacionado a formação dos pilares de Zircônio. Na figura 3b e 3d temos a análise semi-quantitativa EDS foi realizada no material e após a pilarização. Podemos observar que o Zr foi incorporado na argila de forma efetiva, aparecendo com o percentual de 13,8 %.



**Figura 3.** Imagens Mev da Saponita (a) e Zr-Sap (c). Espectros EDS da Saponita (b), Zr-Sap (d).

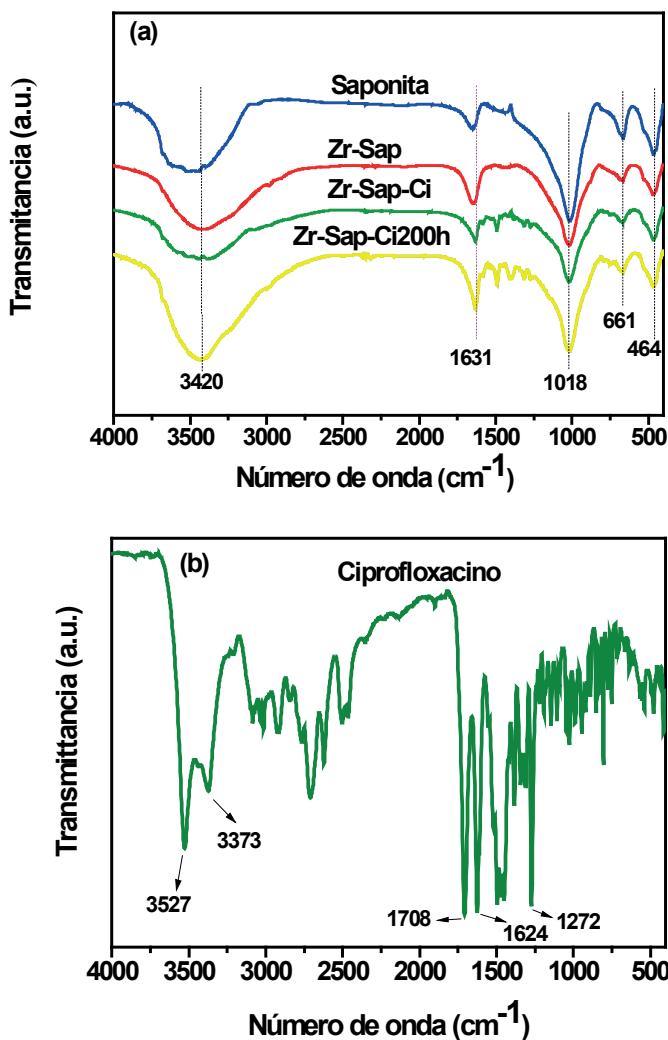
### 3.3 Efeito do pH na adsorção do fármaco.

O pH do fármaco teve efeito substancial na adsorção de ciprofloxacino, pois em pH básico, foi observado a precipitação do ciprofloxacino. Valores de pka do ciprofloxacino são 6,2 e 8,8 (LUIS VÁZQUEZ et al., 2001) e o pcz do material Zr-Sap determinado é igual a 7,39. Para melhor adsorção, o pH utilizado foi o da solução sem ajuste, com valor igual a 4,68, pois esse valor abaixo do pcz e do pka favorece a adsorção.

### 3.4 Espectroscopia de infravermelho

Os spectros de infravermelho dos sólidos estão presentes na figura 4a. Esses foram realizados após a modificação da argila com Zr e também após a adsorção do fármaco. A absorbância presente em  $1018\text{ cm}^{-1}$  representa o estiramento da ligação Si-O. Os banda em  $464\text{ cm}^{-1}$  e  $661\text{ cm}^{-1}$  são atribuídas ao a deformação do M-O. (BAHRANOWSKI et al., 2015). As bandas em  $1631$  e  $3431\text{ cm}^{-1}$  correspondem ao alongamento e modos de vibração de flexão de grupos OH em água adsorvida, respectivamente. (SPRYNSKYY et al., 2019)(HAMILTON et al., 2019)(FATIMAH et al., 2019).

Na figura 4b a temos o spectro de infravermelho do ciprofloxacino puro. Podemos observar as as bandas em 3527 e 3373  $\text{cm}^{-1}$  atribuídas ao grupo hidroxila em ácidos carboxílicos, grupo presente no ciprofloxacino. Em 1708 e 1624  $\text{cm}^{-1}$  são bandas características do estiramento do grupo C=O do cip. Em 1272  $\text{cm}^{-1}$  temos estiramento da ligação C-O (HAMILTON et al., 2019). Observando os spectros após a adsorção do fármaco (fig. 4a), Zr-Sap-Ci e Zr-Sap-Ci200h, temos as bandas citadas que são características do mesmo na região entre 1600 e 1200  $\text{cm}^{-1}$ , o que comprova que a droga foi dsorvida com sucesso no fármaco.

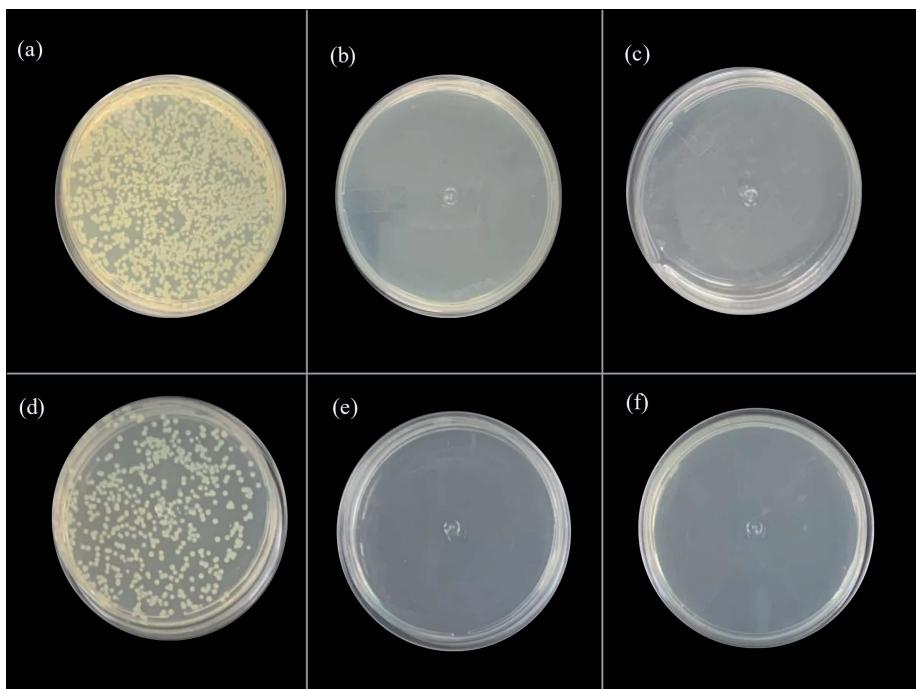


**Figura 4.** Espectro FTIR da (a) Saponita, Zr-Sap, Zr-Sap-Ci, Zr-Sap-Ci200h. (b) Espectro do ciprofloxacino.

Outro fato é que as características dos espectros permanecem iguais antes e depois da irradiação do material Zr-Sap-Ci, portanto, após 200 h na luz o fármado apresenta-se fotoestável quando adsorvido na argila.

### 3.5 Atividade antibacteriana

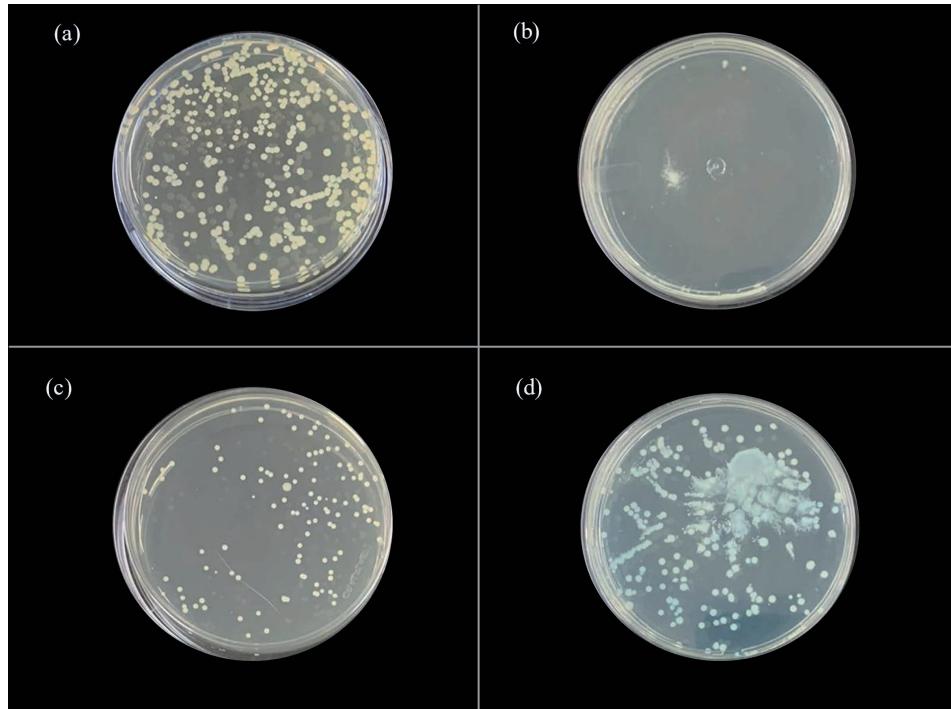
O efeito da atividade antibacteriana das amostras foi realizado com as amostras Zr-Sap-Ci antes e depois de 200 horas de irradiação. Avaliando as imagens Figura 5. podemos observar que o efeito inibitório no crescimento bacteriano foi de 100 % nas amostras sem irradiação e nas amostras irradiadas. Portanto, a incorporação do antibiótico na argila pilarizada preserva seu efeito inibitório no crescimento das bactérias gram-positivas (*Staphylococcus aureus*) e gram-negativas (*Echerichia. Coli*).



**Figura 5.** Efeito inibitório em uma cepa de *Staphylococcus aureus* (AS) e *Echerichia. Coli* (EC), (a) controle SA, (b), Zr-Sap-Ci, (c) Zr-Sap-Ci,200h, (d) controle EC, (e) Zr-Sap-Ci e (f) Zr-Sap-Ci200h.

Outro efeito avaliado, foi o do material Zr-Sap. Esse material não apresentou efeito inibitório frente ao crescimento bacteriano de *S. aureus*, porém inibiu efetivamente a bactéria *E. Coli*. Como observado na figura 6. A possível supremacia na inibição de bactérias, se deve, possivelmente a interação entre as partículas positivas do óxido metálico do material e a carga negativa da parede celular bacteriana (peptídioglicano), com consequente oxidação e morte dos microrganismos.(ZHANG; CHEN, 2009) . Tabassum et. al. Sintetizaram nanopartículas de  $ZrO_2$  e mostraram que elas são efetivas na inibição

do crescimento de bactérias gram-negativas (*K. pneumoniae*). (TABASSUM et al., 2021). Em (SUGI; RADHIKA; PADMA, 2022), o compósito de ferrita de zinco-zircônio ( $ZnFe_2O_4/ZrFe_2O_5$ ) e ferrita de zinco/zircônia ( $ZnFe_2O_4/ZrO_2$ ) foi sintetizado e testado a sua atividade antibacteriana contra *Escherichia coli* e *Staphylococcus aureus*, mostrando-se eficazes contra bactérias gram-negativas (e. *Coli*). Portanto, o material Zr-Sap possui potencial para aplicação futura.



**Figura 6.** Efeito inibitório em uma cepa de *Staphylococcus aureus* (AS) e *Escherichia. Coli* (EC), (a) controle EC, (b) Zr-Sap, (c) controle SA, (d) Zr-Sap.

A tabela 1 compara o material utilizado na adsorção de alguns fármacos para melhorar a fotoestabilidade. Os autores relatam que o tempo de irradiação necessário para a fotólise varia de acordo com o tipo de fármaco e material em que o mesmo será adsorvido.

Material	Irradiação	Adsorvido	Referência
Zr-Sap	Lâmpada 160 w Hg por 200 h.	Ciprofloxacino	Este trabalho
Montmorilonita (Mt), paligorskita, sepiolita, montmorilonita (veegum)	Lâmpada 125 w Hg por 200 h.	Tetraciclina	(DA ROCHA et al., 2019)
Albumina sérica bovina	Lâmpada Philips Fluorescente de vapor de mercúrio de alta pressão HPLN 125W por 2,5 h.	Riboflavina	(ARSALAN et al., 2020) phosphate buffer saline
Eudragit S100®	Lâmpada fluorescente UV modelo Ecolume, 30 W por 240 h.	Pantoprazol sódico	(RAFFIN et al., 2008)
Óxido de Ferro	Luz ambiente (tempo de irradiação não descrito)	Sorivudina e nifedipina	(DESAI et al., 1994) sorivudine (BV-araU)

Tabela 1. Comparação dos estudos anteriores entre os fármacos adsorvidos e fotoestabilizados.

## 4 | CONCLUSÃO

Após a avaliação estrutural do material Zr-Sap por DRX, MEV e FTIR, pode se dizer que ocorreu a pilarização da argila saponita com o Zr e que o híbrido apresenta características superior ao material de partida. Os testes de fotoestabilização também foram eficazes para demonstrar que o material apresenta uma elevada adsorção do fármaco estudado, e que após isso, temos uma melhora na sua fotoestabilização, mantendo sua característica principal que é a atividade antibacteriana bactérias.

## REFERÊNCIAS

- ABOUNASSIF, M. A.; EL-OBEID, H. A.; GADKARIEM, E. A. Stability studies on some benzocycloheptane antihistaminic agents. **Journal of Pharmaceutical and Biomedical Analysis**, v. 36, n. 5, p. 1011–1018, 2005.
- ARSALAN, A. et al. The effect of albumin in photostabilization of riboflavin: A kinetic study. **Journal of Photochemistry and Photobiology A: Chemistry**, v. 394, n. December 2019, 2020.
- BAHRANOWSKI, K. et al. [Ti,Zr]-pillared montmorillonite - A new quality with respect to Ti- and Zr-pillared clays. **Microporous and Mesoporous Materials**, v. 202, n. C, p. 155–164, 2015.
- CHAUHAN, T. et al. Synthesis, characterization, and challenges faced during the preparation of zirconium pillared clays. **Arabian Journal of Chemistry**, v. 15, n. 4, 2022.
- COHEN, E.; JOSEPH, T. Photostabilization of Beauveria bassiana conidia using anionic dyes. **Applied Clay Science**, v. 42, n. 3–4, p. 569–574, 2009.

CUNHA, R. V. et al. Organic–Inorganic Hybrid Pigments Based on Bentonite: Strategies to Stabilize the Quinoidal Base Form of Anthocyanin. **International Journal of Molecular Sciences**, v. 24, n. 3, p. 2417, 2023.

D'SOUZA, G. B. et al. Designing engineered biopolymer mesh filter for robust sequestration of chromium (VI), fluoride and other emerging pollutants: A sustainable approach. **Chemical Engineering Journal**, v. 443, n. January, 2022.

DA ROCHA, M. C. et al. Understanding the effect of UV light in systems containing clay minerals and tetracycline. **Applied Clay Science**, v. 183, n. May, p. 105311, 2019.

DE LUCA, M. et al. Photostabilization studies of antihypertensive 1,4-dihydropyridines using polymeric containers. **International Journal of Pharmaceutics**, v. 505, n. 1–2, p. 376–382, 2016.

DESAI, D. S. et al. Photostabilization of uncoated tablets of sorivudine and nifedipine by incorporation of synthetic iron oxides. **International Journal of Pharmaceutics**, v. 103, n. 1, p. 69–76, 1994.

FAN, P. et al. Ecotoxicology and Environmental Safety Growth and physiological responses in a submerged clonal aquatic plant and multiple-endpoint assessment under prolonged exposure to ciprofloxacin. **Ecotoxicology and Environmental Safety**, v. 239, n. January, p. 113690, 2022.

FATIMAH, I. et al. TiO<sub>2</sub>-pillared saponite and photosensitization using a ruthenium complex for photocatalytic enhancement of the photodegradation of bromophenol blue. **Applied Clay Science**, v. 183, n. February, p. 105302, 2019.

GIL, A. et al. A review on characterization of pillared clays by specific techniques. **Applied Clay Science**, v. 53, n. 2, p. 97–105, 2011.

HAMILTON, A. R. et al. Applied Clay Science Formulation and antibacterial properties of clay mineral-tetracycline and -doxycycline composites. v. 179, n. May, 2019.

JAMRÓGIEWICZ, M.; WIELGOMAS, B.; STRANKOWSKI, M. Evaluation of the photoprotective effect of β-cyclodextrin on the emission of volatile degradation products of ranitidine. **Journal of Pharmaceutical and Biomedical Analysis**, v. 98, p. 113–119, 2014.

KENNE DEDZO, G. et al. Functionalization of synthetic saponite: Identification of grafting sites and application for anions sequestration. **Applied Surface Science**, v. 567, n. August, p. 150911, 2021.

MADEJOV, J. Applied Clay Science Intercalation of [ Ni ( bpy ) 3 ]<sup>2+</sup> complex cation into synthetic saponite : Preparation , characterization and magnetic properties ~ Martin Orend a. v. 231, n. October 2022, 2023.

NIKOLAOU, A.; MERIC, S.; FATTA, D. Occurrence patterns of pharmaceuticals in water and wastewater environments. p. 1225–1234, 2007.

PEÑA-GUZMÁN, C. et al. Emerging pollutants in the urban water cycle in Latin America: A review of the current literature. **Journal of Environmental Management**, v. 237, n. December 2018, p. 408–423, 2019.

RAFFIN, R. P. et al. Increasing sodium pantoprazole photostability by microencapsulation: Effect of the polymer and the preparation technique. **European Journal of Pharmaceutics and Biopharmaceutics**, v. 69, n. 3, p. 1014–1018, 2008.

SÁ, A. S. et al. ROS-mediated antibacterial response of ZnO and ZnO containing cerium under light. **Chemical Papers**, n. 0123456789, 2022.

SAMUELS, M.; MOR, O.; RYTWO, G. Metachromasy as an indicator of photostabilization of methylene blue adsorbed to clays and minerals. **Journal of Photochemistry and Photobiology B: Biology**, v. 121, p. 23–26, 2013.

SI, Y. et al. Photostabilization of the herbicide bensulfuron-methyl by using organoclays. **Chemosphere**, v. 54, n. 7, p. 943–950, 2004.

SOPLAH, S. et al. Development and evaluation of ciprofloxacin-bacterial cellulose composites produced through in situ incorporation method. **Biotechnology Reports**, v. 34, n. September 2021, p. e00726, 2022.

SPRYNSKYY, M. et al. Preparation of AgNPs/saponite nanocomposites without reduction agents and study of its antibacterial activity. **Colloids and Surfaces B: Biointerfaces**, v. 180, n. April, p. 457–465, 2019.

STURINI, M. et al. Photodegradation of fluoroquinolones in surface water and antimicrobial activity of the photoproducts. **Water Research**, v. 46, n. 17, p. 5575–5582, 2012.

STURINI, M. et al. Chemosphere Sunlight-induced degradation of fluoroquinolones in wastewater effluent : Photoproducts identification and toxicity. **Chemosphere**, v. 134, p. 313–318, 2015.

SUGI, S.; RADHIKA, S.; PADMA, C. M. Photocatalytic and antibacterial activity of PVA mediated zinc-copper ferrite composites. **Materials Today: Proceedings**, v. 64, n. October 2021, p. 1738–1744, 2022.

TABASSUM, N. et al. Zirconium oxide ( $ZrO_2$ ) nanoparticles from antibacterial activity to cytotoxicity: A next-generation of multifunctional nanoparticles. **Materials Today Communications**, v. 26, n. November 2020, p. 102156, 2021.

THOMA, K.; KLIMEK, R. Photostabilization of drugs in dosage forms without protection from packaging materials. **International Journal of Pharmaceutics**, v. 67, n. 2, p. 169–175, 1991.

TRIGUEIRO, P. et al. Dyes and Pigments When anthraquinone dyes meet pillared montmorillonite : Stability or fading upon exposure to light ? **Dyes and Pigments**, v. 159, n. June, p. 384–394, 2018a.

TRIGUEIRO, P. et al. When anthraquinone dyes meet pillared montmorillonite: Stability or fading upon exposure to light? **Dyes and Pigments**, v. 159, n. June, p. 384–394, dez. 2018b.

ZHANG, H.; CHEN, G. potent antibacterial activities of Ag/TiO<sub>2</sub> nanocomposite powders synthesized by a one-pot sol-gel method. **Environmental Science and Technology**, v. 43, n. 8, p. 2905–2910, 2009.

**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 (2011) e Bacharel em Química Industrial (2023) pela Universidade de Uberaba, em Ciências Biológicas (2021) e em Física (2022) pela Faculdade Única. Especialista em Metodologia do Ensino de Química e em Ensino Superior pela Faculdade JK Serrana em Brasília (2012), especialista em Ensino de Ciências e Matemática pelo Instituto Federal do Triângulo Mineiro (2021), especialista em Ciências Naturais e Mercado de Trabalho (2022) pela Universidade Federal do Piauí (UFPI) e especialista em Química Analítica pela Faculdade Metropolitana (FAMES) em 2023. Mestre (2015) e doutor (2018) em Química Analítica pela Universidade Federal de Uberlândia (UFU). Realizou o primeiro estágio Pós-Doutoral (de maio de 2020 a abril de 2022) e cursa o segundo estágio (2022- atual) na UFU com ênfase na aplicação de novos agentes oxidantes utilizando radiação solar para remoção de Contaminantes de Preocupação Emergente (CPE) em efluentes de uma estação de tratamento de esgoto. Atualmente é químico e responsável técnico pelos laboratórios da Unicesumar/Polo Patrocínio e professor do SENAI-GO. 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 acompanhamento do CPE; (iii) Desenvolvimento de novas tecnologias avançadas para remoção de CPE em diferentes matrizes aquáticas; (iv) Aplicação de processos oxidativos avançados ( $H_2O_2/UV\ C$ ,  $TiO_2/UV-A$  e foto-Fenton e outros) para remoção de CPE em efluentes de estação de tratamento de efluentes para reuso; (v) Estudo e desenvolvimento de novos bioadsorventes para remediação ambiental de CPE em diferentes matrizes aquáticas; (vi) Educação Ambiental e; (vii) alfabetização científica e processos de alfabetização na área de Ciências Naturais, especialmente biologia e química. É membro do corpo editorial da Atena Editora desde 2021 e já organizou mais de 60 e-books e publicou 40 capítulos de livros nas diferentes áreas de Ciências da Natureza, Engenharia Química e Sanitária/Ambiental, Meio ambiente dentre outras áreas afins.

**A**

- Absorbância 63
- Ação humana 3
- Adsorção 56, 58, 59, 60, 63, 64, 66, 67
- Análise quantitativa 14, 15, 17, 18, 20, 21, 23
- Analitos 14, 17, 18, 19, 20, 21, 22, 23
- Aprendizagem significativa 45, 46
- Argila saponita 56, 58, 59, 62, 67
- Argilas pilarizadas 58
- Argilominerais 56, 58
- Atividade antibacteriana 57, 60, 65, 66, 67

**B**

- Biodegradáveis 46, 51

**C**

- Cálculos teóricos 25, 26, 27, 31, 32, 33, 34, 35, 38, 39, 40, 41
- Ciência investigativa 26
- Ciprofloxacino 56, 58, 59, 60, 63, 64, 67
- Colaboradores 6, 34, 37, 38, 39
- Coluna 17, 18, 19, 20, 22
- Compostos complexos 14, 15, 16, 17, 18, 19, 20, 21, 23
- Compostos orgânicos 17, 19, 23, 25, 29, 30, 31, 36, 40
- Cromatografia de fase reversa 17
- Cromatografia de troca iônica 18
- Cromatografia líquida 14, 15, 16, 17, 19, 20, 22, 23, 24
- Cromatografia Líquida de Alta Eficiência (HPLC) 14, 15, 16, 17, 19, 22, 23, 24

**D**

- Detector 18, 20, 21, 60
- Dicroísmo Circular Vibracional (VCD) 30, 31
- Diferença de Potencial (DDP) 47, 48
- Difração de Raios-X (DRX) 30, 31
- Difratogramas 61

**E**

- Educação escolar quilombola 9, 11

- Eletroquímica 20, 45, 46, 47  
Elucidação estrutural 25, 27, 28, 30, 31, 36, 38, 39  
Eluente 20  
Eluição 17, 18, 19, 20  
Entrevista 5, 6, 12, 13  
Equação de Schrödinger 34, 35  
*Escherichia coli* 60, 66  
Espectrometria de Massas (EM) 14, 18, 20, 23, 30, 31  
Espectroscopia 25, 26, 27, 28, 29, 38, 39, 40, 63  
Estrutura tridimensional (3D) 33  
Experimentação 45, 46, 54, 55
- F**
- Fármacos 57, 59, 66, 67  
Fase estacionária 17, 18, 19  
Fase móvel 17, 18, 19, 20  
Fase reversa 17, 19  
Ferramentas tecnológicas 27  
Fotoestabilidade 56, 57, 59, 60, 66
- G**
- Gram-negativas 57, 58, 65, 66  
Gram-positivas 57, 58, 60, 65
- H**
- Hidrofóbicos 17, 19  
História de vida 1, 3, 4, 5, 11, 12, 13
- I**
- Infravermelho (IV) 30, 31, 38, 40, 59, 63, 64  
Injetor 18  
Interdisciplinaridade 46
- M**
- Mecânica quântica 27, 34, 36  
Medicamentos 21, 57, 58  
Meio ambiente 21, 44, 46, 49, 52, 54, 57, 58, 70  
Metodologia de investigação 2

- Metodologia de narrativas 1, 3  
Metodologia qualitativa 2  
Método observacional 16  
Métodos analíticos 17, 21  
Métodos estatísticos 25, 36, 37  
Métricas holísticas 44, 49, 53  
Modelagem molecular 25, 32, 42

**N**

- Narrativas (auto)biográficas 1, 2, 3, 4, 9, 11, 13  
Necessidades formativas 9, 10, 12

**P**

- Pilha 44, 47, 48  
Poluentes emergentes 56, 57  
Práticas pedagógicas 10, 11, 49  
Produtos naturais 28, 30, 31, 34, 36, 38, 39, 41  
Professores 1, 2, 3, 4, 9, 10, 11, 12, 13

**Q**

- Quilombola 1, 2, 7, 9, 11  
Química analítica 15, 17, 18, 70  
Química computacional 25, 26, 27, 31, 32, 34, 35, 36, 39, 42  
Química verde 44, 45, 46, 47, 49, 50, 51, 53, 54, 55

**R**

- Ressonância Magnética Nuclear (RMN) 28, 29, 31, 40, 42

**S**

- Seletividade 14, 18, 19, 23  
Sensibilidade 14, 15, 17, 20, 21, 22, 23  
Sílica 17, 19  
*Softwares* 33, 36  
*Staphylococcus aureus* 60, 65, 66  
Subjetividade do sujeito 5  
Substâncias tóxicas 49, 52

# ÍNDICE REMISSIVO

## T

Tecnologias da Informação e Comunicação (TICs) 31

Texto narrativo 6

## U

Ultravioleta-visível (UV-Vis) 20, 30, 31

## V

Voltagem 47

# O PAPEL DA QUÍMICA

---

## ENTRE AS CIÊNCIAS NATURAIS

2

- 🌐 [www.atenaeditora.com.br](http://www.atenaeditora.com.br)
- ✉️ [contato@atenaeditora.com.br](mailto:contato@atenaeditora.com.br)
- 📷 [@atenaeditora](https://www.instagram.com/atenaeditora)
- FACEBOOK [www.facebook.com/atenaeditora.com.br](https://www.facebook.com/atenaeditora.com.br)

# O PAPEL DA QUÍMICA

ENTRE AS CIÊNCIAS NATURAIS

2

- 🌐 [www.atenaeditora.com.br](http://www.atenaeditora.com.br)
- ✉️ [contato@atenaeditora.com.br](mailto:contato@atenaeditora.com.br)
- 📷 [@atenaeditora](https://www.instagram.com/atenaeditora)
- FACEBOOK [www.facebook.com/atenaeditora.com.br](https://www.facebook.com/atenaeditora.com.br)