



# QUÍMICA EM AÇÃO

desvendando os segredos da matéria

---

Cleiseano Emanuel da Silva Paniagua  
(Organizador)



# QUÍMICA EM AÇÃO

desvendando os segredos da matéria

---

Cleiseano Emanuel da Silva Paniagua  
(Organizador)

<b>Editora chefe</b>	
Profª Drª Antonella Carvalho de Oliveira	
<b>Editora executiva</b>	
Natalia Oliveira	
<b>Assistente editorial</b>	
Flávia Roberta Barão	
<b>Bibliotecária</b>	
Janaina Ramos	
<b>Projeto gráfico</b>	2024 by Atena Editora
Ellen Andressa Kubisty	Copyright © Atena Editora
Luiza Alves Batista	Copyright do texto © 2024 O autor
Nataly Evilin Gayde	Copyright da edição © 2024 Atena
Thamires Camili Gayde	Editora
<b>Imagens da capa</b>	Direitos para esta edição cedidos à
iStock	Atena Editora pelo autor.
<b>Edição de arte</b>	<i>Open access publication by Atena</i>
Luiza Alves Batista	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 da obra e seus dados em sua forma, correção e confiabilidade são de responsabilidade exclusiva do autor, inclusive não representam necessariamente a posição oficial da Atena Editora. Permitido o *download* da obra e o compartilhamento desde que sejam atribuídos créditos ao autor, mas sem a possibilidade de alterá-la de nenhuma forma ou utilizá-la para fins comerciais.

Os manuscritos nacionais foram previamente submetidos à avaliação cega por pares, realizada pelos membros do Conselho Editorial desta editora, enquanto os manuscritos internacionais foram avaliados por pares externos. Ambos foram aprovados para publicação com base em critérios de neutralidade e imparcialidade acadêmica.

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

#### **Conselho Editorial**

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

Prof. Dr. Adélio Alcino Sampaio Castro Machado – Universidade do Porto

Profª Drª Alana Maria Cerqueira de Oliveira – Instituto Federal do Acre

Profª Drª Ana Grasielle Dionísio Corrêa – Universidade Presbiteriana Mackenzie

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

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

- Prof<sup>a</sup> Dr<sup>a</sup> Carmen Lúcia Voigt – Universidade Norte do Paraná  
Prof. Dr. Cleiseano Emanuel da Silva Paniagua – Colégio Militar Dr. José Aluisio da Silva Luz / Colégio Santa Cruz de Araguaina/TO  
Prof<sup>a</sup> Dr<sup>a</sup> Cristina Aledi Felsemburgh – Universidade Federal do Oeste do Pará  
Prof. Dr. Diogo Peixoto Cordova – Universidade Federal do Pampa, Campus Caçapava do Sul  
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. Dr. Hauster Maximiler Campos de Paula – Universidade Federal de Viçosa  
Prof<sup>a</sup> Dr<sup>a</sup> Iara Margolis Ribeiro – Universidade Federal de Pernambuco  
Prof<sup>a</sup> Dr<sup>a</sup> Jéssica Barbosa da Silva do Nascimento – Universidade Estadual de Santa Cruz  
Prof<sup>a</sup> Dr<sup>a</sup> 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. Dr. Leonardo França da Silva – Universidade Federal de Viçosa  
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. Dr. Marcos Vinicius Winckler Caldeira – Universidade Federal do Espírito Santo  
Prof<sup>a</sup> Dr<sup>a</sup> Maria Iaponeide Fernandes Macêdo – Universidade do Estado do Rio de Janeiro  
Prof<sup>a</sup> Dr<sup>a</sup> Maria José de Holanda Leite – Universidade Federal de Alagoas  
Prof<sup>a</sup> Dr<sup>a</sup> Mariana Natale Fiorelli Fabiche – Universidade Estadual de Maringá  
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 Natasha Kinas – Universidade do Estado de Santa Catarina  
Prof<sup>a</sup> Dr<sup>a</sup> Priscila Tessmer Scaglioni – Universidade Federal de Pelotas  
Prof. Dr. Rafael Pacheco dos Santos – Universidade do Estado de Santa Catarina  
Prof. 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

## Química em ação: desvendando os segredos da matéria

**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)	
Q6	Química em ação: desvendando os segredos da matéria / Organizador Cleiseano Emanuel da Silva Paniagua. - Ponta Grossa - PR: Atena, 2024.  Formato: PDF Requisitos de sistema: Adobe Acrobat Reader Modo de acesso: World Wide Web Inclui bibliografia ISBN 978-65-258-2896-1 DOI: <a href="https://doi.org/10.22533/at.ed.961242811">https://doi.org/10.22533/at.ed.961242811</a>  1. Química. I. Paniagua, Cleiseano Emanuel da Silva (Organizador). II. Título.
CDD 540	
Elaborado por Bibliotecária Janaina Ramos – CRB-8/9166	

## DECLARAÇÃO DO AUTOR

Para fins desta declaração, o termo 'autor' será utilizado de forma neutra, sem distinção de gênero ou número, salvo indicação em contrário. Da mesma forma, o termo 'obra' refere-se a qualquer versão ou formato da criação literária, incluindo, mas não se limitando a artigos, e-books, conteúdos on-line, acesso aberto, impressos e/ou comercializados, independentemente do número de títulos ou volumes. O autor desta obra: 1. Atesta não possuir qualquer interesse comercial que constitua um conflito de interesses em relação à obra publicada; 2. Declara que participou ativamente da elaboração da obra, 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 da obra para submissão; 3. Certifica que a obra publicada está completamente isenta de dados e/ou resultados fraudulentos; 4. Confirma a citação e a referência correta de todos os dados e de interpretações de dados de outras pesquisas; 5. Reconhece ter informado todas as fontes de financiamento recebidas para a consecução da pesquisa; 6. Autoriza 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 da obra publicada, 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. A editora pode disponibilizar a obra em seu site ou aplicativo, e o autor também pode fazê-lo por seus próprios meios. Este direito se aplica apenas nos casos em que a obra não estiver sendo comercializada por meio de livrarias, distribuidores ou plataformas parceiras. Quando a obra for comercializada, o repasse dos direitos autorais ao autor será de 30% do valor da capa de cada exemplar vendido; 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. Em conformidade com a Lei Geral de Proteção de Dados (LGPD), a editora não cede, comercializa ou autoriza a utilização dos nomes e e-mails dos autores, bem como quaisquer outros dados dos mesmos, para qualquer finalidade que não o escopo da divulgação desta obra.

O e-book: “Química em ação: desvendando os segredos da matéria” é constituído por quatro capítulos de livros que avaliaram: *i)* ensino de química; *ii)* aplicação da química no desenvolvimento de produtos cosméticos; *iii)* síntese e caracterização de novos nanocompósitos e; *iv)* química computacional aplicada na investigação e compreensão de mecanismos de adsorção de poluentes de preocupação emergente.

O primeiro capítulo investigou a capacidade dos alunos em relação ao aprendizado científico na área de química, bem como reconhecer o conhecimento e a sua relevância para a formação de um sujeito crítico. Os pesquisadores utilizaram o tema “solubilidade” para ser trabalhado com alunos do ensino médio de uma escola pública na cidade de Unaí/MG, sendo observado que a experimentação química é capaz de promover um maior interesse pelo processo de aprendizado.

O capítulo 2 propôs a produção de perfume sólido de forma artesanal por meio de um roteiro previamente estabelecido. Os pesquisadores concluíram que apesar do produto cosmético possuir limitação sistêmica em relação a intensidade do cheiro, o método foi eficaz para obtenção de um perfume com boas características e passível de comercialização, gerando emprego e renda.

O terceiro capítulo investigou o processo de síntese e caracterização do óxido de grafeno (OG) por meio do método de Hummers modificado. Inúmeras técnicas de caracterização (FTIR, DSC, MEV e outras) foram utilizadas para identificar o OG, com posterior formação de um nanocompósito em uma matriz de Polietileno tereftalato (PET), a qual foi submetida a uma nova caracterização e ensaios de propriedades mecânicas, térmicas, reológicas e de barreira na qual apresentou excelentes resultados e um enorme potencial para ser utilizado como um aditivo na indústria de terceira geração de cadeias de plásticos.

Por fim, o quarto capítulo apresentou um estudo que utilizou a química computacional, a fim de se estudar o processo de adsorção de contaminantes presentes em águas residuárias. Os pesquisadores avaliaram parâmetros tanto do adsorvente quanto do adsorbato por meio do cálculo de energia de adsorção utilizando o método de dinâmica molecular, sendo possível identificar o mecanismo de adsorção e os fatores que o afetam (concentração do analito de interesse, pH, temperatura dentre outros).

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.

# SUMÁRIO

<b>CAPÍTULO 1 .....</b>	<b>1</b>
SOLUBILIDADE: DESVENDANDO OS MISTÉRIOS DA DISSOLUÇÃO DE SUBSTÂNCIAS	
Anna Carla Mourão Mariz	
Laís Bonin Anzolin	
João Victor Oliveira Araújo	
Mariane das Graças Costa de Oliveira	
Mirian da Silva Costa Pereira	
doi <a href="https://doi.org/10.22533/at.ed.9612428111">https://doi.org/10.22533/at.ed.9612428111</a>	
<b>CAPÍTULO 2 .....</b>	<b>7</b>
DESAFIOS NA PRODUÇÃO E AJUSTE NA FORMULAÇÃO DE PERFUME SÓLIDO ARTESANAL	
Luana Dias da Silva	
Anatalia Kutianski Gonzalez Vieira	
Barbra Candice Southern	
Elizabeth Teixeira de Souza	
Tiago Savignon Cardoso Machado	
Waldiney Cavalcante de Mello	
doi <a href="https://doi.org/10.22533/at.ed.9612428112">https://doi.org/10.22533/at.ed.9612428112</a>	
<b>CAPÍTULO 3 .....</b>	<b>20</b>
SÍNTESE E CARACTERIZAÇÃO DO ÓXIDO DE GRAFENO POR VIA QUÍMICA PARA PRODUÇÃO DE NANOCOMPÓSITOS DE POLIETILENO TEREFITALATO	
Brenno Lavigne Diniz	
Ticiiana de Oliveira Santiago	
Luiz Antonio Pimentel Cavalcanti	
Ivan Costa da Silva	
Cláudia Teresa Teles Farias	
doi <a href="https://doi.org/10.22533/at.ed.9612428113">https://doi.org/10.22533/at.ed.9612428113</a>	
<b>CAPÍTULO 4 .....</b>	<b>39</b>
USE OF COMPUTATIONAL CHEMISTRY TO STUDY THE ADSORPTION PROCESS OF CONTAMINANTS USING ACTIVATED CARBON PREPARED CHEMICALLY FROM AGUAJE SEEDS ( <i>MAURITIA FLEXUOSA</i> ) AND CHESTNUT SHELL	
A.L. Paredes-Doig	
E. Doig-Camino	
G. Picasso	
A. La Rosa-Toro	
M.R. Sun-Kou	
doi <a href="https://doi.org/10.22533/at.ed.9612428114">https://doi.org/10.22533/at.ed.9612428114</a>	
<b>SOBRE O ORGANIZADOR .....</b>	<b>50</b>
<b>ÍNDICE REMISSIVO .....</b>	<b>51</b>

# CAPÍTULO 1

## SOLUBILIDADE: DESVENDANDO OS MISTÉRIOS DA DISSOLUÇÃO DE SUBSTÂNCIAS

---

*Data de submissão: 08/10/2024*

*Data de aceite: 01/11/2024*

**Anna Carla Mourão Mariz**

Universidade Federal dos Vales do Jequitinhonha e Mucuri – UFVJM,  
Diamantina-MG

**Laís Bonin Anzolin**

**João Victor Oliveira Araújo**

**Mariane das Graças Costa de Oliveira**

**Míriam da Silva Costa Pereira**

### INTRODUÇÃO

A valorização da química no currículo da educação básica é imperativa, uma vez que esta disciplina representa uma ferramenta fundamental para o aprimoramento cultural e educacional da sociedade (Brasil. MEC, 2006). Entretanto, essa não constitui a norma vigente, uma vez que o ensino da química predominante nas escolas de todo o Brasil é caracterizado por um formato inflexível, seguindo abordagens tradicionais em sala de aula. Tal fato compromete a obtenção

de uma compreensão abrangente dos conteúdos químicos e, igualmente, não incita o devido entusiasmo nos alunos por essa fundamental disciplina científica.

A disciplina de Química deve capacitar o aluno a compreender não apenas os processos químicos, mas também a construção do conhecimento científico, em estreita conexão com as aplicações tecnológicas e suas consequências nas esferas ambiental, social, política e econômica (Brasil. MEC, 2006, p. 109).

A implementação de experimentações como parte integrante do ensino frequentemente encontra obstáculos, principalmente devido à escassez de recursos financeiros e laboratoriais nas instituições educacionais, bem como à falta de capacitação e conhecimento dos professores no campo da educação científica. Adicionalmente, um fator facilitador para o processo de ensino reside na capacidade de relacionar o conteúdo com situações do cotidiano dos estudantes, a fim de evitar que o tema

pareça distante e, assim, promover uma aprendizagem mais eficaz e estimular o interesse dos alunos (SANTOS, 2016).

O ensino da química precisa estar em sintonia com as demandas contemporâneas, adotando abordagens que incentivem a problematização, o desafio e a motivação dos estudantes. A partir dessas estratégias, busca-se promover a construção do conhecimento científico. É essencial evitar a simples apresentação de questionamentos preestabelecidos com respostas definitivas, a fim de proporcionar uma educação química eficaz. O objetivo é capacitar os alunos a interagirem ativamente e profundamente com o seu ambiente, reconhecendo que os conteúdos têm relevância em seu mundo e que eles desempenham um papel ativo e corresponsável nesse processo (LIMA, 2012).

Com o intuito de oferecer uma alternativa para esses desafios, é possível identificar abordagens educacionais mais progressistas e flexíveis em contraste com o tradicional modelo de sala de aula. Tais abordagens têm o potencial de aprimorar o ensino da química. Dada a precariedade da educação no Brasil, particularmente nas escolas públicas, torna-se cada vez mais imperativo buscar soluções que aprimorem o processo educacional. Isso inclui a introdução de práticas experimentais nas salas de aula, que não apenas despertem o interesse dos alunos, mas também proporcionem uma aplicação prática do conteúdo, aprimorando assim a aprendizagem.

Sabe-se que a prática experimental se mostra como recurso metodológico eficaz e que pode contribuir com a melhoria significativa na aprendizagem. Conforme relata Guimarães e Dorn (2015), a experimentação pode ser útil na construção de significados dos conceitos químicos.

Assim, como observado por Gonçalves e Goi (2022), é necessário, juntamente com o planejamento da atividade experimental investigativa, a elaboração de questões que desencadeiem uma pesquisa e levantamento de hipóteses dos estudantes.

O processo de aprendizado de Química pelos estudantes do Ensino Médio requer uma compreensão abrangente e integrada das transformações químicas que ocorrem no mundo físico. Isso habilita os alunos a avaliarem informações provenientes da tradição cultural, da mídia e da escola com uma base sólida, capacitando-os a tomar decisões de forma autônoma, tanto como indivíduos quanto como cidadãos conscientes (Brasil. MEC, 1999, p. 31).

Com base nessas ponderações, o propósito deste estudo consiste em compartilhar os resultados de uma pesquisa conduzida em uma escola pública de ensino médio localizada em Unaí/MG. O estudo envolveu uma análise do processo de ensino e aprendizagem, com foco no uso de práticas experimentais para o ensino dos conteúdos da disciplina de Química.

## MATERIAL E MÉTODOS

Neste estudo, a participação envolveu 52 alunos, distribuídos entre turmas do 2º e 3º ano do ensino médio. Inicialmente, os alunos foram incentivados a responder a um questionário com quatro questões discursivas, relacionadas ao tema em estudo, com base em seus conhecimentos prévios adquiridos através de métodos tradicionais de ensino.

Em um segundo momento, realizou-se uma exposição do conteúdo sobre compostos polares e apolares por meio de apresentações de slides. Essa abordagem incluiu a contextualização prática do tema, com exemplos que destacaram a relevância da solubilidade de diferentes compostos polares e apolares em situações cotidianas dos estudantes.”

Após a exposição teórica, os alunos foram organizados em grupos de seis pessoas, com o objetivo de conduzirem as experimentações com a supervisão do professor regente e dos integrantes do projeto. As atividades práticas foram realizadas no ambiente da sala de aula, uma vez que a escola carecia de recursos laboratoriais e de um espaço apropriado para a execução de tais experimentos. Foram utilizadas vidrarias como tubos de ensaio e bêqueres, suporte para os tubos de ensaio, espátulas e pipetas, além de 6 (seis) diferentes tipos de reagentes como: Água destilada ( $\text{H}_2\text{O}$ ), Álcool etílico ( $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{OH}$ ), Acetona ( $\text{CH}_3\text{COCH}_3$ ), Hexano ( $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_3$ ), Iodo ( $\text{I}_2$ ) e Iodeto de potássio ( $\text{KI}$ ).

O objetivo da experiência foi determinar e observar a solubilidade de compostos polares e apolares. Para isso, os alunos receberam diversos reagentes e seguiram as instruções do roteiro experimental, adicionando esses reagentes uns aos outros em tubos de ensaio numerados. Essa abordagem facilitou a observação dos diferentes comportamentos de solubilidade resultantes da combinação dos compostos.

Ao longo de toda a experiência, houve uma constante reflexão sobre as conclusões obtidas em cada etapa, com o intuito de estimular os alunos a relacionarem e correlacionarem os resultados com o conteúdo de química previamente abordado.

Ao final da prática, aplicou-se novamente um questionário individual, dessa vez contendo 5 (cinco) questões objetivas que relacionavam o conteúdo discutido à prática realizada.

## RESULTADOS E DISCUSSÕES

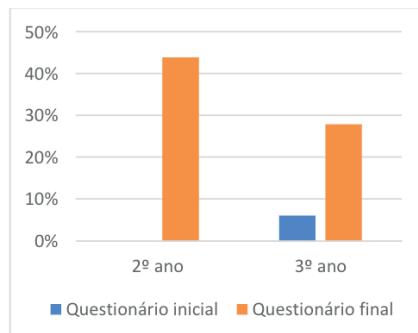
O questionário inicial compreendia quatro perguntas de natureza discursiva, destinadas a serem respondidas individualmente. Essas questões estavam relacionadas ao conteúdo previamente abordado em sala de aula e que era essencial para compreender o objeto da experiência. Surpreendentemente, constatou-se que os alunos enfrentaram consideráveis dificuldades ao responder a essas perguntas, apesar de sua natureza fundamental.

O roteiro experimental disponibilizados aos alunos detalhava todos os materiais e

reagentes utilizados por cada grupo, bem como o procedimento a ser seguido.

O questionário final, por sua vez, consistiu em cinco perguntas objetivas que versavam sobre os resultados obtidos na experiência, envolvendo a aplicação prática do conteúdo previamente estudado.

A Figura 1 ilustra a porcentagem de respostas corretas nos questionários inicial e final nas turmas do 2º e 3º ano. No 2º ano, a porcentagem de acertos no primeiro questionário foi de 0%, enquanto no segundo questionário foi de 44%. Já no 3º ano, a taxa de acertos no primeiro questionário foi de 6,08%, aumentando para 28% no segundo questionário.



**Figura 1.** Taxa de Respostas Corretas nos Questionários.

Esses resultados corroboram com as observações feitas por Oliveira (2021) sobre como a abordagem investigativa no laboratório de química pode ser enriquecedora e motivadora tanto para os docentes quanto para os alunos. O aumento significativo nas taxas de acertos nos questionários evidencia o impacto positivo da experimentação na aprendizagem dos conteúdos abordados. Além disso, observou-se um maior interesse e uma participação mais ativa dos alunos durante a experiência, em conformidade com relatos anteriores de Guimarães e Dorn (2015).

Conforme notado por Gonçalves e Goi (2023), ao longo do desenvolvimento da atividade, os alunos mobilizam seus conhecimentos prévios e buscam novos conhecimentos para formular hipóteses e propor soluções para os problemas apresentados, desempenhando assim um papel ativo na aprendizagem, enquanto o professor atua como mediador do processo.

Guimarães (2009) também observou que “a experimentação pode ser uma estratégia eficaz para criar situações-problema reais que promovam a contextualização e estimulem a busca por questões investigativas”. Isso está em consonância com as conclusões do presente estudo, no qual a correlação entre o conteúdo teórico e as aplicações práticas do dia a dia dos alunos tornou o conteúdo mais acessível e compreensível.

## **CONCLUSÕES**

Inicialmente, notou-se uma significativa dificuldade por parte dos estudantes ao responder o questionário inicial. As respostas apresentaram discrepâncias consideráveis e, em muitos casos, foram deixadas em branco. Isso levou à conclusão de que o conteúdo químico abordado não estava efetivamente promovendo o entendimento e a compreensão dos alunos em relação ao tema sobre solubilidade de compostos polares e apolares.

No entanto, após a implementação de uma nova abordagem baseada em experimentação prática e na conexão do conteúdo com situações do dia a dia dos estudantes, houve um notável aumento no índice de respostas corretas no questionário final. Este estudo evidencia que a realização de experimentos contribuiu para a melhoria dos índices de acertos nas questões apresentadas, além de oferecer aos alunos a oportunidade de relacionar os fenômenos observados com suas experiências cotidianas, estimulando discussões tanto entre os próprios alunos quanto com o professor. Portanto, a experimentação se revela como uma ferramenta potencialmente valiosa para a aprendizagem.

## **AGRADECIMENTOS**

À Pró-Reitoria de Extensão e Cultura (PROEXC) da UFVJM pela concessão de bolsa através do Programa Institucional de Bolsas de Extensão (PIBEX) e à Escola Estadual Vigário Torres.

## **REFERÊNCIAS**

BRASIL. Ministério da Educação (MEC). Secretaria de Educação Básica (SEB). Orientações curriculares para o ensino médio: ciências da natureza, matemática e suas tecnologias. v. 2. Brasília, DF: MEC/SEB, 2006.

BRASIL. Ministério da Educação (MEC). Secretaria de Educação Média e Tecnológica. (SEMTEC). Parâmetros curriculares nacionais do ensino médio: ciências da natureza, matemática e suas tecnologias. v. 3. Brasília, DF: MEC/SEMTEC, 1999.

CAMARGOS, Ana Paula Vieira de et al. A importância de aulas experimentais no aprendizado de química no ensino médio. *Brazilian Applied Science Review*, v. 2, n. 6, p. 1916-1920, 2018.

GUIMARÃES, Cleidson Carneiro. Experimentação no ensino de química: caminhos e descaminhos rumo à aprendizagem significativa. *Química Nova na Escola*, v. 31, n. 3, p. 198-202, 2009.

GUIMARÃES, Cleidson Carneiro; DORN, Rejane Cristina. Efeito estufa usando material alternativo. *Química Nova na Escola*, v. 37, n. 2, p. 153-157, 2015.

GONÇALVES, Raquel Pereira Neves; GOI, Mara Elisângela Jappe. A construção do conhecimento químico por meio do uso da Metodologia de Experimentação Investigativa. *Revista Debates Em Ensino De Química*, v. 8, n. 2, p. 31-40, 2022.

LEITE, L. R., & Lima, J. O. G. de. (2015). O aprendizado da Química na concepção de professores e alunos do ensino médio: um estudo de caso. *Revista Brasileira De Estudos Pedagógicos*, 96(243), 380–398. <https://doi.org/10.1590/S2176-6681340312848>

LIMA, J. O. G. de. (2012). Perspectivas de novas metodologias no Ensino de Química. *Revista Espaço Acadêmico*, 12(136), 95-101. Recuperado de <https://periodicos.uem.br/ojs/index.php/EspacoAcademico/article/view/15092>

OLIVEIRA, R. R.; SCHETINGER, M. R. C. Argumentação no ensino médio a partir da experimentação baseada em investigação em Química. **Pesquisa, Sociedade e Desenvolvimento**, [S. I.], v. 10, n. 16, p. e166101623540, 2021. DOI: 10.33448/rsd-v10i16.23540. Disponível em: <https://rsdjournal.org/index.php/rsd/article/view/23540>. Acesso em: 26 ago. 2023.

PRSYBYCIEM, Moises & Silveira, Rosemari & Sauer, Elenise. (2018). Experimentação investigativa no ensino de química em um enfoque CTS a partir de um tema sociocientífico no ensino médio. 17. 602-625.

SANTOS, Renato Gomes et al. Propostas de aulas experimentais para contextualização e abordagem de conteúdos iniciais de química orgânica a alunos da terceira série do ensino médio de uma escola pública. *Experiências em Ensino de Ciências*, v. 11, n. 1, p. 155-166, 2016

## CAPÍTULO 2

# DESAFIOS NA PRODUÇÃO E AJUSTE NA FORMULAÇÃO DE PERFUME SÓLIDO ARTESANAL

---

Data de submissão: 09/10/2024

Data de aceite: 01/11/2024

### **Luana Dias da Silva**

Universidade do Estado do Rio de Janeiro  
Rio de Janeiro - RJ  
[http://https://l1nq.com/nRvEy](https://l1nq.com/nRvEy)

### **Anatalia Kutianski Gonzalez Vieira**

Universidade do Estado do Rio de Janeiro, Instituto de Aplicação Fernando Rodrigues da Silveira, Departamento de Ciências da Natureza.  
Rio de Janeiro - RJ  
<https://bitlyli.cc/tRS>

### **Barbra Candice Southern**

Universidade do Estado do Rio de Janeiro, Instituto de Aplicação Fernando Rodrigues da Silveira, Departamento de Ciências da Natureza.  
Rio de Janeiro - RJ  
<https://bitlyli.cc/lhP>

### **Elizabeth Teixeira de Souza**

Universidade do Estado do Rio de Janeiro, Instituto de Aplicação Fernando Rodrigues da Silveira, Departamento de Ciências da Natureza.  
Rio de Janeiro - RJ  
<https://bitlyli.cc/uwD>

### **Tiago Savignon Cardoso Machado**

Universidade do Estado do Rio de Janeiro, Instituto de Aplicação Fernando Rodrigues da Silveira, Departamento de Ciências da Natureza.  
Rio de Janeiro - RJ  
<https://bitlyli.cc/Gup>

### **Waldiney Cavalcante de Mello**

Universidade do Estado do Rio de Janeiro, Instituto de Aplicação Fernando Rodrigues da Silveira, Departamento de Ciências da Natureza.  
Rio de Janeiro - RJ  
<https://bitlyli.cc/bqt>

**RESUMO:** Perfumes são os cosméticos mais simples e replicados ao redor do mundo, mas quando se altera o estado físico convencional, é evidente que sua qualidade sofre impactos. Quando produzidos por métodos artesanais, esses impactos são maximizados comprometendo a qualidade do produto final. Partindo dessa premissa, esse trabalho objetiva propor o roteiro para produção de um perfume sólido feito com instrumentos artesanais e qualidade, em aspecto qualitativo, aceitáveis quando analisada sua intensidade odorifera e tempo

de projeção.

**PALAVRAS-CHAVE:** Cosméticos; Perfume sólido; Química; Método artesanal; Sistema aberto

## CHALLENGES TO CREATE AND ADAPT SOLID PERFUME FORMULATION HANDCRAFT

**ABSTRACT:** Perfumes are the most simple cosmetics made around the world, but when its conventional physical state changed is notorious the impact on its quality and produce. When used handcraft method, these impacts are maximized compromising the quality of the desired final product. From this premise, this research work objective is to propose a script to create using handcraft instruments a solid perfume with acceptable quality analyzing their odor, intensity and projection time about point of view qualitative chemistry.

**KEYWORDS:** Cosmetics; Solid perfume; Chemistry; Handcraft; Open system

### 1 | INTRODUÇÃO

Perfumes são misturas de substâncias naturais ou sintéticas que desprendem aromas e têm o objetivo de camuflar os odores corporais. Esse nome é derivado da palavra em latim “per fumum” que significa: pela fumaça. Os primeiros relatos sobre a existência do perfume datam do ano 3.000 a.C em Kemet, região nordeste do continente Africano, atualmente território conhecido como Egito (Perfumaria Phebo).

Membros da realeza dessa monarquia teocrática utilizavam óleos perfumados produzidos pelo processo de enfleurage de flores, ervas e madeiras maceradas com um óleo ou gordura animal para manutenção higiênica de seus corpos. Incensos eram usados em rituais religiosos pois os sacerdotes acreditavam que as fumaças aromáticas ajudariam os pedidos a chegarem mais rápido aos Deuses (Fernandes, S/D). Olíbano, uma resina de aroma amadeirado; Mirra, resina extraída de uma árvore e o Kapet, traduzido do grego é conhecido como preparo de Kyphi, uma mistura de vinho, mel, passas, 16 ervas medicinais e resina, eram os principais incensos queimados nos três momentos sagrados do dia: manhã, meio dia e noite (A. Daina, Blog a louca dos perfumes). O kyphi por se tratar de uma mistura de muitas ervas era utilizado como medicina para a pele. Plutarco, 46 d.C a 120 d.C observa que a mistura foi usada como “uma poção e uma pomada”. Esse medicamento recebia o nome de unguento, que era entendido como uma pomada ou perfume sólido.

Por essa razão, o preparo de kyphi pode ser considerado o primeiro perfume sólido registrado na história. Observe a imagem do kyphi comercializado na atualidade.



Imagen 1. Preparo de kyphi utilizado como incenso nos anos 2024.

Fonte: <https://www.perfumesnaturaisecia.com.br/produtos/kyphi-perfume-natural-incenso/>

A produção de cosméticos é historicamente registrada desde 400 a.C através de métodos artesanais (BETAEQ, 2019). No século XXI, tratando de perfumes sólidos artesanais propostas de produção são existentes, entretanto ao reproduzi-las inconsistências que comprometam a qualidade aromática ligadas às matérias primas utilizadas bem como o método de fabricação empregado foram percebidas.

Amenizar esses efeitos indesejáveis baseando-se em aspectos químicos através de método artesanal é a proposta deste artigo. Todos os testes foram realizados no laboratório de química do Instituto de aplicação Fernando Roberto da Silveira –CAP UERJ.

## 2 | A ARQUITETURA DO PERFUME

Um perfume líquido necessita basicamente de aroma, projeção e fixação compondo a estrutura física do perfume. Substâncias como álcool vegetal, essências, propilenoglicol e água destilada são utilizadas com essa finalidade. (M.D. Sandra et al. Perfumes, uma química inesquecível, p. 4). A parte aromática é a principal característica do perfume e os aromas podem ser de origem natural ou sintética. O natural é extraído dos óleos essenciais que possuem propriedades organolépticas. Óleos essenciais são fluidos extraídos das plantas formados por misturas complexas de terpenos, terpenos oxigenados, sesquiterpenos e sesquiterpenos oxigenados. Também podem conter pequenas quantidades de diterpenos e outros componentes em função da planta aromática (Serafini et al., 2001). Óleos essenciais podem ser compostos por até mais de 30 componentes para gerá-lo. (GUIMARÃES, et al., 2000). Os aromas sintéticos são cópias dos óleos essenciais recriados em laboratório através de sínteses orgânicas. A grande maioria das fragrâncias sintéticas possuem em suas estruturas substâncias orgânicas como o álcool, éter, aldeído, cetonas, etc. (DIAS, SILVA, 1996)

Essas funções orgânicas presentes nas moléculas sintéticas são ligadas a um

anel aromático que tornam essas moléculas voláteis. Cada molécula aromática tem sua identidade e cheiro específico e a extração de fragrâncias oriundas de plantas ocorre, por prensagem, maceração, extração com solventes voláteis, enfleurage ou através de destilação por arraste a vapor que é um método eficiente e de baixo custo (GUIMARÃES; OLIVEIRA; ABREU, 2000).

Para moléculas sintéticas a obtenção acontece através de sínteses laboratoriais que imitam as moléculas naturais. Os óleos essenciais naturais ou sintéticos de modo geral são classificados com terpenos, definidos como “alcenos naturais”, isto é, apresentam uma dupla ligação carbono-carbono sendo caracterizado como um hidrocarboneto insaturado (Mc Murry, 2011).

A composição singular aromática de um perfume é obtida pela combinação de diferentes concentrações de fragrâncias de origem diversificada como aromas de notas florais, notas orientais, notas amadeiradas e notas chipres (refrescantes), etc., e dentro dessas notas acontece outra divisão que define como e quais serão as notas de cabeça, coração e fundo. (DOVE, 2008). Estas notas, são escolhidas em detrimento de seu tempo de percepção do aroma. A nota superior é a parte mais volátil do perfume e por isso é possível detectá-la nos primeiros 15 minutos de evaporação, a nota intermediária leva de 3 a 4 horas para ser percebida e a nota de fundo é a parte menos volátil e leva de 4 a 5 horas para ser percebida. As fragrâncias presentes na nota de fundo são também denominadas fixadores do perfume (DIAS & SILVA, 1996).

O peso molecular, bem como o tipo de força intermolecular existente nessas moléculas impactam diretamente na sua velocidade de evaporação. Moléculas com ligações de hidrogênio em sua fórmula estrutural necessitam absorver mais calor para que elas mudem de estado físico em comparação às que só fazem ligação dipolo-induzido. (Atkins e Jones, 2012)

Observe o quadro 1 a distribuição aromática que constitui a chamada pirâmide olfativa. Veja.



Imagem 2. Pirâmide olfativa com indicadores dos tipos de essências existentes no mercado.

Fonte: Autor

A projeção dos perfumes está relacionada ao limite da distância que a fragrância alcança e à intensidade do cheiro. Ao longo do tempo, os componentes que formam a fragrância evaporam. Por isso, a projeção sempre será maior no exato momento em que o produto é exposto no ambiente (Granado Pharmácias). Álcoois são compostos orgânicos que apresentam um grupo hidroxila na cadeia carbônica. Suas forças intermoleculares são mais fracas que a água, fazendo com que essas moléculas migrem do estado líquido para o vapor mais rapidamente (Mc Murry, 2011). Assim, álcool vegetal com concentração p/v de no mínimo 92% seria a concentração mínima indicada para que as moléculas evaporem. Essas moléculas alcoólicas têm maior parte apolar devido a ligação covalentemente C-C e C-H, com isso interagem parcialmente com a parte também apolar, dos óleos essenciais ajudando a espalhar no ar o cheiro da essência.

O último componente da estrutura física do perfume é uma nota aromática, vulgarmente chamada de fixador. Devido a fatores ambientais envolvendo a extração dessa nota a partir de matéria prima animal, ela está sendo produzida de forma sintética e tem nome de Musk 50, musk e fixador galaxolide, almíscar. Esse trata-se de um éter aromático de alto peso molecular 268,27g.mol-1 e 258,40g.mol-1 (NIST Livro de Química na Web , SRD 69). Em função disso, e devido ao seu caráter lipofílico, que possibilita a realização de ligações dipolo induzido com o óleo essencial, ele favorece o prolongamento da essência na pele.

Substância fixadora de perfume não existe. O perfume é composto somente por água, álcool e essência, afirma Cesar Veiga, perfumista a 26 anos no mercado brasileiro e atual coordenador do núcleo de avaliação de fragrância do grupo O Boticário. A confusão quanto a nomenclatura possivelmente está associada ao nome da molécula “fixador”, porém na perfumaria entende-se que substâncias fixadoras não existam e sim uma nota aromática neutra e sem odor, de peso molecular maior que notas olfativas e que tenha boa adsorção na pele.

Perfume é um nome coloquial usado para soluções odoríferas, mas dependendo do tempo de duração da essência na pele e concentração dessas essências na mistura perfumada ela terá classificação específica. Observe, na tabela 1, as classificações quanto à concentração e tempo de duração das águas perfumadas.

Título	Concentração (%/V)	Duração Máxima (horas)
Água de Colônia	3 a 5	3
Eua de Toilette	6 a 8	8
Eua de Parfum	11 a 15	12

Tabela 1. Classificação do perfume e tabela de concentrações.

## **Perfumes sólidos**

Seguindo basicamente a arquitetura de um perfume tradicional, não contém álcool vegetal atuante na projeção. Isso se deve ao seu meio de produção que envolve calor e pode inflamar a mistura acarretando em volatização da essência ou acidentes.

Após o estado pandêmico que assolou o planeta Terra nos anos de 2020 a 2022, muitas famílias que precisavam complementar sua renda encontraram na cosmetologia artesanal, que era a principal forma de produção cosmética antes da revolução industrial, uma válvula de escape dada a facilidade de acesso aos materiais e simplicidade na fabricação dos cosméticos.

Perfumes sólidos artesanais tem ganhado espaço no mercado brasileiro já que para os fabricantes eles mostram-se como um interessante investimento pois caso se fragmentem ainda podem ser usados; têm durabilidade relativamente longa por quantidade pequena; necessitam de menos matéria prima e sua produção e uso são quase instantâneos em comparação a versão líquida que demora no mínimo sete dias macerando até sua finalização.

A apresentação desse tipo de perfume só depende da forma sólida, proporcionada por ceras e o aroma, que advém de óleos essenciais ou essências oleosas extremamente concentradas, uma vez que sua projeção e volatização só dependem da temperatura corporal. Nesse contexto, a escolha das matérias primas é fundamental e fatores como baixo ponto de fusão das ceras, natureza e alta concentração das essências além do peso molecular e tipo de interação intermolecular que desempenham as notas aromáticas, tanto de saída quanto de fundo, precisam ser cuidadosamente analisados.

## **3 I COMPONENTES**

### **Ceras:**

Cientificamente classificadas como ésteres orgânicos, são o produto da reação de um ácido graxo, saturado ou insaturado, e um álcool, ambos de cadeia longa. São apolares, por tanto não se misturam à água. O ponto de fusão é um tema que demanda muita atenção na escolha da cera. Para o perfume sólido proposto a cera necessita ter o menor ponto de fusão possível para que ao entrar em contato com a essência, a cera quente produza a menor perda de voláteis possível, visto que a produção ocorre em sistema aberto, feito artesanalmente.

### **Essência oleosa de jasmim:**

A fim de atender o critério de projeção no perfume que não possui álcool, concentração da essência é palavra chave. Sua origem sendo sintética ou não necessita de moléculas que possam ser projetadas a uma temperatura de  $\pm 36^{\circ}\text{C}$  que é a do corpo humano de forma lenta. Atendendo a necessidade de duração topo da pirâmide olfativa

são inadequadas para a produção em sistema aberto e aplicação de calor, visto que as moléculas componentes desse grupo tem baixo peso molecular (< 160,0 g.mol<sup>-1</sup>).

Jasmim é uma planta que se subdivide em mais de 200 espécies entre arbustos e trepadeiras. *Jasminum officinalis*, popularmente conhecido como jasmim branco, é uma espécie com grande intensidade aromática muito empregada em perfumes ao redor do mundo. O óleo essencial de jasmim é composto pelo ácido jasmônico (jasmonatos) que são moléculas sinalizadoras atuantes na defesa da planta lesionada. O metil jasmonato e a cis-jamona, são dois derivados do ácido jasmônico sendo a cis-jasmina a molécula aromática responsável pelo odor. Esta é a molécula recriada em laboratório para produção de essências sintéticas.

O cis-Jasmone é um dos jasmonatos formado a partir de três ciclos de β-oxidação e descarboxilação do ácido jasmônico, e conhecido por ser altamente volátil quando comparado com o ácido jasmônico e metil jasmonato, sendo empregado na indústria de perfumes e isolado primeiramente de flores de Jasminun rincospernurn (KOCH et al., 1997; HORBOWICZ et al., 2009).

A molécula de cis-jamona não apresenta ligação de hidrogênio em sua estrutura, por isso espera-se que ela volatize rapidamente. Entretanto sua massa molar de 164,25 g.mol<sup>-1</sup> e ponto de fulgor ou flash point do inglês que é uma propriedade óleos que pode ser compreendida como o quanto um óleo inflama a uma determinada temperatura, de aproximadamente 121°C, fazem com que a cis-jamona seja uma escolha promissora no quesito baixa perda de moléculas, alta projeção e moderada fixação para a composição de um perfume sólido por sistema aberto. Observe.



Imagen 3. Flor de *Jasminum officinalis* – Jasmim branco.

Fonte: <https://xeraplants.com/plants/jasminum-officinale-affin>

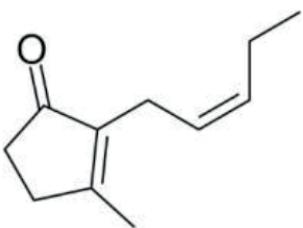


Imagen 4. Molécula de cis-jasmona.

Fonte: <https://www.medchemexpress.com/cis-jasmone.html>

## Glicerina

É um álcool orgânico de nome glicerol ou propano -1,2,3-triol. Tem aparência incolor, e é inodora. Possui propriedades hidratante, emoliente, lubrificante e umectante sendo componente comum em cosméticos. Sua massa molar é de 92,1 g/mol , 2,8 vezes menor que a do fixador galaxolide que é 258,4 g/mol. Sua aplicação no perfume sólido influencia na transferência de calor cedida pela pele favorecendo a projeção do aroma da essência.

Uma característica da glicerina é sua capacidade de absorver água. Tratando-se de um perfume que tem aspecto hidrofóbico constantemente é aplicado na pele, essa propriedade torna-se indesejada, uma vez que pode acarretar prurido e consequentemente lesões a partir da desidratação cutânea causada pelo contato da pele e a glicerina pura. Com o intuito de contornar esse efeito, o uso de extrato glicerinado é uma alternativa viável já que a mistura é composta por 6% de água.

## Manteigas

Gorduras são substâncias que a temperatura ambiente apresentam estado físico sólido e se fundem a partir de 30°C. Dependendo da origem da gordura, assim como as ceras, ela pode ser classificada como vegetal ou animal.

Óleos e gorduras são tipos de triglicerídeos derivados da reação entre 3 moléculas de ácidos graxos (ác. carboxílico) e 1 molécula de glicerol ou triol, pertencente à função orgânica álcool. Diferentes características físico-químicas se devem à ausência de ligações do tipo pii na molécula dos óleos e presença da mesma na cadeia carbônica das gorduras. Veja.

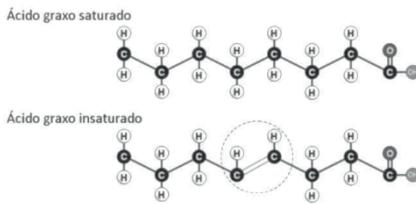


Imagen 5. Fórmula bastão de um óleo(1) e uma manteiga(2).

Fonte: <http://nutrologiariodejaneiro.com.br/blog/gordura-boa- ou-gordura-ruim-voce-sabe-a-diferenca/>

No perfume sólido, ela atua proporcionando maleabilidade no espalhamento do material sob a pele e derretendo lentamente a cera através da troca lenta de calor com intuito de equilibrar o controle da temperatura. O emprego de manteiga vegetal ao invés de óleo está diretamente ligada ao estado físico em que a substância se apresente. Enquanto os óleos são líquidos a 25°C a mesma temperatura as manteigas são sólidas o que auxilia no endurecimento da cera e impedimento da formação de óleo residual indesejado. A escolha da manteiga obedece a regra inversa da cera, necessita ser a de maior temperatura de fusão em °C, para que cumpra sua finalidade no processo. Nesse contexto, a manteiga de ucuuba apresentou melhor desempenho em relação às testadas com mostra a tabela 2.

Nome	Ponto de Fusão (°C) / atm
Manteiga de abacate	34 a 38
Manteiga de cacau	33 a 35
Manteiga de karité	34 a 38
Manteiga de ucuuba	42

Tabela 2. Relação Manteigas e seus pontos de fusão.

O perfume sólido produzido iniciou-se a partir de roteiros científicos que utilizaram a metodologia artesanal que possibilita acesso e reprodução da população comum, porém durante a reprodução dos mesmos, inconsistências que comprometem a qualidade perfumística do preparo foram repetidamente encontradas. Outro desafio foi o emprego do método artesanal e produção de sistema aberto. Partindo dessas circunstâncias, a fórmula aqui criada bem como escolha das matérias-primas visa corrigir essas alterações e produzir um perfume sólido com qualidade aromática boa o suficiente para ser titulado, perfume.

## 4 | MATERIAL E MÉTODOLOGIA

Respeitando as indicações da Anvisa e OMS, a elaboração do perfume sólido necessita de 32 g de cera de abelha branca, 32 g manteiga de ucuuba, 40,32 g de extrato glicerinado de jasmim (aprox. 32 mL), 70 ml de essência oleosa concentrada, vitamina E, termômetro, panela de alumínio, palito de churrasco, folha de papel, 2 beckers de 50 ml, 1

proveta graduada de 50ml, fonte de aquecimento, recipiente para evasê e balança com 1 casa decimal mínima. A produção necessita de atenção e controle rigoroso de temperatura para que essa não superaqueça e acelere a volatização rápida da essência diminuindo sua concentração e comprometendo a qualidade do produto final.

Primeiramente em um dos beckers coloque com auxílio da proveta 23 mL da essência, tape-o com papel e reserve o material. No outro becker utilizando a mesma proveta prepare uma mistura de 48 mL de essência concentrada mais 32 ml de extrato glicerinado e 4 gotas de vitamina E. Tape o bêcher com um papel dobrado e reserve-o. Com a balança ligada, coloque a panela e lave-a. Adicione as 32g de manteiga de ucuuba e 32 g da cera de abelha. Pegue o termômetro, ligue a fonte de calor em baixa temperatura e ponha a panela sobre ela. A partir dessa etapa afira a temperatura constantemente para que a mesma não esteja inferior a 52°C e não ultrapasse os 55°C. Caso essa última hipótese ocorra, desligue a fonte de calor e espere que a temperatura do conteúdo da panela diminua. Pegue o palito e homogenize o bêcher com a mistura de extrato, essência e vitamina E. Afira a temperatura do conteúdo da panela para que esteja superior a 52°C e com até 55°C máximos, despeje a mistura lá e mexa o conteúdo com o palito. Haverá a formação de um sólido que logo irá se dissolver. Caso isso não ocorra, aqueça o perfume levemente. Em seguida, em temperatura próxima a 55°C adicione os 23 ml restantes de essência, homogeneize a mistura da panela e a verta dentro das embalagens. Espere solidificar, faça uma pequena raspagem do perfume com a unha em movimento de trás para frente e aplique o conteúdo nos pulsos, nuca, atrás da orelha e pescoço. Veja as imagens.



a



b



c



d



e

Imagen 6. Etapas de fabricação do perfume no laboratório. a) Aferição da temperatura dos componentes em aquecimento. b) Mistura de extrato glicerinado, essência e vitamina E. c) Solidificação da essência fria ao entrar em contato com a essência. d) Perfume liquefeito após aquecimento moderado, até 55°C. e) Perfume sólido finalizado.

## 5 | RESULTADOS E DISCUSSÃO

Durante as fases de teste feitos em laboratório algumas considerações necessitam de atenção

1. A confecção do perfume é feita em sistema aberto é um grande desafio, logo possui uma perda associada das moléculas aromáticas devido emprego de calor durante sua produção e reaquecimento para homogeneização do perfume que tende a se solidificar rapidamente visto que sua síntese ocorre em temperaturas próximas ao ponto de fusão da cera, em torno de 54°C a 56°C que Por essa razão, o reaquecimento contribui negativamente para a intensidade aromática do perfume traduzindo-se em seu tempo de duração.

2. O método de fabricação presente demanda que a intensidade da essência seja a maior possível. Testes submetendo-as em contato com a cera de abelha branca a aproximadamente  $\pm 54^{\circ}\text{C}$  e 1atm resultaram no quadro 1; essências de moléculas com massa igual ou superior a 160 g.mol<sup>-1</sup> continuaram presentes e com intensidade e projeção por um tempo de 2 horas mínimas após a solidificação da cera; e moléculas de essências com massa maior ou próximas a 200g.mol<sup>-1</sup> não apresentaram projeção moderada perceptível pelo usuário ficando mais rente a pele. Logo compreende-se que o intervalo de massa das essências para que haja projeção e fixação por um intervalo de 2 horas mínimas varia entre 160 g.mol<sup>-1</sup> a 190 g.mol<sup>-1</sup>, sendo moléculas com massas acima desse valor interessantes para a composição de uma pirâmide olfativa.

Aromas	Óleo Essencial	Molécula aromática	Massa Molar (g/mol)
Canforado	Eucalipto	Eucaliptol	154,25
	Melaleuca	Terpien-4-ol	154,25
Herbáceo	Tomilho	Timol	150,22
	Lavanda	Linalol	154,25
Citricos/ Frutais	Limão	Limoneno	136,24
	Laranja	D-limoneno	156,27
Florais	Jasmim	Cis-jasmona	164,25
	Bergamota	Bergapteno	216,00
	Lírio	Lycorine	287,32
Amadeirada	Canela	Cinamaldeído	132,16
	Cravo da Índia	Eugenol	164,20
	Sâdalo	$\alpha$ -Santalol	220,36

Quadro 1. Massa molar dos óleos essenciais analisados

3. Não houve teste de evolução aromática dada pela pirâmide olfativa neste perfume, Isso devido a produção ser feita em sistema aberto havendo uma perda associada considerável.

4. O custo de matérias primas total envolvido na produção do perfume foi de R\$

129,95 ( cento e vinte e nove reais e noventa e cinco centavos) sendo o local de compra de materiais mais barato sites de venda online.

Observe os valores da última consulta feita em 03 de abril de 2024 no quadro 2.

Produto	Quantidade	Valor (R\$)	Local de compra
Cera de Abelha Branca	100 g	25,00	Loja online: App Shopee
Glicerina bi-destilada	1000 g	24,00	
Essência de Jasmim	100 g	29,99	
Manteiga de Ucuuba	100 g	50,96	Destilaria Bauru

Quadro 2 . Relação de valores e quantidades dos principais produtos comprados

5. O rendimento do perfume é de 200 g, onde 5 gramas, de uso diário dura no mínimo 1 mês. Fracionando mais, o perfume pode gerar 40 unidades de 5g cada. Fica destacado também que essa fórmula garante uma projeção moderada da essência de duas horas mínimas.

6. Outra análise importante característica desse perfume é que ele por não utilizar álcool e o caráter umectante da glicerina ser controlado uso de extrato glicerinado, ele não causa ressecamento cutâneo, o que ocorre em perfumes líquidos de forma recorrente.

## 6 | CONCLUSÃO

Considerando que o perfume criado não possui álcool em sua composição que consequentemente auxiliaria na projeção, o mesmo apresentou desempenho e qualidade mínimas de duas horas de projeção, podendo sim reconhecido como perfume. E apesar da limitação sistêmica que impacta significativamente na intensidade e duração do cheiro, o método artesanal conseguiu contornar esse problema através de conceitos químicos científicos empregados.

## AGRADECIMENTOS

Agradeço os professores orientadores pelas considerações agregadas ao trabalho, a Elizabeth Teixeira de Souza, orientadora do projeto de Prodocência - Cosmetologia Criativa, e ao órgão de fomento, CETREINA – UERJ/Maracanã, pela oportunidade a mim concedida de integrar a equipe do projeto.

## REFERÊNCIAS

ALTMANN, I. et. al. Desenvolvimento e caracterização de filmes biodegradáveis obtidos a partir de amido de milho: uma proposta experimental de produção de biofilmes em sala de aula: Desenvolvimento e Caracterização de Filmes Biodegradáveis. Quím. nova esc. – São Paulo-SP, BR, 2017. Disponível em: <[http://qnesc.sqb.org.br/online/qnesc40\\_1/09-EEQ-81-16.pdf](http://qnesc.sqb.org.br/online/qnesc40_1/09-EEQ-81-16.pdf)>. Acesso em: 03 abr. 2024>.

DE OLIVEIRA HENTGES, Laura et al. MODELAGEM TERMODIN MICA DO PONTO DE FULGOR DE MISTURAS DE BIOCOMBUSTÍVEIS E HIDROCARBONETOS1. 31 SIC UDESC, [s. l.], [20-?]. Disponível em: <[https://www.udesc.br/arquivos/udesc/id\\_cpmenu/14608/Laura\\_Hentges\\_1634148025601\\_14608.pdf](https://www.udesc.br/arquivos/udesc/id_cpmenu/14608/Laura_Hentges_1634148025601_14608.pdf)>. Acesso em: 13 maio 2024.

DZWOLAK, G. S. S. et. al. Abordando perfumes como um tema motivador para o ensino de Química. Química e Tecnologia: Avanços que moldam o mundo contemporâneo. Ponta Grossa-PR: Atena, 2023. p. 53-63.

ESSÊNCIA e Perfume: Painel. [S. I.]: Fundação Oswaldo Cruz - Fiocruz, 28 abr. 2008. Disponível em:<[https://www.oswaldocruz.br/sesq/painel.asp?id\\_painel=169#:~:text=O%20nome%20perfume%20deriva%20do,Jesus%20com%20incenso%20e%20mirra](https://www.oswaldocruz.br/sesq/painel.asp?id_painel=169#:~:text=O%20nome%20perfume%20deriva%20do,Jesus%20com%20incenso%20e%20mirra)>. Acesso em: 8 out. 2023>.

F. DE CASTRO, Profa. Heizir. ÓLEOS E GORDURAS. In: ÓLEOS E GORDURAS: Processos Químicos Industriais II - Apostila 5. [S. I.], 2014. Disponível em: <https://sistemas.eel.usp.br/docentes/arquivos/5840855/LOQ4023/Apostila5TecnologiadeoleoseGorduras.pdf>. Acesso em: 13 maio 2024.

FRANCO, R. ; CARVALHO, Y. Módulo perfumes: Perfumes sólidos. Cosmetologia do bem: E-book online, 2016. p 20.

M. DIAS, Sandra; R. DA SILVA, Roberto. PERFUMES - Uma química inesquecível: QUÍMICA E SOCIEDADE. Química Nova na Escola, [s. l.], ed. 4, 1996. Disponível em: <<http://qnesc.sqb.org.br/online/qnesc04/quimsoc.pdf>>. Acesso em: 8 out. 2023>.

McMURRY, J., Química Orgânica vol. 1 e vol. 2. Editora CENGAGE Learning. Tradução da 6<sup>a</sup> Edição Norte Americana, 2008KOTZ, John C.; TREICHEL

O, Lorena; L. BICAS, Felipe; L. BICAS, Juliano. Terpenos, aromas e a química dos compostos naturais. Quím. nova esc., São Paulo - SP, BR, v. 39, p. 120-130, 1 maio 2016. Disponível em: <[http://qnesc.sqb.org.br/online/qnesc39\\_2/04-QS-09-16.pdf](http://qnesc.sqb.org.br/online/qnesc39_2/04-QS-09-16.pdf)>. Acesso em: 2 mar. 2023>

## CAPÍTULO 3

# SÍNTESE E CARACTERIZAÇÃO DO ÓXIDO DE GRAFENO POR VIA QUÍMICA PARA PRODUÇÃO DE NANOCOMPÓSITOS DE POLIETILENO TEREFATALATO

Data de submissão: 23/09/2024

Data de aceite: 01/11/2024

### Brenno Lavigne Diniz

Mestrando em Engenharia de Materiais.  
IFBA. R. Emídio dos Santos, s/n -  
Barbalho, Salvador - BA.

### Ticiana de Oliveira Santiago

Graduanda em Engenharia Química.  
IFBA. R. Emídio dos Santos, s/n -  
Barbalho, Salvador - BA.

### Luiz Antonio Pimentel Cavalcanti

Doutor em Engenharia Química. UFPE.  
R. Emídio dos Santos, s/n - Barbalho,  
Salvador - BA.

### Ivan Costa da Silva

Doutor em Engenharia Metalúrgica e de  
Materiais. UFRJ. R. Emídio dos Santos,  
s/n - Barbalho, Salvador - BA.

### Cláudia Teresa Teles Farias

Doutora em Engenharia Metalúrgica e de  
Materiais. UFRJ. R. Emídio dos Santos,  
s/n - Barbalho, Salvador - BA.

infravermelho (FTIR), calorimetria diferencial exploratória (DSC) e microscopia eletrônica de varredura (MEV), comprovando a presença dos grupos funcionais típicos do material, bem como a temperatura onde ocorre a perda do oxigênio lável. Posteriormente, nanocompósitos de polietileno tereftalato (PET) com diferentes teores de OG (200 a 500 ppm) foram preparados por extrusão em uma extrusora dupla-rosca. Os nanocompósitos foram analisados por MEV, revelando uma boa dispersão do OG na matriz polimérica. Observou-se, também, que o aumento no teor de OG resultou em uma morfologia mais granulada, com corrugações características de compósitos intercalados.

**PALAVRAS-CHAVE:** Óxido de grafeno; polietileno tereftalato; nanocompósitos; morfologia

## 1 | INTRODUÇÃO

A partir da segunda metade do século XX, a economia global testemunhou uma expansão vertiginosa na produção e consumo de itens fabricados com materiais poliméricos, com especial destaque para os plásticos. Tamanha se tornou

**RESUMO?** O presente trabalho versa sobre a síntese e caracterização do óxido de grafeno (OG) utilizando o método de Hummers modificado. A caracterização do OG foi realizada por espectroscopia no

a importância dessa classe de materiais que seu consumo *per capita* tem sido um dos indicadores utilizados para mensurar o grau de desenvolvimento econômico dos países (Canevarolo Jr., 2013), posto que o consumo de plástico é mais difundido nos países desenvolvidos devido ao maior poder aquisitivo de suas populações, que possuem amplo acesso a bens e serviços em geral.

Dentre os materiais plásticos com aplicações de engenharia, destacam-se os poliésteres, polímeros que possuem uma estrutura química que lhes confere uma combinação útil de flexibilidade e rigidez (Wiebeck; Harada, 2005). O polietileno tereftalato (PET) é um poliéster amplamente difundido na fabricação de embalagens de bebidas devido às suas notáveis propriedades em termos de resistência mecânica, rigidez, barreira contra gases e flexibilidade de uso.

De acordo com um estudo de 2022 da OCDE, espera-se um crescimento de 89% no mercado de PET de 2023, estimado em 48,43 bilhões de dólares, a 2030, projetado para a marca de 91,37 bilhões de dólares (OECD, 2022). Essa expansão é motivada, especialmente, pelo desenvolvimento de pesquisas em soluções inovadoras na produção de polímeros, bem como pelo crescimento da indústria de reciclagem de PET, conforme reportado pela Fortune Business Insights (2024). Tal preocupação com a redução dos impactos ambientais do PET possui origens históricas no advento do ESG (sigla em inglês para Ambiental, Social e Governança), fruto do crescente senso de urgência da comunidade internacional acerca da necessidade de se combater o aquecimento global, provocado principalmente pela emissão de gases de efeito estufa oriundos da queima de combustíveis fósseis. Nesse contexto, a produção de termoplásticos é central na problemática do esgotamento desses recursos não renováveis, posto que cerca de 99% de toda resina plástica virgem produzida no mundo provém de reservas de combustíveis fósseis, o que representa 8% do consumo global da cadeia de óleo e gás (Heller; Mazor; Keoleian, 2020).

Os materiais plásticos possuem uma elevada relação desempenho/peso quando comparados com outros materiais, e, de acordo com o Center for Sustainable Systems (2023), o aprimoramento dessa performance pode contribuir para amenizar os impactos negativos ao meio ambiente que estão associados à sua disposição final, à medida em que se torna possível a produção de itens de consumo com desempenho igual ou superior aos já existentes utilizando menores quantidades de plástico. Nesse sentido, a pesquisa e desenvolvimento de novos plásticos e compósitos que apresentem melhores propriedades por unidade de massa em relação aos polímeros comuns viabiliza o barateamento da fabricação de bens e artigos de consumo e propicia o desenvolvimento de uma cadeia produtiva mais amigável ao meio ambiente. Uma das maneiras pelas quais as propriedades dos plásticos podem ser aprimoradas é através da incorporação de materiais baseados em nanotecnologia, como o grafeno e seus derivados, na fabricação de estruturas poliméricas aditivadas (nanocompósitos) que possuam melhores propriedades físicas, segurança e eficiência, o que propicia significativos ganhos econômicos e ambientais (Silvestre;

Duraccio; Cimmino, 2011).

O óxido de grafeno (OG) tem ganhado destaque como um dos mais promissores dentre os materiais nanoestruturados pesquisados nas últimas décadas, devido especialmente à sua capacidade de conferir melhorias nas propriedades mecânicas, térmicas e de barreira em diversos tipos de materiais compósitos. Comumente produzido por meio do tratamento químico do grafite através de oxidação com subsequente esfoliação ultrassônica (Hummers; Offeman, 1958), o OG consiste em folhas esfoliadas (não empilhadas) de óxido de grafite. Esse nanomaterial é constituído por folhas de grafeno decoradas com diversos grupos funcionais à base de oxigênio, os quais são responsáveis pela otimização das suas propriedades eletrônicas, mecânicas e eletroquímicas, tornando o material adequado para aplicações específicas (Ramakrishnan *et al.*, 2015).

A utilização do OG como aditivo em nanocompósitos poliméricos tem sido estudada intensamente nas últimas duas décadas devido à capacidade do OG em promover otimizações significativas nas características e performance, incluindo melhorias nas propriedades térmicas, dos polímeros-base. A incorporação do OG em resinas com matriz polimérica epóxi resultou em ganhos na estabilidade térmica do material, evidenciada através do aumento da temperatura de decomposição térmica, além de promover elevação da condutividade térmica (Dandapani; Devendra, 2022; Vaschuk *et al.*, 2023). A incorporação do OG funcionalizado com ácido 4-hidroxibenzoico para utilização em compósitos de polímeros cristalinos líquidos resultou em aumento da estabilidade térmica, com elevações nas temperaturas de transição vítreia e fusão cristalina do polímero (Bohra *et al.*, 2022). Esses resultados demonstram o impacto positivo da adição de OG nas propriedades térmicas dos nanocompósitos poliméricos, o que os indica como materiais promissores para diversas aplicações que demandam alto desempenho.

Nesse contexto, o presente trabalho objetiva realizar a síntese, purificação e esfoliação do OG através do método de Hummers modificado a partir do grafite em pó, além de conduzir sua caracterização por técnicas de espectroscopia no infravermelho, calorimetria diferencial exploratória e microscopia eletrônica de varredura, a fim de comprovar que o material obtido é, inequivocamente, óxido de grafeno. Após a obtenção e caracterização do OG, o presente trabalho busca realizar sua inserção na matriz polimérica do PET através do processo de mistura por fusão em uma extrusora dupla-rosca corrotante, a fim de avaliar como ocorre o processo de transferência do OG para a matriz polimérica do PET, além de analisar a morfologia dos nanocompósitos resultantes por meio da microscopia de varredura.

## 2 | REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

### 2.1 Cadeia de Plásticos e PET no Brasil e no Mundo

Em 2016, a média anual mundial per capita de consumo de plásticos atingiu a marca de 45 kg/habitante, havendo, entretanto, grande disparidade geográfica nesse indicador – a América do Norte apresentou o maior consumo de plástico por habitante do planeta, estimado em 139 kg/habitante, enquanto os países asiáticos, excetuando-se o Japão, o menor, por volta de 36 kg/habitante (Kittithammavong; Khanitchaidecha; Thongsanit, 2023). Conforme noticiado pela Agência Brasil (2023) a respeito do Panorama de Resíduos Sólidos no Brasil em 2022, a geração de resíduos plásticos no Brasil nesse ano superou o patamar de 13 milhões de toneladas, o que equivale a uma média anual *per capita* de 64 kg/habitante. Desse total, cerca de 10 kg/habitante é a média anual referente à parcela do consumo de embalagens flexíveis de plástico, de acordo com uma pesquisa encomendada pela Associação Brasileira da Indústria de Embalagens Plásticas Flexíveis (Abief) e noticiado pela Plásticos em Revista (2023).

Em 2018, a demanda de plásticos na Europa ultrapassou a marca de 50 milhões de toneladas, com o mercado de embalagens respondendo por aproximadamente 40% dessa quantidade total, sendo esse o setor industrial mais relevante da indústria do plástico, seguido pelas indústrias de construção civil (~20%) e automotiva (~10%), conforme reportado por Nisticò (2020). Estima-se que o consumo global de plásticos aumente de 460 milhões de toneladas em 2019 para 1,231 bilhão em 2060, havendo a perspectiva de duplicação no uso de plásticos para produção de embalagens (OECD, 2022). De acordo com essa projeção da OCDE para o período de 2019 a 2060, a quantidade de polietileno de baixa densidade (PEBD) utilizado na fabricação de embalagens deve triplicar, enquanto se estima que a demanda por polipropileno, polietileno de alta densidade e polietileno tereftalato para esse mercado mais que duplique. No gráfico da Figura 1 constam algumas estatísticas referentes à produção global de plástico segmentada por setores produtivos, com dados de 2021. Dessa produção total, mais de 240 milhões de toneladas de resíduos plásticos são geradas anualmente, das quais 40% foram destinadas para aterros e 25% foram incineradas (Soong; Sobkowicz; Xie, 2022).

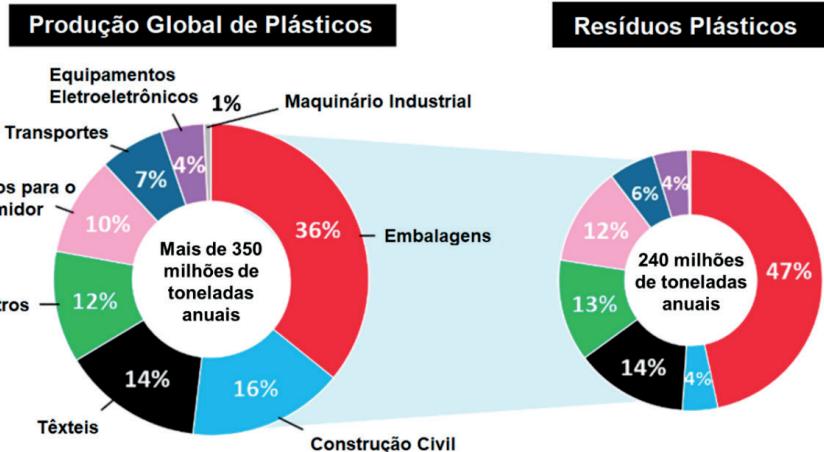


Figura 1. Produção global de plásticos e geração de resíduos segmentadas por setores produtivos. A maior parcela da produção de plásticos é utilizada em embalagens de diversos tipos.

Fonte: Adaptada de Soong, Sobkowicz, Xie (2022).

Nos últimos anos, a produção de polímeros no Brasil tem aumentado significativamente, acompanhando a crescente presença desses materiais na composição do resíduo sólido urbano – RSU (Romão; Spinacé; Paoli, 2009). Dentre os principais polímeros produzidos no país e que têm forte presença no lixo urbano, destacam-se o polietileno em suas diversas formas — alta densidade (PEAD), baixa densidade (PEBD) e baixa densidade linear (PELBD). Esses materiais são amplamente utilizados em embalagens e sacolas plásticas, compondo uma parte expressiva do RSU. Além disso, o polipropileno (PP), que também é utilizado em embalagens e produtos descartáveis, aparece com frequência no lixo doméstico. Outro polímero de grande relevância no cenário brasileiro é o policloreto de vinila (PVC), encontrado em produtos como tubulações e revestimentos. O poliestireno (PS), comumente utilizado em descartáveis e embalagens para alimentos, completa a lista dos polímeros mais presentes no resíduo urbano brasileiro (Caraschi; Leão, 2002). Por fim, o polietileno tereftalato (PET), utilizado principalmente em embalagens de bebidas, como garrafas de refrigerante, também tem uma grande contribuição tanto na produção nacional quanto na composição do lixo reciclável. Esses materiais, que têm ampla utilização na indústria e no dia a dia, representam um desafio crescente para a gestão de resíduos e reciclagem no país, devido ao seu volume, baixa degradabilidade e à dificuldade de descarte adequado.

O PET, polímero termoplástico da classe dos poliésteres, se destaca como um plástico que apresenta uma combinação de propriedades desejáveis para aplicações de engenharia, como rigidez, tenacidade, resistência a altas temperaturas, estabilidade química (Nisticò, 2020; Wiebeck; Harada, 2005), além de boas propriedades óticas e elevada

processabilidade (Majdzadeh-Ardakani *et al.*, 2017). Tais características tornam o PET um dos polímeros mais amplamente utilizados na fabricação de embalagens para alimentos, tanto na forma de resina virgem quanto reciclada. Nessa indústria, o PET é matéria-prima para a produção de embalagens de água (~26%), refrigerantes carbonatados (~26%), sucos e demais bebidas (~18%), filmes plásticos (~14%) e indústria alimentícia em geral (~9%); além disso, é utilizado na confecção de embalagens para produtos não alimentícios, como cosméticos e produtos de limpeza (~6%), conforme reportado por Nisticò (2020).

Ademais, as notáveis propriedades do PET viabilizam seu emprego em uma grande variedade de segmentos industriais, como na produção de fibras têxteis (Lepoittevin; Roger, 2011), aplicações biomédicas (Bracco *et al.*, 2005), indústria automotiva (Saricam; Okur, 2018), manufatura aditiva (Durgashyam *et al.*, 2019), dentre outros. Com o objetivo de adequar o PET para aplicações mais específicas, fabricantes de resina produzem, normalmente, copolímeros de PET (Chanda; Roy, 2008), como o PETG grau garrafa, variante do PET formada pela copolimerização convencional do etilenoglicol com ácido tereftálico, em que parte desse ácido é substituída por ácido isoftálico em um percentual de aproximadamente 2% (Canevarolo Jr., 2013).

## 2.2 Óxido de Grafeno

O grafeno, nas últimas duas décadas, tem sido um dos mais estudados dentre os nanomateriais bidimensionais. Tamanho interesse da comunidade científica se deve, sobretudo, às notáveis propriedades óticas, eletrônicas, mecânicas e eletroquímicas que o grafeno e suas derivações funcionalizadas possuem como consequência de sua peculiar morfologia e estrutura química (Lawal, 2019). O grafeno é constituído por uma monocamada plana de átomos de carbono com hibridização  $sp^2$  densamente empacotados em uma rede cristalina hexagonal, com uma estrutura que se assemelha visualmente a favos de mel. Este nanomaterial constitui a unidade elementar para a formação de outras estruturas grafíticas, como fulerenos, nanotubos de carbono e grafite convencional (Geim; Novoselov, 2007; Zhao *et al.*, 2010), conforme representado esquematicamente na Figura 2.

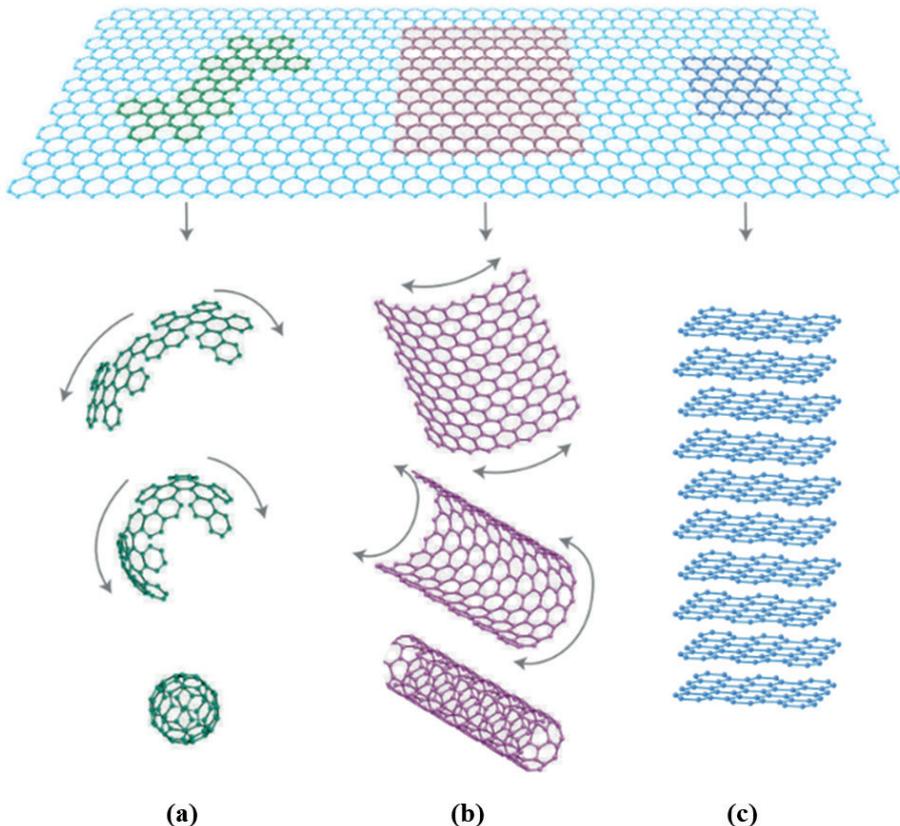


Figura 2. Grafeno e compostos grafíticos derivados: (a) Fulereno, (b), Nanotubo de carbono, (c) Grafite.

Fonte: Adaptada de Geim, Novoselov (2007).

O grafeno é o material mais fino conhecido, possuindo espessura de apenas 0,33 nm (Urade *et al.*, 2023), e apresenta notáveis propriedades que o qualificam como um material de grande interesse para aplicações tecnológicas: possui elevadas área específica ( $\sim 2.600 \text{ m}^2/\text{g}$ ) (Geim; Novoselov, 2007), condutividade térmica (3.000 – 5.000 W/mK) (Balandin *et al.*, 2008), resistência à fratura ( $\sim 130 \text{ GPa}$ ) (Lee *et al.*, 2008), mobilidade de portadores de carga ( $\sim 20 \text{ m}^2/\text{Vs}$ ) (Zhang *et al.*, 2009) e transparência óptica ( $\sim 97\%$ ) (Blake *et al.*, 2008). Além disso, possui módulo de Young da ordem de 1 TPa (Booth *et al.*, 2008), sendo um dos materiais mais resistentes conhecidos.

Os grafenos quimicamente modificados (CMGs, do inglês *chemically modified graphenes*) têm sido objeto de grande interesse prático ao longo da última década, pois podem ser obtidos com relativa facilidade e as rotas químicas utilizadas na sua produção possuem escalabilidade industrial, eficácia e custo relativamente baixo (Kaur; Kaur; Kukkar, 2018; Xing; Li; Yu, 2016). As propriedades principais que caracterizam e indicam as aplicações específicas dos diversos tipos de CMGs são:

1. Quantidade/número de camadas grafíticas;
2. Dimensão lateral média;
3. Teor de oxigênio (medido pela razão C/O em quantidade de matéria).

As diferentes categorias de CMGs atualmente conhecidas diferenciam-se entre si de acordo com cada uma das três propriedades anteriormente elencadas e possuem aplicações específicas decorrentes de sua estrutura e composição química. A Figura 3 apresenta uma visualização esquemática que diferencia alguns tipos de CMGs de acordo com os valores dessas propriedades.

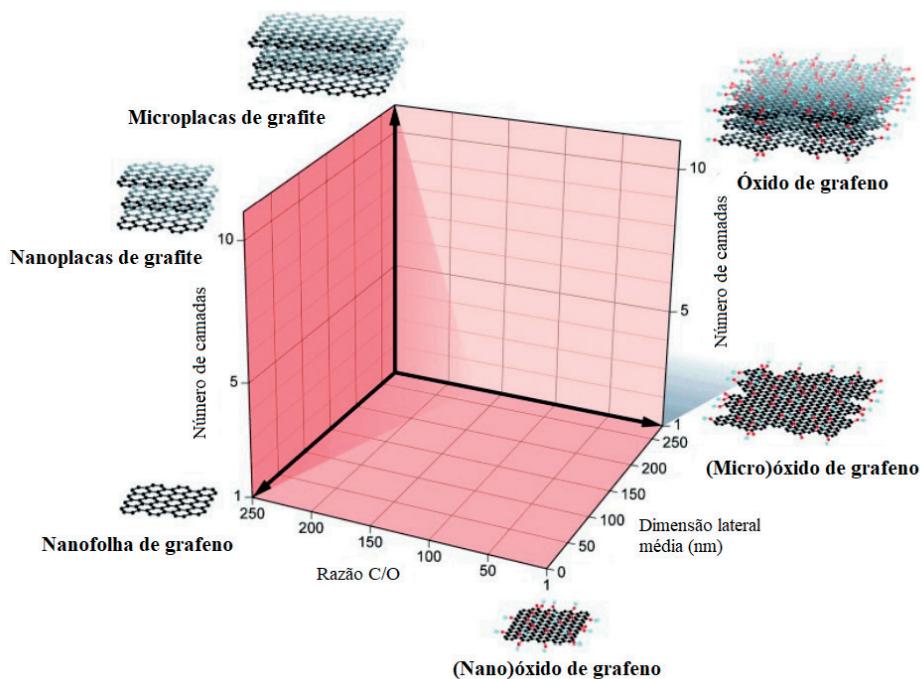


Figura 3. Classificação de diferentes tipos de CMGs a partir das principais propriedades desses nanomateriais.

Fonte: Adaptada de Wick *et al.* (2014).

Uma das variantes funcionalizadas do grafeno é o óxido de grafeno (OG), que consiste em camadas de grafeno munida de diversos grupos funcionais oxigenados, especialmente epóxidos, hidroxilas, cetonas, carboxilas e lactonas. Através da funcionalização química, o OG tem sido empregado no desenvolvimento de materiais para o setor energético, na fabricação de compósitos poliméricos, na confecção de sensores (Dreyer *et al.*, 2010) e em outras aplicações tecnológicas, a exemplo de sua utilização como adsorvente molecular (Kecili; Hussain, 2018).

Historicamente, o OG foi sintetizado antes do grafeno e os trabalhos dos séculos XIX e XX referem-se a esse material com a nomenclatura de óxido de grafite (Boehm; Stumpp, 2007; Dreyer *et al.*, 2010). Quimicamente, o OG é essencialmente óxido de grafite: o que diferencia esses materiais é a natureza da interação e empacotamento entre as camadas grafíticas. O óxido de grafite possui uma estrutura de empacotamento de camadas semelhante à do grafite, com a diferença de que o espaçamento entre elas é maior no óxido de grafite devido à interação dos grupos oxigenados com moléculas de água: a depender do teor de umidade, o espaçamento pode variar de 0,60 a 1,20 nm (Buchsteiner; Lerk; Pieper, 2006); para o grafite comum, a distância média entre as camadas é aproximadamente 0,34 nm (Lee; Kang; Roh, 2015).

O método mais comumente empregado para desagregar as camadas de óxido de grafite e promover a formação do OG por dispersão em solução aquosa é a sonicação por ultrassom (Dikin *et al.*, 2007). Este procedimento experimental, amplamente empregado na geração de OG com grande grau de esfoliação, requer alguns cuidados operacionais ao ser executado, pois, a depender da concentração do OG em solução aquosa, alguns agregados de camadas grafíticas costumam continuar presentes na solução, conforme demonstrado em ensaios de separação a taxa ultracentrífuga por gradiente de densidade (Sun *et al.*, 2010). Para contornar este problema e promover o maior grau de esfoliação possível do material, recomenda-se trabalhar dentro dos limites de dispersabilidade do OG no solvente em questão. Para a água, essa faixa de concentração situa-se entre 1 e 4 mg/mL (Si; Samulski, 2008).

### 3 | METODOLOGIA

#### 3.1 Síntese, Esfoliação e Caracterização do Óxido de Grafeno

A síntese do óxido de grafite foi conduzida pela via química, seguindo o método de Hummers modificado (Suhaimin *et al.*, 2021). Grafite em pó da marca Synth (6 g), com pureza mínima de C de 98% e máximo de 1% de cinzas, foi adicionado lentamente a um bêquer de 1 L contendo 140 mL de ácido sulfúrico ( $\text{H}_2\text{SO}_4$ ) concentrado p.a. com agitação constante por trinta minutos. O controle de temperatura do sistema foi realizado através de banho de gelo. Após esse período, foram adicionados sequencialmente nitrato de sódio ( $\text{NaNO}_3$ ) p.a. da marca Éxodo (3 g) e permanganato de potássio ( $\text{KMnO}_4$ ) p.a. (18 g). A adição dessas duas substâncias foi realizada lentamente de forma que a temperatura da mistura não excedesse 10 °C. A agitação da mistura foi mantida por uma hora. Após esse período, foram adicionados lentamente 250 mL de água destilada, ocorrendo elevação de temperatura no sistema e liberação de vapores. A temperatura do sistema atingiu 90 °C e a agitação foi mantida durante quinze minutos. A oxidação foi concluída com a adição de 30 mL de peróxido de hidrogênio ( $\text{H}_2\text{O}_2$ ) a 35% v/v com agitação durante trinta minutos,

período em que a temperatura da mistura foi mantida constante em 35 °C. O recipiente contendo a mistura foi completado com água destilada até a marca de 950 mL. A mistura sofreu sedimentação por quarenta e oito horas e o líquido sobrenadante foi retirado, completando-se a marca de 950 mL do bêquer com ácido clorídrico 5% v/v p.a. Após 96 horas, o líquido ácido sobrenadante foi retirado e substituído por água destilada, e a solução foi transferida para um bêquer de 5 L com o intuito de melhor dispersar as folhas de OG na solução e garantir remoção mais eficiente dos produtos residuais da oxidação. Foram, então, realizadas sucessivas trocas da água destilada até que o pH da solução alcançar um valor entre 4 e 5, conforme sugerido na literatura (Assis, 2020). Foi colhida uma amostra representativa (10 mL) da mistura final a fim de determinar a concentração da solução do óxido de grafite. Essa amostra foi submetida a banho ultrassônico em uma lavadora da Marca Schuster, modelo L-100, a 42 kHz por 80 minutos, e então levada a uma estufa para evaporação de toda a água presente.

A caracterização química do OG foi realizada através da identificação dos grupos funcionais presentes nas amostras com auxílio de um espectrômetro no infravermelho por transformada de Fourier (FTIR) da marca Perkin-Elmer®, modelo Spectrum Two, com números de onda na faixa de 4.000 – 400 cm<sup>-1</sup>. A caracterização térmica do OG foi realizada por calorimetria diferencial exploratória (DSC) em um equipamento Q50 TA Instruments em atmosfera de nitrogênio com fluxo de 50 mL/min com aquecimento inicial de 25 °C a 150 °C, seguido de resfriamento até 25 °C e novo aquecimento até 300 °C, com taxa de aquecimento de 20 °C/min (Pereira, 2019).

### **3.2 Preparação das Amostras de Compósito de Polietileno Tereftalato com Óxido de Grafeno**

O OG obtido em solução aquosa foi transferido para uma solução de óleo de canola como base veicular utilizando um evaporador rotativo da marca Quimis®. A resina PET copolímero grau garrafa utilizada na confecção das amostras de nanocompósito foi doada pela empresa Engepack Embalagens São Paulo S/A. Foram produzidos nanocompósitos de PET com OG em teores de 200, 300, 400 e 500 ppm em uma extrusora dupla rosca corrotante DR16:40 da marca AX Plásticos, além de uma formulação de PET extrudado sem OG. Antes da extrusão, a resina PET foi desumidificada em uma estufa a 200 °C por 1 hora (200 g de PET em cada formulação) a fim de evitar a degradação hidrolítica do polímero na extrusão.

### **3.3 Microscopia Eletrônica de Varredura (MEV)**

A microscopia eletrônica de varredura (MEV) foi realizada em um equipamento JSM-6510LV com filamento de tungstênio, a uma aceleração de 10 kV. Antes da realização de

MEV dos nanocompósitos, as superfícies das amostras peletizadas foram submetidas ao processo de metalização com ouro.

## 4 | RESULTADOS E DISCUSSÕES

O espectro no infravermelho na faixa de números de onda de 4.000 a 450  $\text{cm}^{-1}$  para a amostra do OG sintetizado através do método modificado de Hummers-Offeman encontra-se ilustrado na Figura 4. O pico mais largo do espectro situa-se no número de onda de 3.395  $\text{cm}^{-1}$  e está associado ao grupo hidroxila do OG (Mermoux; Chabre; Rousseau, 1991). Com base nos números de onda onde se encontram os picos de absorção no terço direito do espectro de IV, é possível identificar os grupos funcionais presentes no OG: epóxido ( $\text{C}-\text{O}-\text{C}$ ), hidroxila ( $\text{C}-\text{O}-\text{H}$ , modo de dobramento), carbonila ( $\text{C}=\text{O}$ ), bem como as ligações conjugadas  $\text{C}=\text{C}$  existentes na estrutura corrugada do plano basal do óxido de grafite (Guerrero-Contreras; Caballero-Briones, 2015).

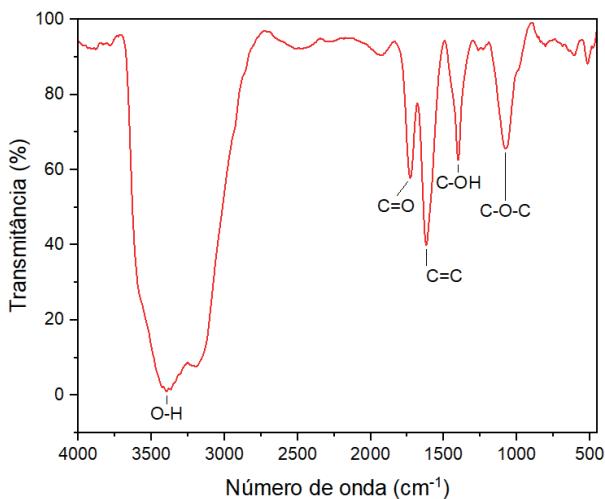


Figura 4. Espectro no infravermelho do OG obtido pelo método de Hummers modificado.

Fonte: autoria própria.

A Figura 5 mostra a micrografia eletrônica de varredura do OG obtida através de elétrons secundários. Como reportado na literatura (Guerrero-Contreras; Caballero-Briones, 2015), o OG apresenta uma estrutura formada por folhas finas corrugadas que se encontram agregadas de maneira randômica, formando um sólido não ordenado a nível molecular.

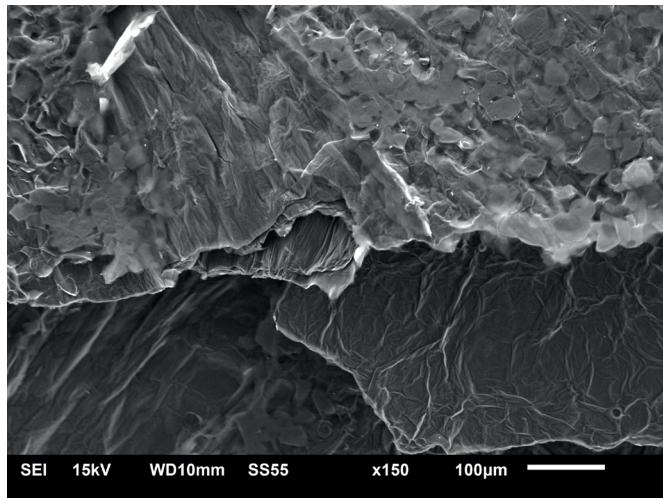


Figura 5. Microscopia eletrônica de varredura do OG, na qual é possível visualizar as folhas corrugadas características do nanomaterial.

Fonte: autoria própria.

A Figura 6 mostra a curva de DSC da amostra de OG. Nessa curva, é possível identificar um nítido pico exotérmico na temperatura de 232 °C, o qual está associado à degradação do OG através da perda do oxigênio lável, presentes nas ligações fracas dos grupos funcionais do OG, quais sejam, epóxido, hidroxila e ácido carboxílico (Pereira, 2019). O oxigênio lável reage com o carbono formando CO(g) e/ou CO<sub>2</sub>(g), liberando calor (412,9 J/g) e deixando buracos na estrutura planar do OG (Dreyer *et al.*, 2010).

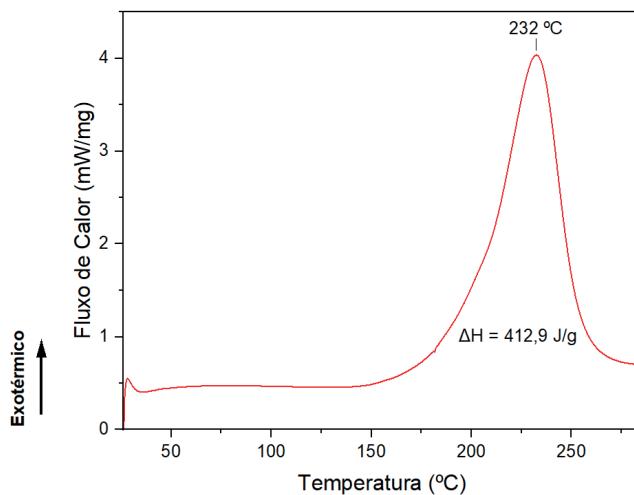


Figura 6. Termograma do OG obtido por DSC. O pico exotérmico sinaliza a degradação do OG com a perda do oxigênio lável.

Fonte: autoria própria.

A morfologia dos compósitos pode ser visualizada nas imagens de MEV da Figura 7, sob ampliação de 500x. A superfície do PET puro apresenta aspecto uniforme e sem granulações. No entanto, são visíveis linhas de escoamento decorrentes do cisalhamento axial promovido pelo parafuso plastificador da extrusora.

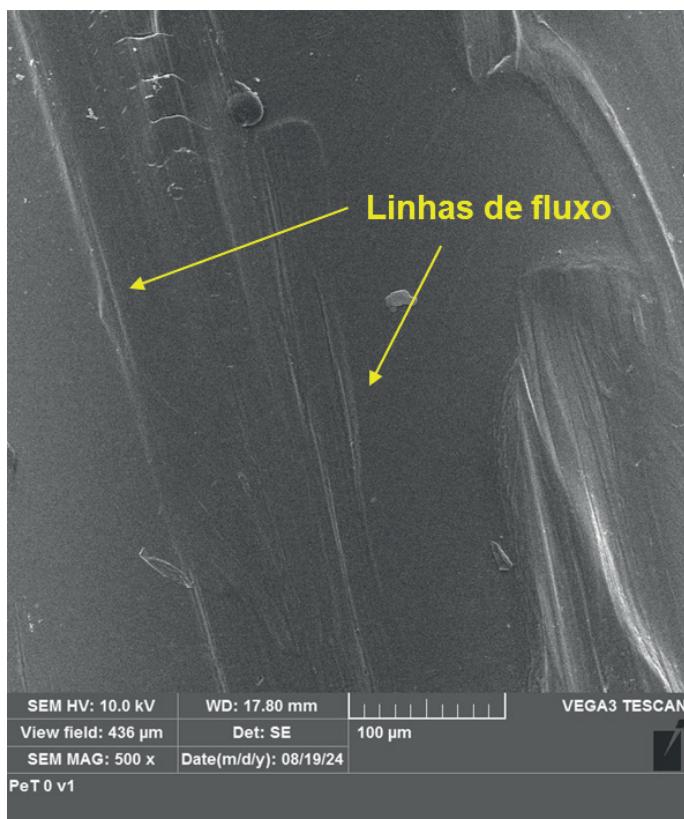


Figura 7. Microscopia eletrônica de varredura da amostra de PET extrudado sem OG, na qual é possível visualizar linhas de fluxo decorrentes do processo de extrusão.

Fonte: autoria própria.

As morfologias dos nanocompósitos com os diferentes teores de OG são mostradas na Figura 8. À medida em que o teor de OG aumenta, a morfologia do compósito se torna mais granulada, com corrugações que indicam aglomerados de OG dão origem a um nanocompósito de natureza intercalada, à semelhança de vários nanocompósitos já reportados na literatura (Sharma; Malik; Jain, 2018). Essa morfologia de natureza granulada em nanocompósitos poliméricos com OG também já foi identificada em outros trabalhos, a exemplo da inserção de OG em matrizes de polivinil álcool (Saha *et al.*, 2018). As Figuras 8(a) – (d) indicam, por fim, a boa dispersão do OG na matriz polimérica, fenômeno promovido pelo elevado cisalhamento da extrusora dupla-rosca corrotante.

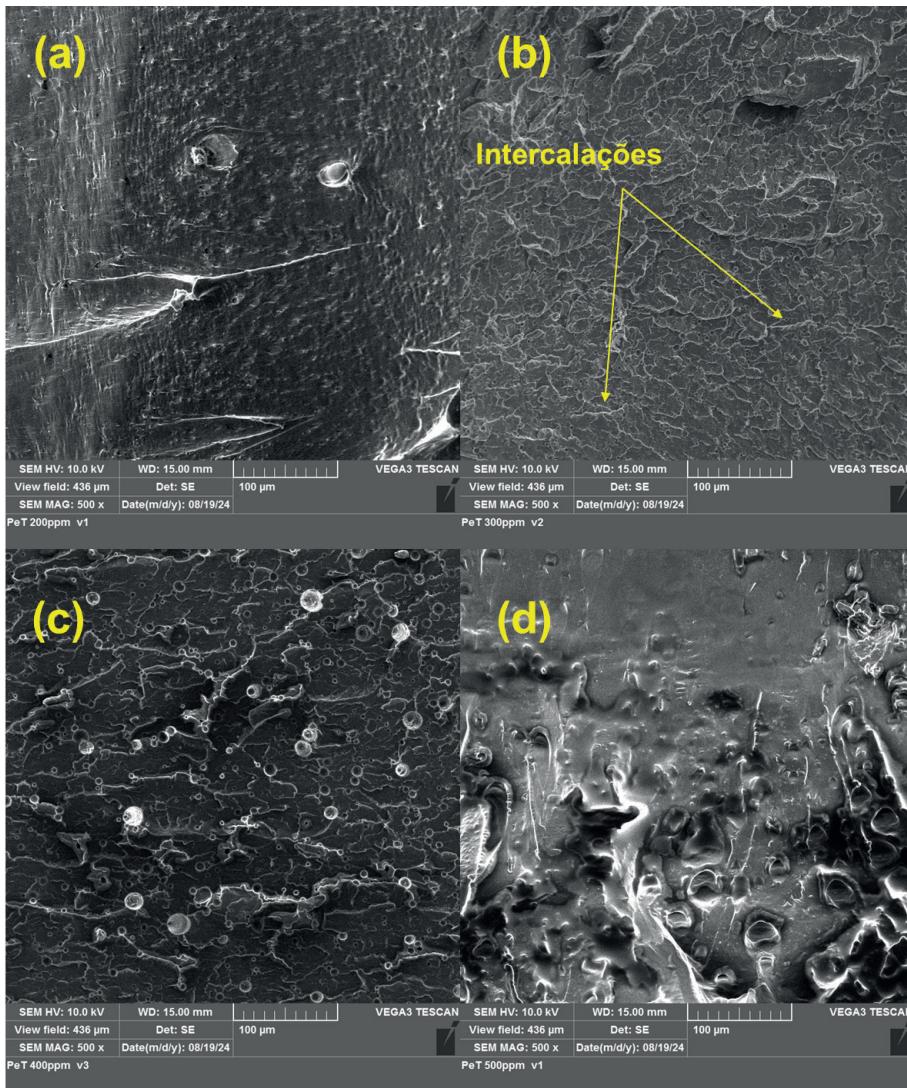


Figura 8. Microscopia eletrônica de varredura dos nanocompósito de PET com OG em diferentes teores mássicos: (a) 200 ppm, (b) 300 ppm, (c) 400 ppm e (d) 500 ppm.

Fonte: autoria própria.

## 5 | CONCLUSÃO

No presente estudo, foi realizada a síntese, purificação e esfoliação do óxido de grafeno (OG) pela via química (método de Hummers modificado). A caracterização por espectroscopia no infravermelho (FTIR) permitiu a identificação de todos os grupos funcionais característicos do OG. Através da calorimetria exploratória (DSC), foi possível mapear a temperatura de degradação do OG em que ocorre a perda do oxigênio lável, enquanto a microscopia de varredura (MEV) possibilitou a visualização das folhas

bidimensionais do OG.

Através da análise do MEV, foi possível constatar que a incorporação do OG na matriz polimérica foi bem-sucedida, evidenciada pela boa dispersão da nanocarga observada nas micrografias de MEV. O aumento no teor de OG promoveu a formação de uma morfologia granular intercalada, característica de nanocompósitos poliméricos típicos. Além disso, em todas as amostras de nanocompósitos analisadas, há linhas de fluxo decorrentes do processo de extrusão através do qual o material foi produzido.

Com isto, o presente trabalho propõe um método para produção de nanocompósitos de PET com OG que, em trabalhos futuros, podem ter suas propriedades (mecânicas, térmicas, reológicas e de barreira) estudadas com o intuito de avaliar o potencial do OG como um aditivo de interesse para as indústrias de terceira geração da cadeia de plásticos.

## AGRADECIMENTOS

O presente trabalho foi realizado com apoio do CNPq, Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico – Brasil. Os autores agradecem à Engepack Embalagens S/A pela doação de resina PET para produção dos corpos de prova utilizados nesse trabalho.

## REFERÊNCIAS

ASSIS, A. M. A. D. de. **Síntese e caracterização do sistema óxido de grafeno reduzido – óxido de cobalto e seu comportamento adsorptivo frente ao corante aniônico indosol blue**. 2021. Tese (Doutorado em Ciências de Materiais) – Universidade Federal de Pernambuco, Recife, 2021. Disponível em: <https://repositorio.ufpe.br/handle/123456789/37703>. Acesso em: 23 set. 2024.

BALANDIN, A. A. *et al.* Superior Thermal Conductivity of Single-Layer Graphene. **Nano Letters**, v. 8, n. 3, p. 902–907, 1 mar. 2008. DOI: 10.1021/nl0731872.

BLAKE, P. *et al.* Graphene-Based Liquid Crystal Device. **Nano Letters**, v. 8, n. 6, p. 1704–1708, 1 jun. 2008. DOI: 10.1021/nl080649i.

BOCCCHINI, B. Brasil gerou 64 quilos de resíduos plásticos por pessoa em 2022. **Agência Brasil**, São Paulo, 22 mar. 2023. Disponível em: <https://agenciabrasil.ebc.com.br/geral/noticia/2023-03/brasil-gerou-64-quilos-de-residuos-plasticos-por-pessoa-em-2022#:~:text=Dados%20do%20Panorama%20dos%20Res%C3%ADduos,quilos%20por%20pessoa%20no%20ano>. Acesso em: 22 set. 2024.

BOEHM, H.-P.; STUMPP, E. Citation errors concerning the first report on exfoliated graphite. **Carbon**, v. 45, n. 7, p. 1381–1383, jun. 2007. DOI: 10.1016/j.carbon.2006.12.016.

BOHRA, B. S. *et al.* The effects of functionalized graphene oxide on the thermal and mechanical properties of liquid crystalline polymers. **Soft Matter**, v. 18, p. 3981–3992, Abr. 2022. DOI: 10.1039/D2SM00143H.

BOOTH, T. J. *et al.* Macroscopic Graphene Membranes and Their Extraordinary Stiffness. **Nano Letters**, v. 8, n. 8, p. 2442–2446, 13 ago. 2008. DOI: 10.1021/nl801412y.

BRACCO, P. et al. Comparison of polypropylene and polyethylene terephthalate (Dacron) meshes for abdominal wall hernia repair: A chemical and morphological study. **Hernia**, v. 9, n. 1, p. 51–55, 10 mar. 2005. DOI: 10.1007/s10029-004-0281-y.

BRASIL: embalagens flexíveis marcaram passo em 2022. **Plásticos em Revista**, [s. /], 15 mai. 2023. Disponível em: <https://plasticosemrevista.com.br/brasil-embalagens-flexiveis-marcaram-passo-em-2022/>. Acesso em: 22 set. 2024.

BUCHSTEINER, A.; LERF, A.; PIEPER, J. Water Dynamics in Graphite Oxide Investigated with Neutron Scattering. **The Journal of Physical Chemistry B**, v. 110, n. 45, p. 22328–22338, 1 nov. 2006. DOI: 10.1021/jp064113z.

CANEVAROLO Jr., S. V. **Ciência dos polímeros: um texto básico para tecnólogos e engenheiros**. 3. ed. São Paulo: Artliber Editora, 2013.

CANEVAROLO Jr., S. V. Experimentos com polímeros. In: CANEVAROLO Jr., S. V. **Ciência dos polímeros: um texto básico para tecnólogos e engenheiros**. 2. ed. São Paulo: Artliber Editora, 2006. p. 249–250.

CARASCHI, J.; LEAO, A. Avaliação das propriedades mecânicas dos plásticos reciclados provenientes de resíduos sólidos urbanos. **Acta Scientiarum : Technology**, v. 24, set. 2002. DOI: 10.4025/actascitechol.v24i0.2462.

CENTER FOR SUSTAINABLE SYSTEMS. **Plastic Waste Factsheet**. Ann Arbor, n. CSS22-11, 2023. Disponível em: [https://css.umich.edu/sites/default/files/2023-10/Plastic%20Waste\\_CSS22-11.pdf](https://css.umich.edu/sites/default/files/2023-10/Plastic%20Waste_CSS22-11.pdf). Acesso em: 19 set. 2024.

CHANDA, M.; ROY, S. K. **Industrial Polymers, Specialty Polymers, and Their Applications**. 1. ed. [S. /]: CRC Press, 2008.

DANDAPANI, D.; DEVENDRA, K. Thermal Properties of Graphene based Polymer Nanocomposites. **Indian Journal of Science and Technology**, v. 15, n. 45, p. 2508–2514, 5 dez. 2022. DOI: 10.17485/IJST/v15i45.1824.

DIKIN, D. A. et al. Preparation and characterization of graphene oxide paper. **Nature**, v. 448, n. 7152, p. 457–460, jul. 2007. DOI: 10.1038/nature06016.

DREYER, D. R. et al. The chemistry of graphene oxide. **Chemical Society Reviews**, v. 39, n. 1, p. 228–240, 2010. DOI: 10.1039/B917103G.

DURGASHYAM, K et al. Experimental investigation on mechanical properties of PETG material processed by fused deposition modeling method. **Materials Today: Proceedings**, v. 18, p. 2052–2059, 2019. DOI: 10.1016/j.matpr.2019.06.082.

FORTUNE BUSINESS INSIGHTS. **Polyethylene Terephthalate (PET) Market Size, Share & Industry Analysis, By Type (Virgin and Recycled), Application (Rigid Packaging, Film, Sheets & Straps, and Others), and Regional Forecast, 2024-2032**. [S. /], 2 set. 2024. Disponível em: <https://www.fortunebusinessinsights.com/industry-reports/polyethylene-terephthalate-pet-market-101743>. Acesso em: 19 set. 2024.

GEIM, A. K.; NOVOSELOV, K. S. The rise of graphene. **Nature Materials**, v. 6, n. 3, p. 183–191, mar. 2007. DOI: 10.1038/nmat1849.

GUERRERO-CONTRERAS, J.; CABALLERO-BRIONES, F. Graphene oxide powders with different oxidation degree, prepared by synthesis variations of the Hummers method. **Materials Chemistry and Physics**, v. 153, p. 209-220, 2015. DOI: 10.1016/j.matchemphys.2015.01.005.

HELLER, M. C.; MAZOR, M. H.; KEOLEIAN, G. A. Plastics in the US: toward a material flow characterization of production, markets and end of life. **Environmental Research Letters**, v. 15, n. 9, p. 094034, 2020. DOI: 10.1088/1748-9326/ab9e1e.

HUMMERS, W. S.; OFFEMAN, R. E. Preparation of Graphitic Oxide. **Journal of the American Chemical Society**, v. 80, n. 6, p. 1339–1339, 1 mar. 1958. DOI: 10.1021/ja01539a017.

KAUR, M.; KAUR, H.; KUKKAR, D. Synthesis and characterization of graphene oxide using modified Hummer's method. In: 2ND INTERNATIONAL CONFERENCE ON CONDENSED MATTER AND APPLIED PHYSICS (ICC 2017), 2018, Bikaner. **Anais** [...] Bikaner: AIP Conference Proceedings, 2018. p. 030180. DOI: 10.1063/1.5032515.

KECILI, R.; HUSSAIN, C. M. Mechanism of Adsorption on Nanomaterials. In: HUSSAIN, C. M. **Nanomaterials in Chromatography** [S. l.]: Elsevier, 2018. p. 89–115. DOI: 10.1016/B978-0-12-812792-6.00004-2.

KITTITHAMMAMONG, V.; KHANITCHAIDECHA, W.; THONGSANIT, P. CO<sub>2</sub> Emissions from Plastic Consumption Behaviors in Thailand. **Sustainability**, v. 15, n. 16, p. 12135, 8 ago. 2023. DOI: 10.3390/su151612135.

LAWAL, A. T. Graphene-based nano composites and their applications. A review. **Biosensors and Bioelectronics**, v. 141, p. 111384, set. 2019. DOI: 10.1016/j.bios.2019.111384.

LEE, C., WEI *et al.* Measurement of the Elastic Properties and Intrinsic Strength of Monolayer Graphene. **Science**, v. 321, n. 5887, p. 385–388, 18 jul. 2008. DOI: 10.1126/science.1157996.

LEE, S.-M.; KANG, D.-S.; ROH, J.-S. Bulk graphite: materials and manufacturing process. **Carbon letters**, v. 16, n. 3, p. 135–146, 15 set. 2015. DOI: 10.5714/CL.2015.16.3.135.

LEPOITTEVIN, B.; ROGER, P. Poly(ethylene terephthalate). In: THOMAS, S.; VISAKH, P. M. **Handbook of Engineering and Speciality Thermoplastics**. [S. l.]: Wiley, 2011. p. 97–126. DOI: 10.1002/9781118104729.ch4.

MAJDZADEH-ARDAKANI, K.; ZEKRIARDEHANI, S.; COLEMAN, M. R., et al. A Novel Approach to Improve the Barrier Properties of PET/Clay Nanocomposites. **International Journal of Polymer Science**, v. 2017, p. 1–10, 2017. DOI: 10.1155/2017/7625906.

MERMOUX, M.; CHABRE, Y.; ROUSSEAU, A. FTIR and <sup>13</sup>C NMR study of graphite oxide. **Carbon**, v. 29, n. 3, p. 469-474, 1991. DOI: 10.1016/0008-6223(91)90216-6.

MOURA, M. C. S. **Desenvolvimento e caracterização de compósitos poli(tereftalato de etileno) reciclado (PET reciclado) com flocos de vidro**. 2011. Tese (Doutorado em Ciência e Engenharia de Materiais) – Universidade Federal do Rio Grande do Norte, Natal, 2011. Disponível em: <https://repositorio.ufrn.br/jspui/handle/123456789/12784>. Acesso em: 23 ago. 2024.

NISTICÒ, R. Polyethylene terephthalate (PET) in the packaging industry. **Polymer Testing**, v. 90, p. 106707, out. 2020. DOI: 10.1016/j.polymertesting.2020.106707.

OECD. **Global Plastics Outlook: Economic Drivers, Environmental Impacts and Policy Options**. Paris: OECD Publishing, 2022. DOI: 10.1787/de747aef-en.

PEREIRA, N. G. A. **Síntese, modificação química e caracterização de óxido de grafeno preparado via eletroquímica**. 2019. Dissertação (Mestrado em Materiais para Engenharia) – Universidade Federal de Itajubá, Itajubá, 2019. Disponível em: <https://repositorio.unifei.edu.br/jspui/handle/123456789/2441>. Acesso em: 10 set. 2024.

RAMAKRISHNAN, S. et al. One-step synthesis of Pt-decorated graphene–carbon nanotubes for the electrochemical sensing of dopamine, uric acid and ascorbic acid. **Analytical Methods**, v. 7, n. 2, p. 779–786, 2015. DOI: 10.1039/C4AY02487G.

ROMÃO, W.; SPINACÉ, M. A. S.; PAOLI, M.-A. De. Poli(tereftalato de etileno), PET: uma revisão sobre os processos de síntese, mecanismos de degradação e sua reciclagem. **Polímeros**, v. 19, n. 2, p. 121–132, jun. 2009. DOI: 10.1590/S0104-14282009000200009.

SARICAM, C.; OKUR, N. Polyester Usage for Automotive Applications. In: CAMLIBEL, N. O. **Polyester - Production, Characterization and Innovative Applications**. [S. l.]: InTech, 2018. DOI: 10.5772/intechopen.74206.

SAHA, V.C et al. Synthesis and Characterization of Reduced Graphene Oxide Reinforced Polymer Matrix Composite. **IOP Conference Series: Materials Science and Engineering**, vol. 438, n. 1, p. 12008, 2018. DOI: 10.1088/1757-899X/438/1/012008.

SHARMA, B.; MALIK, P.; JAIN, P. Biopolymer reinforced nanocomposites: A comprehensive review. **Materials Today Communications**, v. 16, p. 353–363, set. 2018. DOI: 10.1016/j.mtcomm.2018.07.004.

SI, Y.; SAMULSKI, E. T. Synthesis of Water Soluble Graphene. **Nano Letters**, v. 8, n. 6, p. 1679–1682, 1 jun. 2008. DOI: 10.1021/nl080604h.

SILVESTRE, C.; DURACCIO, D.; CIMMINO, S. Food packaging based on polymer nanomaterials. **Progress in Polymer Science**, v. 36, n. 12, p. 1766–1782, dez. 2011. DOI: 10.1016/j.progpolymsci.2011.02.003.

SOONG, Y.-H. V.; SOBKOWICZ, M. J.; XIE, D. Recent Advances in Biological Recycling of Polyethylene Terephthalate (PET) Plastic Wastes. **Bioengineering**, v. 9, n. 3, p. 98, 27 fev. 2022. DOI: 10.3390/bioengineering9030098.

SUHAIMIN, N. S. et al. Tuning the oxygen functional groups in graphene oxide nanosheets by optimizing the oxidation time. **Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures**, v. 131, p. 114727, jul. 2021. DOI: 10.1016/j.physe.2021.114727.

SUN, X. et al. Monodisperse Chemically Modified Graphene Obtained by Density Gradient Ultracentrifugal Rate Separation. **ACS Nano**, v. 4, n. 6, p. 3381–3389, 22 jun. 2010. DOI: 10.1021/nn1000386.

URADE, A. R.; LAHIRI, I.; SURESH, K. S. Graphene Properties, Synthesis and Applications: A Review. **JOM**, v. 75, n. 3, p. 614–630, 14 mar. 2023. DOI: 10.1007/s11837-022-05505-8.

VASHCHUK, A. et al. Thermal conductivity and mechanical properties of epoxy vitrimer nanocomposites reinforced with graphene oxide. **Applied Nanoscience**, v. 13, n. 7, p. 4675–4683, 24 jul. 2023. DOI: 10.1007/s13204-022-02587-3.

WICK, P. *et al.* Classification Framework for Graphene-Based Materials. **Angewandte Chemie International Edition**, v. 53, n. 30, p. 7714–7718, 21 jul. 2014. DOI: 10.1002/anie.201403335.

WIEBECK, H.; HARADA, J. **Plásticos de engenharia**. São Paulo: Artliber Editora, 2005.

XING, R.; LI, Y.; YU, H. Preparation of fluoro-functionalized graphene oxide via the Hunsdiecker reaction. **Chemical Communications**, v. 52, n. 2, p. 390–393, 2016. DOI: 10.1039/C5CC08252H.

ZHANG, Y. *et al.* Direct observation of a widely tunable bandgap in bilayer graphene. **Nature**, v. 459, n. 7248, p. 820–823, jun. 2009. DOI: 10.1038/nature08105.

ZHAO, X. *et al.* Enhanced Mechanical Properties of Graphene-Based Poly(vinyl alcohol) Composites. **Macromolecules**, v. 43, n. 5, p. 2357–2363, 9 mar. 2010. DOI: 10.1021/ma902862u.

# CAPÍTULO 4

## USE OF COMPUTATIONAL CHEMISTRY TO STUDY THE ADSORPTION PROCESS OF CONTAMINANTS USING ACTIVATED CARBON PREPARED CHEMICALLY FROM AGUAJE SEEDS (*MAURITIA FLEXUOSA*) AND CHESTNUT SHELL

Data de submissão: 23/09/2024

Data de aceite: 01/11/2024

### A.L. Paredes-Doig

Facultad de Ciencias, Universidad Nacional de Ingeniería, Av. Túpac Amaru 210, Rímac, Lima, Perú.

### E. Doig-Camino

Sección Matemáticas, Departamento de Ciencias, Pontificia Universidad Católica del Perú, Av. Universitaria 1801, Lima 32, Perú.

### G. Picasso

Facultad de Ciencias, Universidad Nacional de Ingeniería, Av. Túpac Amaru 210, Rímac, Lima, Perú.

### A. La Rosa-Toro

Facultad de Ciencias, Universidad Nacional de Ingeniería, Av. Túpac Amaru 210, Rímac, Lima, Perú.

### M.R. Sun-Kou

Sección Química, Departamento de Ciencias, Pontificia Universidad Católica del Perú, Av. Universitaria 1801, Lima 32, Perú.

**ABSTRACT:** In the present study, it was exposed a computational chemistry analysis of adsorption process of the contaminants from wastewaters like metal cations,

farmaceutical compounds and organic acids. First of all, the study was focused in the quantum mechanical parameters of the adsorbates and adsorbents. Then, it was explained, calculating the adsorption energy, the method molecular dynamics to predict the mechanism of the adsorption process.

## INTRODUCTION

It is very important study computational analysis and molecular dynamics, molecular mechaniscs or Monte Carlo simulation to understand too the mechanism and so optimize treatment process.

This investigation is useful to colect information from the different papers and Works that using DFT calculations and molecular simulations to apply it to the wastewaters treatment.

Many computational methods has been employed to explore a diversity of chemistry phenomenons success as like theorerically as to explain experimental cases (1).

Selecting a Good computational leve lof theory it is possible to simulate the evolution of the adsorption process and to predict the certain of this process (2-7)

Some authors, first, tried to have accuracy with ab initio methos too. Althought, actually, the most used, in DFT calculations, is the DFT theory optimized with the B3LYP hybrid functional.

In the first parto f this review, it is going to talk of DFT calculations. To continue with a approach of interaction of these with molecular simulations- Finally, it is going to show three examples of adsorption with activated carbon from aguaje sedes and chesnut Shell, typical residues from Peruvian amazony.

It is not possible, with human service alone, to monitor water quality for long periods. Therefore, it is important to develop other more intelligent, convenient and less dangerous ways. For example, with computational chemistry it has been possible to predict the behavior of pollutants in nature.

It is known that the identification of the molecular properties of contaminants such as chemical reactivity and biodegradability is a prerequisite for efficient water treatment. Mainly, these molecular properties depend on the molecular geometry and composition. Computational chemistry provides a powerful tool for calculating molecular structures and properties.

Computation methods or molecular simulations can be used to identify materials with high adsorption capacity for wastewater treatment rapidly. They can also provide complementary insights into the dynamics of adsorption processes. In addition, molecular simulations can be used to understand the adsorption mechanism and the interaction between contaminants and adsorbents

Moreover, molecular simulation can provide complementary information regarding the adsorption mechanism and the interaction between the pollutant and the adsorbent. [8-9]

## A. ADSORPTION THEORY

### II.A.1. ADSORPTION

There is an interaction between force fields between a solid and a liquid or gas when the surface of the solid is in contact with a liquid or a gas. The phenomenon that results from this imbalance of molecular forces present on the solid surface is called adsorption, with the solid being the adsorbent and the fluid (gas or liquid) being the adsorbate.

The adsorption process is the result of two forces, one of attraction towards the surface of the solid and the other of repulsion.

The type of adsorption that occurs in an adsorbate-adsorbent system depends on the nature of both the adsorbate and the adsorbent, the reactivity of the surface, the surface

area of the adsorbate, the temperature and the adsorption pressure .

Adsorption can occur in two types: physisorption and chemisorption. In the case of physisorption, the adsorbate is weakly bound to the surface of the solid by Van der Waals forces.

In contrast, chemisorption involves an exchange or sharing of electrons between the adsorbate molecules and the adsorbent surface resulting in a chemical reaction. Chemisorption is the initial stage of any catalytic process.

## II.A.2 Surface chemistry of the adsorbent material: activated carbon

The surface chemistry of the material is determined by the chemical composition of its surface. In the case of activated carbons, disturbances in the microcrystalline elemental structure due to the presence of imperfections give rise to a variation in the arrangement of the electronic clouds of the carbon skeleton, which creates unpaired electrons and incompletely saturated valences. These characteristics are what define the adsorption properties of activated carbon, especially with polar and polarizable compounds.

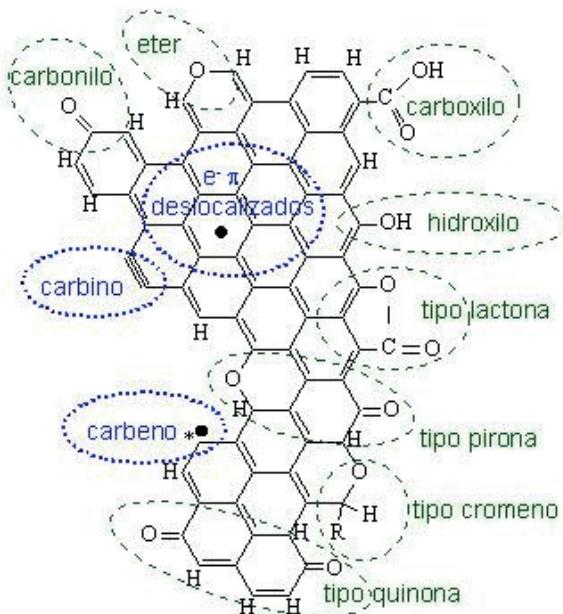


Figure 1. Schematic representation of the acidic character of some oxygenated groups and the basic character of the electrons delocalized in the basal plane and of other oxygenated groups (taken from Ménendez) [28]

## II.B. COMPUTATIONAL METHODS

Computational Chemistry, although it goes hand in hand with Theoretical Chemistry, the former includes a mathematical evaluation of Chemistry. Computational studies are used

to predict key properties of even unknown molecules or to explore reaction mechanisms of what has not yet been studied experimentally.

## II.B.2. Descriptios of Methods

### a) Ab Initio method [11-16]

Fundamentally assuming the Hartree-Fock theory where each electron allows tremendous progress for the calculation of molecular orbitals.[17]

The development of semiempirical theories was motivated in part by parameterization forces that were able to compensate for this feature of Hartree-Fock. Of course, the ultimate rigor is achieved, so the error energy associated with the HF approximation for a given system is called the electron correlation energy Ecorr.

$$\text{Ecorr} = \text{E-Ef}$$

Methods that do not include any empirical or semi-empirical parameters make up the so-called Ab Initio methods.

This is understood in that the programs used in Computational Chemistry are based on different quantum mechanical methods that are solved with Eq. of Schrodinger associated with a Hamiltonian.

Ab Initio methods try to define a novel theory and a “Basis Set”. These “Sets” are used to describe molecular orbitals through the Linear Combination of Atomic Orbitals.

The best-known type of Ab Initio calculation is Hartree-Fock, an extension of molecular orbital theory. This method does not take into account the electron-electron repulsions in the molecule.

Later, the post-Hartree-Fock method emerged, which presents a correction for this repulsion.

### b) Density Functional Theory (DFT) Method

The difference between these methods and Ab Initio methods is that DFT uses parameters derived from experimental data. Furthermore, it represents an alternative way to conventional Ab Initio methods by introducing the effects of electronic correlation in the resolution of eq. by Schrödinger.

What forms the basis of DFT is the fact of using electron density instead of a wave function to calculate energy [BOOK 1, 18]

This function, depending on a spin, and three spatial coordinates for each electron, is particularly intuitive for systems with more than one electron.[17]

### b) Semi-empirical Methods [19,20]

They are based on the Hartree-Fock theory; however, they make many approximations and obtain parameters from experimental data.

According to Semi-Empirical primitives, these were designed where a Hamiltonian electron pair is not explicitly included. For this pi electron system, Huckel's method is used.

## 1. DFT-based descriptor model

(1) First, it is necessary calculate some quantum global parameters like energy gap ( $\Delta E$ ), electron affinity (EA), ionisation potential (IP), electronegativity (X), global hardness ( $\eta$ ) and global softness ( $\sigma$ ):

$$\Delta E = \text{ELumo} - \text{EHomo}$$

$$\text{EA} = -\text{ELumo}$$

$$\text{IP} = -\text{EHomo}$$

$$X = (\text{IP} + \text{EA})/2$$

$$\eta = (\text{IP} - \text{EA})/2$$

$$\sigma = 1/\eta$$

This is useful to predict the adsorption mechanism. For example, several authors use the HOMO-LUMO energy such as indicator: a large HOMO-LUMO energy gap indicates chemically hard molecules interact less with other systems. A more reactive molecule has a moderate value of HOMO-LUMO (11)

Normally, the compounds are firstly optimized with B3LYP hybrid functional within DFT framework (21-22)

### (2) Adsorption energy

#### a) Molecular Mechanics [23]

Use a classical expression for the energy of the compound as the harmonic oscillator.

One of the most interesting properties of a phase point that has not yet been recognized is that it is defined by the positions and momenta of all the particles. This determines the location of the next phase point in the absence of external forces acting on the system.[17]]

#### b) Molecules Dynamics

It also uses quantum mechanics, molecular mechanics or a mixture of both. Calculate the trajectories by solving Newton's equations of motion for the set of particles.[21]

For a computational chemist, the Surface Energy Potential is a surface that can be generated point by point using some computational methods, which determine a molecular energy for the structure of each point. The first Surface Energy Potential (SEP) was built by people studying molecular spectroscopy.[17]

#### c) Monte Carlo

It generates configurations of a system that makes random changes to the positions of its particles, along with their orientations and conformations where appropriate.

More generally, it does not provide dynamic system information; However, it can be extended to quantum systems much more easily. [24]

One can imagine entailing a stochastic approximation to extreme logic, in which the event has no equations of motion to integrate.[17]

#### d) Quantum Mechanics/Molecular Mechanics (QM/MM) [25]

It is a hybrid that combines the precision of quantum mechanics with the speed of

molecular mechanics.

To determine low energy adsorption sites, the adsorption locator uses the Monte Carlo (MC) simulation approach, which calculates preferential adsorption sites of mixes adsorbate components. This uses a geometry optimization.

It is important to note that also is possible to use molecular dynamics or molecular mechanics.

The paper cited (1) that uses Monte Carlo (MC) simulation explained too that the adsorption energy calculation are compute din a vacuum and ground state environment. Therefore, effects such as kinetic energies, environment surrounding, concentration, pH-dependency and solubility are not included in the calculation (1)

In this paper, the adsorption energy indicates the energy required by the contaminant to move towards the Activated carbon.

$$\Delta E_{\text{adsorption}} = E(\text{complex}) - E(\text{adsorbate}) - E(\text{adsorbent})$$

Where  $E(\text{complex})$  is the electronic energy of the complex formed by the interaction of the adsorbate and the adsorbent separately (26)

In paper (23), it was calculated interaction between dyes and Graphene oxide and their structures were optimized at the PW6B95-D3/defQ-1ZVP level of theory.

In other investigations (27) utilized computational chemistry. They used Hartree-Fock as opposed to DFT, with a 6-31G basis function using GAUSSIAN 09.

In another cluster atom, calculated semi-empirical approach was used to understand the cyanide adsorption on graphite. A relative reactivity is calculated by comparing the difference between cyanide's HOMO and graphite's LUMO with or without magnetite. The smaller the absolute difference between these frontier orbitals, the more reactive is cyanide toward the substrate (28)

### III PART: EXAMPLES

a) The interaction of metallic ions onto activated carbon Surface using computational chemistry software

First, it was modeled a reaction site of Activated carbon with the results of Surface acidity (Boehm). For example, AC presented more lactonic groups and AC-OX has more phenolic and carboxylic groups. This can be observed in the next table:

	Carboxylics mmol H <sup>+</sup> /g	Lactones mmol H <sup>+</sup> /g	Phenolics mmol H <sup>+</sup> /g	Total mmol H <sup>+</sup> /g	pH <sub>PCZ</sub>
AC	1,12	3,08	0,03	4,22	2,450
AC-OX	4,10	0,05	0,67	4,82	2,014

**Table 1.** Characteristics of surface chemistry of AC and AC-OX

It was used electronic density to observe what AC showed a big negative charge to

attract metal ions.

Like the metal ions are considered Lewis acid, this contributed with their LUMO orbitals. Whereas the ACs act such a Lewis base, by classifying Pearson and Alfarra (29) give electrons from their HOMO's orbitals. The order showed of metal ions adsorption was Pb(II)> Cd(II)>Cr(III).

The energies of frontier orbital is shown here.

	HOMO	LUMO	$\Delta E$
<b>Cr (III)</b>	-49.78	-27.81	<b>18.49</b>
<b>Cd (II)</b>	-38.92	-14.71	<b>5.39</b>
<b>Pb (II)</b>	-37.52	-13.55	<b>4.23</b>
AC unoxidized	-9.32	-2.24	
<b>Cr (III)</b>	-49.78	-27.81	<b>18.7</b>
<b>Cd (II)</b>	-38.92	-14.71	<b>5.6</b>
<b>Pb (II)</b>	-37.52	-13.55	<b>4.44</b>
<b>AC-OX</b>	-9.11	-1.82	

**Tabla 2.** Frontier orbital values obtained using Hyperchem

With these results it's possible to see that, oxidizing,  $\Delta E$  is few greater, although the electronic densities (Unoxidized: -1.38; Oxidized: -2.81) are bigger with the oxidized carbon and indicate the adsorption order.

B) Computational modelling of DMA adsorption onto activated carbon prepared from Aguaje sedes

It was studied frontier orbitals (HOMO-LUMO) and their  $\Delta E$  (eV). The AC reacts as nucleophile and DMA like a electrophile.

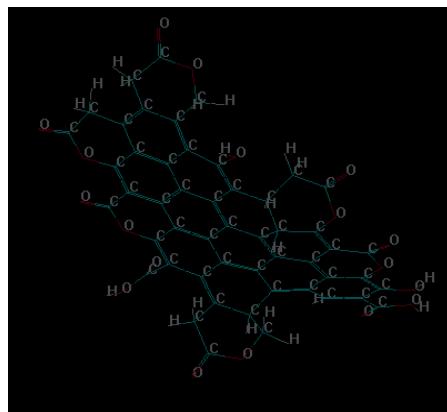


Figure 2. Image of the AC model with its respective functional groups obtained through molecular modeling.

	CA-0,5	CA-0,75	CA-1,0	CA-1,5
HOMO (eV)	-8.21	-8.43	-8.36	-7.18
LUMO (eV)	-3.34	-3.48	-3.41	-2.79
$\Delta E_{CA}$ (eV)	4.87	4.95	4.95	4.39

Table 3. Frontier orbitals of activated carbons at different degrees of impregnation.

	DMA	DMAH+
HOMO (eV)	-9.38	-19.10
LUMO (eV)	3.48	-4.99

Table 4. Frontier orbitals of the dimetilamine

	AC-0.5-DMAH+	AC-0.75-DMAH+	AC-1.0-DMAH+	AC-1.5-DMAH+
LUMO <sub>adsorbato</sub> (eV)	-4.89	-4.68	-4.91	-5.00
HOMO <sub>adsorbente</sub> (eV)	-9.06	-9.61	-9.23	-7.79
$\Delta E_{adsorbato-adsorbente}$ (eV)	4.17	4.93	4.38	2.79

Tabla 5. Interaction of the molecular orbitals of the adsorbate (DMA) and the adsorbents (AC).

It was prepared many ACs (AC.0.5, AC-0.75, AC-1,0 and AC-1,5 taking account of impregnation ratio of phosphoric acid) It was found that AC-1,5 is the more reactive by the minor frontier orbitals energy difference. This AC has the bigger donor carácter in comparison with the others. The  $\Delta E$  values reported are les of 7,34 eV. And the adsorption is a chemisorption as conclusión. The order observed by computational chemistry was the same of experimental results: AC-1,5>AC-0,5>AC-1,0>AC-0,75 in relation of their  $\Delta E$  homolumo and their best interaction with DMA. Also, it was compared the adsorption energy of DMA and DMAH+. It could said that the reaction preferred was the ACs with the protonated form. This last análisis a lower pH showed a HOMO and LUMO more negative for DMAH+ species.

C) A study of the adsorption of aromatic compounds using activated carbons prepared from the chesnut Shell

In the last years, agro-industrial wastes has been used as precursors for the AC production. Like the previous examples, these ACs were prepared from Peruvian Amazon residues. The compounds studied were salycilic acid, benzoica cid and phenol. These species interacting with a "π-π" attraction and repulsión.

The frontier orbitals was performed with the Hyperchem 8.

The aromatic compound with major affinity to the carbon (salycilic acid) held minor energetic difference in these electronic densities in the aromatic rings (30).

The adsorption resulted be a reversible process, because  $\Delta E$  are higher tan 7,34 Ev. But, when it is evaluated a acid pH, the  $\Delta E$  values observed changed. In this case,

these reached  $\Delta E$  values lower to 7,34 eV. So in this last case, the adsorption is irreversible (chemisorption). The adsorption order found was salycilic acid>benzoica cid>phenol.

## CONCLUSIONS

The method DFT is the most used actually. This allow to calculate quantum global parameters such as computational modelling.

Two factors are important in adsorption process: frontier orbitals and adsorption energy. Taking account results of that, it is possible found the mechanism of adsorption.

Computational chemistry is being applied to adsorption of contaminants onto activated carbon.

It is possible to model activated carbon with Boehm and FTIR characterization. Also, it is possible evaluate factors like concentration, pH, temperatura, etc.

## ACKNOWLEDGEMENT

Authors want to thank to the Fondecyt for his support and the each person whoes contributing to get a work better.

## REFERENCES

- (1) M.H. Ridzwan et al. (2022) Computational insight into the quantum chemistry, interaction and adsorption energy of aminopolycarboxylic acid chelating agents towards metal cations. Computational and Theoretical Chemistry 1208, 113579.
- (2) M.A. Mahmoud, H.A. Nasr-El-Din, C.A. De Wolf, J.N. LePage, J.H. Bemelaar, Evaluation of a new environmentally friendly chelating agent for high-temperature applications, SPE J. 16 (2011) 559–574, <https://doi.org/10.2118/127923-PA>.
- (3) G. Chauhan, K.K. Pant, K.D.P. Nigam, Chelation technology: a promising green approach for resource management and waste minimization, Environ. Sci. Process. Impacts. 17 (1) (2015) 12–40.
- (4) T. Almubarak, J.H. Ng, H. Nasr-El-Din, Oilfield scale removal by chelating agents: an aminopolycarboxylic acids review, SPE West, Reg. Meet. Proc. 2017 (2017) 1053–1065, <https://doi.org/10.2118/185636-ms>.
- (5) T. Almubarak, J.H. Ng, H. Nasr-El-Din, Chelating agents in productivity enhancement: a review, Soc. Pet. Eng. - SPE Oklahoma City Oil Gas Symp. 2017 (2017) 88–112, <https://doi.org/10.2118/185097-ms>.
- (6) F.P. Dwyer, D.P. Mellor, Chelating Agents and Metal Chelates, Academic Press, New York, 1964. [12] A.T. Onawole, I.A. Hussein, H.I. Nimir, M.E.M. Ahmed, M.A. Saad, S. Kolayl, Molecular design of novel chemicals for iron sulfide scale removal, J. Chem. 2021 (2021) 1–11, <https://doi.org/10.1155/2021/7698762>.
- (7) A.T. Onawole, I.A. Hussein, H.I. Nimir, M.E.M. Ahmed, M.A. Saad, S. Kolayl, Molecular design of novel chemicals for iron sulfide scale removal, J. Chem. 2021 (2021) 1–11, <https://doi.org/10.1155/2021/7698762>

(8) Lei He, Lu Bai, Dionysios D. Dionysiou, Zongsu Wei, Richard Spinney, Chu Chu, Zhang Lin, Ruiyang Xiao ,\*Chemical Engineering Journal

(9) Applications of computational chemistry, artificial intelligence, and machine learning in aquatic chemistry research,Chemical Engineering Journal 426 (2021) 131810

(10) Alhadji Malloum, Kayode A. Adegoke, Joshua O. Ighalo, Jeanet Conradie, Chinemerem R. Ohoro, James F. Amaku, Kabir O. Oyedotun, Nobanathi W. Maxakato, Kovo G. Akpomie, Emmanuel S. Okeke, Chijioke OlisahComputational methods for adsorption study in wastewater treatment Journal of Molecular Liquids 390 (2023) 123008

(11) "Computational Chemistry and Molecular Modeling". SpringerLink. 2008. doi:10.1007/978-3-540-77304-7. ISBN 978-3-540-77302-3. S2CID 102140015.

(12) Leach, Andrew R. (2009). Molecular modelling: principles and applications (2. ed., 12. [Dr.] ed.). Harlow: Pearson/Prentice Hall. ISBN 978-0-582-38210-7.

(13) Xu, Peng; Westheimer, Bryce M.; Schlinsog, Megan; Sattasathuchana, Tosaporn; Elliott, George; Gordon, Mark S.; Guidez, Emilie (2024-01-01). "The Effective Fragment Potential: An Ab Initio Force Field". Comprehensive Computational Chemistry: 153–161. doi:10.1016/B978-0-12-821978-2.00141-0. ISBN 978-0-12-823256-9.

(14) ^ Friesner, Richard A. (2005-05-10). "Ab initio quantum chemistry: Methodology and applications". Proceedings of the National Academy of Sciences. 102 (19): 6648–6653. doi:10.1073/pnas.0408036102. ISSN 0027-8424. PMC 1100737. PMID 15870212.

(15) Jump up to:<sup>a</sup> <sup>b</sup> Hinchliffe, Alan (2001). Modelling molecular structures. Wiley series in theoretical chemistry (2nd, reprint ed.). Chichester: Wiley. ISBN 978-0-471-48993-1.

(16) S, D R Hartree F R (1947-01-01). "The calculation of atomic structures". Reports on Progress in Physics. 11 (1): 113–143. Bibcode:1947RPPh...11..113S. doi:10.1088/0034-4885/11/1/305. S2CID 250826906

(17) Cramer, C.J. Essentials of Computational chemistry. Theories and Models. Second Edition (2004). England.

(18) BOOK 1

(19) Counts, Richard W. (1987-07-01). "Strategies I". Journal of Computer-Aided Molecular Design. 1 (2): 177–178. Bibcode:1987JCAMD...1..177C. doi:10.1007/bf01676961. ISSN 0920-654X. PMID 3504968. S2CID 40429116.

(20) Dinur, Uri; Hagler, Arnold T. (1991). Lipkowitz, Kenny B.; Boyd, Donald B. (eds.). Reviews in Computational Chemistry. John Wiley & Sons, Inc. pp. 99–164. doi:10.1002/9780470125793.ch4. ISBN 978-0-470-12579-3.

(21) Paredes-Doig. A.L. (2020) The interaction of metallic ions onto activated carbon Surface using computational cehmistry software. Adsorption Science and Technology Journal.

(22) Paredes-Doig, A.L. (2016) Modelamiento computacional de la adsorción de dimetilamina sobre carbones activados preparados a base de semillas de aguaje. XXVIII Congreso Interamericano de Ingeniería Química Cusco Perú.

- (23) Paredes-Doig, A.L. A Study of the Adsorption of Aromatic Compounds Usinf Activated Carbons Prepared from the Chesnut Shell (2014). Adsorption Science and Technology Journal.
- (24) *Bignon, Emmanuelle; Monari, Antonio* (2024-01-01). “Molecular Dynamics and QM/MM to Understand Genome Organization and Reproduction in Emerging RNA Viruses”. *Comprehensive Computational Chemistry*: 895–909. doi:10.1016/B978-0-12-821978-2.00101-X. ISBN 978-0-12-823256-9. S2CID 258397837.
- (25) Ávila, P.; Barbero, B.; Bustamante, F.; Cadús, L.; Coronado, J.M.; Garetto, T.; Legorburu, I.; Montes, M.; Morales, M.; Orozco, N.; Picasso, G.; Sambeth, J.; Sánchez, B.; Sepúlveda, A.; Silvestre, J.; Suárez, S.; Sun Kou, M.(2008) Eliminación de emisiones atmosféricas de COVs por catálisis y adsorción. Cooperación Iberoamericana, Argentina.
- (26) A. Malloum. (2023) Computational methods for adsorption study in wastewater treatment. *Journal of Molecular Liquids*. 390, 123008.
- (27) A.D. Becke, Density-functional thermochemistry. III. The role of exact exchange, *J. Chem. Phys.* 98 (7) (1993) 5648–5652, <https://doi.org/10.1063/1.464913>.
- (28) P.J. Stephens, F.J. Devlin, C.F. Chabalowski, M.J. Frisch, Ab Initio calculation of vibrational absorption and circular dichroism spectra using density functional force fields, *J. Phys. Chem.* 98 (45) (1994) 11623–11627, <https://doi.org/10.1021/j100096a001>.
- (29) 6.T. Depci. (2014) Apricot Stone activated carbons adsorption of cyanide as revealed from computational cehmistry análisis and experimental study. *Journal of the Taiwan Institute of Chemical Engineers*, 45, 2511-2517.
- (30) Menéndez, A. Tipos de carbonos. Fecha de consulta: Junio del 2010. <http://www.oviedo.es/personales/carbon/estructuras.htm>.

**CLEISEANO EMANUEL DA SILVA PANIAGUA** - Técnico em Química pelo Colégio Profissional de Uberlândia (2008), Bacharel em Química pela Universidade Federal de Uberlândia (2010), Licenciado (2011) e Bacharel em Química Industrial (2023) pela Universidade de Uberaba (UNIUBE), em Ciências Biológicas (2021) e em Física (2022) pela Faculdade Única de Ipatinga (FUNIP). 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 do Estado de São Paulo (FAMEESP) em 2024. 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 cursou o segundo estágio (2022-2024) 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. Atuou como técnico em laboratório/Química pelo Instituto Federal de Goiás (2010-2022), químico e responsável técnico pelos laboratórios da Unicesumar/Polo Patrocínio e professor do SENAI de Minas Gerais e Goiás. Atualmente é professor de química do Colégio Militar do Tocantins em Araguaína/TO. 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 90 e-books e publicou 43 capítulos de livros nas diferentes áreas de Ciências da Natureza, Engenharia Química e Sanitária/Ambiental, Meio ambiente dentre outras áreas.

**A**

- Activated carbons* 41, 46, 49  
*Adsorbate-adsorbent* 40  
*Adsorption process* 39, 40, 47  
Água destilada 3, 9, 28, 29  
Álcool vegetal 9, 11, 12  
Apolares 3, 5, 12  
Aroma 8, 9, 10, 12, 14

**C**

- Calorimetria diferencial exploratória (DSC) 20, 22, 29  
Ceras 12, 14  
*Chemisorption* 41, 46, 47  
Cidadãos conscientes 2  
Computational chemistry 39, 40, 41, 42, 44, 46, 47, 48, 49  
Conhecimento científico 1, 2  
Contaminants 39, 40, 47  
Cosméticos 2, 7, 8, 9, 12, 14, 25  
Curículo 1, 7

**D**

- Density Functional Theory* (DFT) 42

**E**

- Educação básica 1, 5  
Espectroscopia no infravermelho (FTIR) 20, 22, 33  
Evaporação 10, 29  
Experimentação 2, 2, 4, 5, 6

**G**

- Gases de Efeito Estufa 21  
Glicerina 14, 18  
Gorduras 14, 19  
Grafeno 2, 20, 21, 22, 25, 26, 27, 28, 29, 33, 34, 37

**I**

Instrumentos artesanais 7

**K**

Kyphi 8, 9

**M**

Manteiga 15, 16, 18

Meio ambiente 21, 50

Métodos artesanais 7, 9

Microscopia Eletrônica de Varredura (MEV) 20, 22, 29, 31, 32, 33

*Monte Carlo simulation* 39

**N**

Nanocompósitos 2, 20, 21, 22, 29, 30, 32, 33, 34

**O**

Óleos essenciais 9, 10, 11, 12, 17

Óxido de grafeno (OG) 2, 20, 22, 27, 33, 34, 37

**P**

Perfumes 7, 8, 9, 11, 12, 13, 18, 19

*Physisorption* 41

Pirâmide olfativa 10, 12, 17

Polares 3, 5

Polietileno Tereftalato (PET) 2, 20, 21, 23, 24, 29

Polímeros 21, 22, 24, 25, 35, 37

Prática experimental 2

Processo de enfleurage 8

Propilenoglicol 9

Propriedades organolépticas 9

**Q**

Química 1, 2, 1, 2, 3, 4, 5, 6, 8, 9, 11, 19, 20, 21, 24, 25, 27, 28, 29, 33, 37, 39, 48, 50

**R**

Recurso metodológico 2

Resíduos plásticos 23, 34

## S

- Sesquiterpenos 9
- Situações-problema 4
- Surface chemistry* 41

## T

- Termoplásticos 21
- Terpenos 9, 10, 19

## V

- Van der Waals forces* 41

## W

- Wastewaters* 39



# QUÍMICA EM AÇÃO

desvendando os segredos da matéria

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



# QUÍMICA EM AÇÃO

desvendando os segredos da matéria

---

- 🌐 [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)