

Por dentro do IQ Melhor tese de 2011, em Química

Ex-aluna de doutorado do Programa de Pós-Graduação em Química do IQ e hoje professora do Departamento de Química Orgânica deste Instituto, Bárbara Vasconcellos da Silva teve o seu trabalho - "Síntese de ferroceniloxindóis e o estudo da clora-

ção de derivados da isatina com ácido tricloroisocianúrico", defendido em 2010 - escolhido pela CAPES como a Melhor Tese de 2011, na categoria de Química.

Nesta entrevista ao INFORMATIVO -IQ ela falou dos desafios na sua pesquisa e das satisfações na carreira. **LEIA MAIS**



Defesas de junho

Monografias, dissertações e teses. **LEIA MAIS**. pág. 5

Outros destaques

- TCheminRio

- O que é saibro? De onde ele vem?

Toda Mídia

Olimpíada pública de matemática já reúne 90% dos alunos aptos

Em 15/8, a 8ª Olimpíada Brasileira de Matemática das Escolas Públicas (OBMEP) divulgará os classificados para a sua segunda fase. Este ano, o Encontro registrou 19,1 milhões de inscrições de estudantes dos ensinos Médio e Fundamental provenientes de mais de 46,5 mil escolas. Elas estão espalhadas por 99,42% municípios brasileiros. A OBMEP é patrocinada pelo MEC, MCTI, além do Instituto Nacional de Matemática Pura e Aplicada (IMPA). **LEIA MAIS**



Bolsas no exterior confundem cientistas

Crítérios de seleção, divulgação dos resultados e origem dos recursos do "Ciência sem Fronteiras" são as maiores dúvidas levantadas pelos cientistas. **LEIA MAIS**

IPG entrega Prêmio Capes de Tese 2011 nas categorias Química, Matemática e Física

O Instituto Paulo Gontijo (IPG) entregou em 11/7, em Brasília, o Prêmio CAPES de Tese 2011. Na categoria Química, a vencedora foi Bárbara Vasconcellos da Silva, do IQ, com o trabalho "Síntese de ferroceniloxindóis e o estudo da cloração da isatina com ácido tricloroisocianúrico". O prêmio é uma parceria do IPG e da Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior (CAPES/MEC) com o Instituto Conrado Wessel. **LEIA MAIS**

Cientista brasileiro precisa de ajuda para gerar patente

Benoit Battistelli, presidente do Escritório Europeu de Patentes (EPO), acredita que um dos problemas enfrentado pelo inventor brasileiro ao patentear o seu produto ainda está na redação do pedido junto ao INPI (Instituto Nacional da Propriedade Industrial). **LEIA MAIS**

Matemática é pedra no caminho tecnológico

Falta de capacitação da mão de obra, em particular na matemática, reduz quantidade de profissionais que podem ser contratados, em diversos setores. **LEIA MAIS**

Agenda

- ❑ - Encontro Internacional de Educação Não Formal e Formação de Professores, em 11-13/7. Local: Museu de Astronomia e Ciências Afins/MAST (rua General Bruce, 586 - São Cristóvão). Informações: www.mast.br
- ❑ - IVª Escola Avançada de Óptica e Fotônica (4ª EAOF), em 16-19/7. Local: anfiteatro Horácio Paneucci (IFSC/ USP São Carlos). Informações: <http://www.osa.ifsc.usp.br/eaof4/>
- ❑ - V Escola Temática em Química/ Síntese Orgânica, em 17-19/7. Local: auditório Roxinho/ CCMN. Informações: <http://www.pgqu.net/escolatematica/>
- ❑ - XVI Encontro Nacional de Ensino de Química (XVI ENEQ), em 17-20/7. Local: UFBA, campus de Ondina (Salvador). Informações: <http://www.eneq2012.qui.ufba.br/>
- ❑ - 6ª Escola de Nanociência e Nanotecnologia da UFRJ, em 30/7-3/8. Local: auditório Horta Barbosa/ CT e laboratórios no campus da Cidade Universitária. Informações: <http://www.escolanano.org/>
- ❑ - 4ª International Conference on Green Chemistry, em 25-29/8. Local: Foz do Iguaçu (PR). Informações: <http://www.congresscentral.com.br/sbq/ufscar/icgc4/index.php>
- ❑ - 5º Encontro Nacional de Tecnologia Química, em 26-28/8. Local: Centro de Convenções Ruth Cardoso, Maceió (Alagoas). Tema central: "Tecnologias mais limpas e gestão de resíduos". Informações: <http://www.abq.org.br/entequi/>
- ❑ - 3º Encontro Nacional de Química Forense (III ENQFOR), em 30/9-3/10. Local: Centro de Convenções da Faculdade de Filosofia, Ciências e Letras de Ribeirão Preto (FFCLRP-USP). Informações: http://www.enqfor.com.br/index.php?secao=inscricoes_info_geral
- ❑ - XXXIV Jornada Giulio Massarani de IC, Tecnológica, Artística e Cultural, em 1-5/10. Informações: www.jic.ufrj.br/

Por dentro do IQ



Bárbara Vasconcellos da Silva, Pesquisadora e Professora Adjunta do Laboratório de Produtos Naturais e Transformações Químicas / IQ.

Docente da UFRJ desde 2011. Graduiu-se em Química, com o diploma *Cum Laude*, na UFRJ, em 2007. Obteve o doutorado em Química pela mesma instituição e foi bolsista FAPERJ Aluno Nota 10. Recebeu a "Medalha de Inovação do INCT-INOVAR" e a "Medalha RVq". Participa do Programa de Pós-Graduação em Química da UFRJ orientando três alunos de mestrado. Ela é editora associada da "Revista Virtual de Química", e também co-autora do livro "Experimentos de Química Orgânica". Possui quase duas dezenas de artigos científicos.

Projetos em desenvolvimento na área de Síntese Orgânica e Produtos Naturais, nos quais atua como colaboradora ou coordenadora:

- 1) Síntese de análogos do oxindol sunitinibe - (CNPq);
- 2) Desenvolvimento de produtos com potencial atuação na inibição de incrustações inorgânicas e na inibição de corrosão para aplicação no cenário dos campos do subsal; (CENPES/PETROBRAS)
- 3) Síntese de padrões para biomarcadores (CENPES/PETROBRAS);
- 4) Inventário da flora fluminense: estudos interdisciplinar -(FAPERJ);
- 5) Síntese de medicamentos genéricos - (INCT-INOVAR); e
- 6) Síntese e atividade biológica de novos derivados 5'-(4-*alquil*/aril-1H-1,2,3-triazóis)-isatina via reação do tipo "click".

- **INFORMATIVO IQ** - *A sua tese, "Síntese de ferroceniloxindóis e o estudo da cloração de derivados da isatina com ácido tricloroisocianúrico", ganhou o Prêmio CAPES de Tese 2011. Do que ela trata?*

Bárbara Vasconcellos da Silva - A tese trata da síntese de oxindóis a partir de derivados da isatina e o acoplamento destes oxindóis ao carboxaldeído ferroceno, levando à formação de novos derivados ferroceniloxindóis que foram ativos na inibição da migração de células de câncer de mama humano. Como os ferro-

ceniloxindóis Z substituídos no anel aromático do núcleo oxindólico por átomos de cloro apresentaram bons resultados nos ensaios farmacológicos, foi feito também um estudo das condições de reação mais eficientes para obtenção de cloro-isatinas empregando o ácido tricloroisocianúrico (ATCI) como agente de cloração.

- **IQ** - *Você evidenciou, neste trabalho, um alvo terapêutico com atividade anticâncer. A pesquisa aplicada desenvolvida atualmente nos laboratórios acadêmicos têm atendido às solicitações (cada vez mais numerosas) do mercado? Qual a importância de se fazer/ produzir pesquisa com alvos economicamente mais direcionados?*

BVS- Muitas vezes a pesquisa acadêmica atua como indutora do desenvolvimento industrial, de modo que esta parceria é sempre proveitosa. No meu trabalho de tese, orientado pelo Professor Angelo da Cunha Pinto, demos apenas o primeiro passo na busca de um fármaco, que é a descoberta de uma substância bioati-

va. Os passos seguintes são os testes pré-clínicos e clínicos de fases I, II, III e IV, que são fiscalizados pelos órgãos competentes de cada país. Após a aprovação, são despendidas ainda grandes quantias com o marketing do produto. O processo completo pode custar até bilhões de dólares.

- **IQ** - *O recebimento de um prêmio na carreira do pesquisador é sempre um grande estímulo. Principalmente quando ele é jovem. Qual o significado que o Prêmio CAPES de Tese teve para você, aos 30 anos?*

BVS - Este prêmio, além de enriquecer meu currículo, é um grande incentivo à continuação

dos meus trabalhos e uma grande honra pessoal.

- **IQ** - *Ainda sobre este Prêmio, ele inclui uma bolsa de pós-doutorado ao seu ganhador, para estágio no Brasil ou no exterior. Quais os seus planos neste sentido?*

BVS - O pós-doutoramento é uma grande oportunidade de aprimoramento técnico e pessoal. A vivência no exterior, com certe-

za, pode trazer muito aprendizado. Ainda não tenho um planejamento de estudos no exterior, mas penso em fazê-lo futuramente.

Após completar com sucesso seu doutorado no Instituto de Tecnologia da Califórnia (CALTECH), sob a orientação do Professor William A. Goddard, em 1977, o Professor Marco Antônio Chaer Nascimento teve a opção de construir uma carreira acadêmica nos EUA. Entretanto, ele decidiu retornar ao Brasil para começar um curso de pós-graduação no Departamento de Físico-Química do Instituto de Química, na Universidade Federal do Rio de Janeiro, onde já era professor assistente.

Esta decisão teve um impacto profundo neste Departamento que, muito embora já fosse muitíssimo competente àquela época no ensino de graduação, não possuía qualquer atividade de pesquisa. Mesmo não sendo o primeiro curso de pós-graduação em Físico-Química no Brasil, ele tinha definitivamente um caráter particular, sendo extremamente focado em aspectos fundamentais da Química Teórica e da Espectroscopia, especialidade de outro pesquisador recém retornado do exterior naquela época, o Professor Gerardo Gérson Bezerra de Souza. Assim sendo, tal curso estabeleceu padrões de formação de recursos humanos que inspiraram outros cursos de pós-graduação semelhantes no país. Seus primeiros alunos estão hoje espalhados por quase todo o Brasil, e ainda fora dele.

Tendo consciência da importância de reunir químicos teóricos brasileiros para que apresentassem os resultados de suas pesquisas e discutissem e implementassem ações que viessem a garantir a qualidade dos trabalhos na área, o Professor Chaer deu início, em 1981, juntamente com a Professora Diana Guenzburger, ao Simpósio Brasileiro de Química Teórica. Desde então, este Simpósio acontece a cada dois anos, tendo ocorrido a sua 16ª edição em novembro de 2011. Outras iniciativas semelhantes, como os dois congressos de Modelagem Molecular, também aconteceram sob sua organização.

Todas estas iniciativas, associadas à sua intensa participação em comitês assessores das agências de fomento, certamente muito contribuíram na última década para o reconhecimento da Química Teórica como sub-área de pesquisa independente da Físico-Química por parte de nossas mais importantes agências de fomento federais (CAPES e CNPq).

Resumindo, o Professor Chaer tem contribuído, em muito, para moldar o perfil da pesquisa em Química Teórica no país, participando direta ou indiretamente na formação de muitos estudantes ao longo deste tempo. Hoje, alguns destes têm, inclusive, seus próprios grupos de pesquisa.

Enquanto ele encontra-se ainda trabalhando, sem absolutamente qualquer manifestação de necessidade ou vontade de aposentar-se, alguns de seus antigos alunos e colaboradores decidiram prestar-lhe um tributo no seu aniversário de 65 anos. Certamente, as melhores honras são aquelas recebidas em vida durante o ápice de nossa atividade. Com este espírito, e em nome de todas as pessoas que trabalharam com ele ou foram positivamente por ele influenciadas, tomamos esta oportunidade para fazer uma justa homenagem.

Um volume especial da revista, *Theoretical Chemistry Accounts*, será dedicado a este evento. Ele estará ainda associado ao Congresso Internacional, que ocorreu no Rio de Janeiro, na Casa da Ciência, nos dias 11 e 12/6, intitulado *Theoretical Chemistry in Rio: a meeting to honour the 65th birthday of Professor Marco Antonio Chaer Nascimento* (<http://r1.ufrj.br/tcheminrio>), e que teve a participação de, aproximadamente, 100 inscritos, entre professores e estudantes de graduação e pós-graduação de vários estados do Brasil, além de muitas apresentações orais e palestras de diversos pesquisadores de destaque na área da Química Teórica, de nosso país e de fora dele. (Texto adaptado do prefácio da edição especial do TCA - André Gustavo Horta Barbosa, Clarissa Oliveira da Silva e Márcio Soares Pereira)



Theoretical Chemistry in Rio: a meeting to honour the 65th birthday of Professor Marco Antonio Chaer Nascimento

O que é saibro? De onde ele vem?

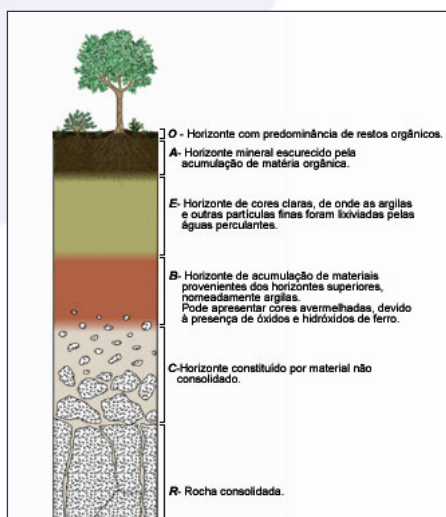
A indústria de construção civil, em função das obras de mobilidade urbana devido à Copa de 2014 e às Olimpíadas de 2016, demandará um volume significativo de saibro. Você sabe o que é o saibro?

O saibro é um produto de alteração rochosa e não um mineral. Para formar o saibro a rocha é constituída, geralmente, dos seguintes minerais: feldspato, quartzo, micas (muscovita e biotita) e granada. Esses minerais são conhecidos como minerais primários que, a partir do intemperismo, resultam na formação de outros minerais como a seqüência: feldspato-caulinita-gibbsita.

É formado a partir do intemperismo físico e químico, por meio da lixiviação do solo, dependendo, no entanto, do tipo de solo e do relevo da região. É um material de granulometria variada sem forma e volume definidos, apresenta densidade média, um pouco menor do que a areia, entre 1,1 e 1,2 t/m³. Ele se situa entre o solo e a rocha e é composto basicamente de argilomineerais, como a caulinita e a gibbsita, e oxi-hidróxido de ferro como limonita, goetita, hematita e magnetita.

Sua exploração é direta, com o uso, somente, de retroscavadeira, considerado um produto de baixo custo. Dentre as indústrias consumidoras destacam-se as de construção civil (53,44%), de aterro (41,55%), de construção/manutenção de estradas (4,94%) e de artefatos de concreto (0,07%).

Em grandes aterros, tem como finalidade a correção do nível do subleito para posterior execução de base e sub-base de pavimento em rodovias, vias urbanas ou acessos. Tem como finalidade suportar e distribuir a carga do tráfego, transferindo-a para as camadas inferiores. Protege



Perfil de solo típico com discriminação dos vários horizontes (adaptado de Press e Siever, 1998 - Fonte: <http://www.dct.uminho.pt/>)

o subleito da ação do intemperismo, principalmente, da ação mecânica da água. Também é utilizado para correção de nível de terrenos e em obras de edificações, pátios e/ou galpões.

Em quadras de tênis proporciona um jogo mais lento, pois as partículas de granulometria variada diminuem, um pouco, a velocidade da bola. O jogo mais lento beneficia os jogadores menos agressivos que ficam mais tempo batendo bolas do fundo da quadra. E estas mesmas partículas fazem com que a movimentação dos jogadores não seja muito precisa, provocando escorregões. Estes escorregões favorecem os jogadores que têm uma estatura menor, pois são bem mais rápidos na movimentação ao mudar de direção.

Entre as cidades de Niterói e São Gonçalo a rocha gnaisse formada por feldspato, quartzo e mica possui um saibro de boa qualidade.

É importante destacar que onde tem obra deve-se ter um saibro de boa qualidade, pois o valor destinado ao transporte não compensa o seu uso. (Professora Fernanda Arruda Nogueira Gomes da Silva – Laboratório de Química de Materiais Avançados - LQMA/IQ)

TRABALHOS DEFENDIDOS EM JUNHO

Curso de Química

- Desenvolvimento de metodologia para determinação de zinco e chumbo em QAV e nafta por ETAAS-GF empregando revestimento de modificadores de matriz. Autora: Nívea Cristina Fernandes Dionysio. Orientadora: Nilce Carbonel Campos da Rocha. Em 12/6.

Mestrado

- Obtenção de biocombustíveis a partir da transesterificação *in situ* de rejeito da indústria de oleaginosa. Autora: Michelle Branco Ramos. Orientadora: Rosane Aguiar da Silva San Gil. Programa em Química. Em 29/6.

- Estresse oxidativo em militares do exercício brasileiro submetidos a um exercício físico intenso. Autor: Márcio Antônio de Barros Sena. Orientadores: Marcos Dias Pereira e Josely Correa Koury. Programa em Bioquímica. Em 28/6.

- Estudo da síntese de oligo etinilantreno. Autor: Federico Alberto Barreiro Villamarin. Orientador: Simon John Gardén. Programa em Química. Em 27/6.

- Efeito da pasteurização, liofilização e métodos de conservação sobre a capacidade antioxidante do leite humano. Autora: Danúbia Incutto Silva. Orientadores: Alexandre Guedes Torres e Fernanda Kamp. Programa em Ciência de Alimentos. Em 25/6.

- Efeito dos métodos de preparo e da granulometria do café sobre os teores de ácidos clorogênicos e a preferência do consumidor. Autora: Izaura Pereira Nas-

cimento Bastos. Orientadora: Adriana Farah de Miranda Pereira. Programa em Ciência de Alimentos. Em 19/6.

- $\text{SiO}_2/\text{Nb}_2\text{O}_5/\text{ZnO}$ obtido pelo processo sol-gel: um novo material para imobilização de protoporfirina IX para um possível uso em terapia fotodinâmica. Autora: Marcela Betta Olímpio do Nascimento. Orientadores: Emerson Schwingel Ribeiro e Rodrigo José Correa. Programa em Química. Em 15/6.

- Análise de esteróides endógenos por espectrometria de massas por razão isotópica: otimização do método de fracionamento através de planejamento de experimentos. Autora: Ana Letícia de Mattos Goulart. Orientador: Henrique Marcelo Gualberto Pereira. Programa em Química. Em 13/6.

- Caracterização de filmes finos de nanocompósitos de poli (anilina) e nanotubo de carbono através da técnica de dessorção iônica. Autora: Francini Rodrigues Orçai. Orientadora: Maria Luiza Rocco Duarte Pereira. Programa em Química. Em 13/6.

- Produção de aditivos multifuncionais para biodiesel a partir de glicerina. Autora: Renata Jorge da Silva. Orientador: Claudio José de Araújo Mota. Programa em Química. Em 4/6.

Doutorado

- Desenvolvimento de método de análise de pterinas em fluidos biológicos para diagnóstico diferencial de hiperfenilalaninemias. Autora: Gabriella Allegri

Machado. Orientadores: Francisco Rader de Aquino Neto e Fernanda Bertão Scalco. Programa em Química. Em 28/6.

- Fotoabsorção e fragmentação iônica na borda 2p do enxofre das moléculas dimetilssulfeto (DMS) e dimetildissulfeto (DMDS). Autor: Rafael Berrelho Bernini. Orientador: Gerardo Gerson Bezerra de Souza. Programa de Química. Em 27/6.

- Análise da diversidade microbiana de grãos de kefir, caracterização da bebida fermentada e potencial probiótico das estirpes isoladas. Autora: Anely Machado de Oliveira Leite. Orientadores: Vânia Margareth Flosi Paschoalin e Joab Trajano Silva. Programa em Ciência de Alimentos. Em 25/6.

- Desenvolvimento e validação de metodologia analítica por CLAE-UV para análise de fitoterápicos, chás e extratos alcoólicos de amostras comerciais de paupereira (*G.vellosii*). Autora: Márcia Rosa de Almeida. Orientadores: Angelo da Cunha Pinto e Jussara Pinheiro Barbosa. Programa em Química. Em 19/6.

- Estudo de primeiros princípios da adsorção do imidazol sobre as superfícies de ferro e óxido de ferro atuando como inibidor de corrosão. Orientadores: Alexandre Braga da Rocha e Edilson Clemente da Silva. Programa em Química. Em 15/6.

EXPEDIENTE

Informativo IQ

Informativo eletrônico de responsabilidade da Direção do Instituto de Química da UFRJ

Diretora: Cássia Curan Turci (cassia@iq.ufrj.br); Vice-Diretor: Joab Trajano Silva (joab@iq.ufrj.br)

Jornalista responsável: Christina Miguez (MTb 13.058). Estagiária em Programação Visual: Stefani Peixoto (Escola de Belas Artes /UFRJ).

Envie suas dúvidas, colaborações, informes, pautas e sugestões para o INFORMATIVO IQ através do e-mail imprensa.assessoria@iq.ufrj.br

Instituto de Química: prédio do CT – Bloco A - 7º andar. Ilha da Cidade Universitária – Cidade Universitária – CEP 21.941-590. Tel.: (21) 2562-7261.

O INFORMATIVO IQ não se responsabiliza pelo conteúdo dos links externos indicados, na medida em que os conceitos e as opiniões emitidas não representam conceitos e opiniões dos editores e da direção do Instituto de Química da UFRJ.