

O Colóquio do Departamento de Química Fundamental acontece todas as quarta-feiras às 16:00 hs no Auditório Prof. Benício de Barros Neto.

12 de Dezembro - Prof. Friedrich Demnitz, Diretor Científico da Neurosearch, Dinamarca

Antagonismo de canais de potássio de condutância intermediária como novo conceito terapêutico para doenças auto-imunas e inflamatórias.

30 de Novembro - Prof. Ricardo Longo, DQF, UFPE

Sobre problemas com algumas teorias, modelos e conceitos em Química

As teorias estatísticas (teoria do estado de transição e/ou coordenada de reação intrínseca) utilizadas na descrição de mecanismos de reações podem apresentar falhas. Por exemplo, em reações de cicloadição [4+2] ou Diels-Alder, em eliminação de água em álcoois protonados, e em alquinitratos + nucleófilos (SN2@C, SN2@N e E2), mostraremos que os efeitos dinâmicos são determinantes para os seus mecanismos. Os modelos orbitais serão analisados e aplicados na descrição de propriedades espectroscópicas e ligações químicas. A dicotomia entre orbitais deslocalizados e localizados será abordada e uma proposta que permite interações entre os orbitais será apresentada para conciliar as contradições. O conceito de tempo de vida é fundamental na caracterização fotofísica de moléculas e materiais, pois é intrínseco ao sistema. Entretanto, apresentaremos resultados em que os tempos de vida de

emissão em complexos com Eu(III) são dependentes do comprimento de onda de excitação. Esta aparente contradição pode ser resolvida com sistemas de equações de taxa com 3-, 4- e 7-níveis, quando o conceito de tempo de vida é empregado corretamente.

23 de Novembro - Prof. Gauss Cordeiro, DE, UFPE

Proposta da nova administração da UFPE.

16 de Novembro - Prof. James J. P. Stewart, Stewart Computational Chemistry

Past, Present and Future of Semiempirical Methods

09 de Novembro - Prof. Oscar L. Malta, DQF, UFPE

Primeira Observação Experimental Direta de Taxas de Transferência de Energia Intramolecular em Complexos de Európio Trivalente: Confirmação da Modelagem Teórica.

26 de Outubro - Prof. Marco A. Sacilotti, Colaborador Facepe/CNPq - DF, UFPE, Université de Bourgogne, France

A Trajetória Científica do Professor Benício de Barros Neto: Dos Tensores Polares à Quimiometria.

Apresentaremos neste seminário a implantação da técnica MOCVD no DF-UFPE. Discutiremos os crescimentos de nanoestruturas e os modelos dos mecanismos de crescimento destas estruturas. Apresentaremos vários tipos de crescimentos de nanofios, nanomembranas, nanoarvores e nanoheteroestruturas. Vários tipos de aplicações em sistemas fotovoltaicos (separação de cargas elétricas) serão igualmente abordados neste seminário. Estes crescimentos e aplicações visam também a nanofotônica e a mescla de técnicas de crescimento, para a obtenção de dispositivos ópticos nanoestruturados. Serão apresentadas também várias técnicas de caracterizações em colaboração com o CETENE e ICB-Université de Bourgogne-Dijon-França.

19 de Outubro - Prof. Roy Edward Bruns, IQ, UNICAMP

A Trajetória Científica do Professor Benício de Barros Neto: Dos Tensores Polares à Quimiometria.

****Excepcionalmente segunda-feira às 16:00 horas****

10 de Outubro - Prof. Arthur J. Olson, The Scripps Research Institute, La Jolla, CA, USA

Challenges and Opportunities for Computational Docking in Structure based Drug Design.

With the rapid increase in atomic resolution structural characterization of biological molecules and the continued Moore's Law growth of computational capabilities, the promise of structure-based rational drug design approaches general practicability. However, there remain important challenges that must be faced in using these data and applying computational technologies in an effective and reliable manner in the drug design pipeline.

In this lecture I will discuss some of the challenges that exist, including; location and characterization of druggable sites on targeted proteins; representation of the flexibility and variation of protein targets, efficient computational screening large libraries of compounds against drug targets, and accounting for waters important in ligand binding. I will discuss these challenges in the context of several projects being undertaken in my laboratory, including: resistance-driven design of HIV therapeutics and control of oncogene expression through protein assembly stabilization.

I will present some of the methodological and technical approaches that we are using and developing to aid our progress in facing the above challenges, including: our recently developed AutoDock Vina program, to accelerate the process of ligand docking; our AutoLigand program to find and characterize new binding sites; the relaxed complex method to represent protein flexibility in the docking process; massive computational screening in our Internet distributed FightAIDS@Home project; and our new hydrated docking methodology.

21 de Setembro - Doutorando em Química Rodrigo José de Oliveira, PPG-Química, UFPE

Surfactantes Fotorreativos para Síntese de Nanoestruturas

Neste seminário discutiremos alguns dos resultados obtidos em recente estágio sandwich de doutorado em Bristol – Reino Unido, sob supervisão do Prof Julian Eastoe além do Prof André Galembeck. Este trabalho figurou como artigo recentemente em Langmuir, sendo destaque no boletim online "Noteworthy Chemistry" da ACS, além de ser apresentado de forma oral na ACS Colloids Meeting. Uma nova classe de surfactantes fotorreativos (PRS) é apresentado aqui,

sendo estes anfífilos que também podem atuar como reagentes em reações fotoquímicas. Um exemplo é o 2-ethylhexanoato de cobalto (Co(EH)₂), que forma micelas invertidas (RMs) em um solvente hidrocarboneto, bem como micelas mistas invertidas com o surfactante padrão Aerosol-OT (AOT). Dados de espalhamento de nêutrons a baixo ângulo (SANS) mostram que micelas invertidas mistas AOT/PRS têm uma estrutura semelhante em tamanho e forma esférica às micelas pura de AOT. Excitação da banda de transferência de carga ligante-metal (LMCT) no PRS promove a transferência de elétrons do head-group para contra-íons metálicos associados, levando à geração de nanopartículas de metal e óxido metálico dentro das RMs. Este trabalho apresenta a prova do conceito para o emprego de PRS como precursores para obter nanopartículas inorgânicas “monodispersas” : aqui tanto NPs Co₃O₄ e Bi foram sintetizados em altas concentrações de metais (10⁻² M), simplesmente irradiando as micelas invertidas. Estes resultados apontam para uma nova abordagem de obtenção de nanomateriais utilizando estruturas auto-organizadas fotoreativas, uma rota “limpa” e simples para geração de materiais.

21 de Setembro - Prof. Eduardo Padrón Hernández, DF, UFPE

Arranjos Magnéticos Extensos: Fabricação e Propriedades

Este trabalho tem o objetivo de relacionar as características microestruturais com as propriedades magnéticas em arranjos de nanofios ordenados depositados em membranas porosas de óxido de alumínio. Inicialmente é apresentado um estudo sobre a preparação das membranas e a posterior eletrodeposição dos fios no interior dos poros. A seguir são descritas as características morfológicas e microestruturais destes sistemas a partir de imagens de microscopia eletrônica e mapas de energia dispersiva. Um estudo sobre as propriedades magnéticas dos arranjos, a partir das curvas de magnetização e de ressonância ferromagnética em função do ângulo de aplicação do campo externo, mostra o caráter uniaxial da anisotropia magnética destes sistemas e o predomínio das interações desmagnetizantes. Como tentativa para relacionar propriedades magnéticas e estrutura cristalina, se apresenta um modelo baseado em cadeias de elipsóides, baseado no caráter policristalino dos nanofios e fundamentado em trabalhos existentes na literatura. Se apresentara ademais uma perspectiva dos trabalhos próximos.

14 de Setembro - Prof. André Galembeck, DQF, UFPE e CETENE

Inovação Tecnológica: Difusão e Desenvolvimento

O CETENE, Centro de Tecnologias Estratégicas do Nordeste, é uma Unidade de Pesquisa do Ministério da Ciência e Tecnologia e Inovação(MCTI) voltado para o desenvolvimento e transferência de tecnologias em âmbito regional. A missão institucional do Centro é desenvolver, introduzir e aperfeiçoar inovações tecnológicas que tenham caráter estratégico para o desenvolvimento econômico e social do Nordeste brasileiro, promovendo cooperações baseadas em redes de conhecimento e nos agentes da economia dentro de suas áreas de atuação: Biotecnologia, Microeletrônica e Nanotecnologia. Serão apresentadas as principais linhas atuação do CETENE, com abordagem nas atividades de pesquisa, prestações de serviços tecnológicos, P&D em cooperação com empresas e articulação de redes, além dos mecanismos para interação com o setor produtivo, que tem sido realizadas com o objetivo de constituir um centro de referência em C,T&I.

****Excepcionalmente quinta-feira às 16:00 horas****

08 de Setembro - Prof. Christian Griesinger, Dept. for NMR-based Structural Biology, Max-Planck Institute for Biophysical Chemistry, Göttingen, Germany

NMR for small molecule configuration, drug screening and neurodegeneration.

NMR spectroscopy is especially suited for the investigation of structurally heterogeneous systems. In the presentation, several avenues towards the characterization of such disordered molecules will be given. First, the combination of NMR spectroscopy employing anisotropic parameters such as residual dipolar couplings and residual chemical shift anisotropies will be demonstrated in combination with chiroptical methods to provide absolute configurations of non-crystallizable molecules whose structures can only be described by ensembles (1). In a second part of the talk, the application of NMR methods for the characterization of complex structures between small molecules and their target proteins will be presented. Some insight for challenging molecules such as microtubule binders will be discussed and comparisons with scattering techniques will be made (2). Finally, targeting of intrinsically disordered proteins with small molecules will be presented that have been found by screening and further optimization with medicinal chemistry. These molecules interfere with aggregation and therefore have a

beneficial effect in animal models of the disease. A multitude of biophysical techniques will be used in order to characterize the mode of action of these small molecules (3).

(1) H. Sun, U. M. Reinscheid, E.L. Whitson, C. Ireland, A. Navarro-Vázquez and C. Griesinger: The challenge of large scale motion for RDC analysis of configuration: the case of fibrosterol sulfate A, *J. Am. Chem. Soc.* in press, 17, 1811-17 (2011); H. Sun, E. J. d'Auvergne, U. M. Reinscheid, L. C. Dias, C. Kleber Z. Andrade, R. Oliveira Rocha and C. Griesinger: Bijvoet in Solution Reveals Unexpected Stereoselectivity in a Michael Addition, *Chem. Eur. J.* 17, 1811-17 (2011); U. M. Reinscheid, M. Köck, C. Cychon, V. Schmidts, C. M. Thiele and C. Griesinger: The Absolute Configuration of Dibromopalau'amine *Eur. J. Org. Chem.* 36, 6900–6903 (2010); Schuetz, A., Murakami, T., Takada, N., Junker, J., Hashimoto, M., Griesinger, C: Rdc-enhanced NMR Spectroscopy in Structure Elucidation of the Natural Product Sucroneolambertellin. *Angew. Chem. Int. Ed.* 47, 1-4. (2008); Schuetz, A., Junker, J., Leonov, A., Lange, O., Molinski, T. F., Griesinger, C. (2007): Stereochemistry of Sagittamide A from Residual Dipolar Coupling enhanced NMR. *J. Am. Chem. Soc.* 129 (49), 15114-15115; Haberz, P., Farjon, J., Griesinger, C. (2005) The First DMSO Compatible Orientating Medium: Towards the Investigation of the Stereochemistry of Natural Products, *Angew. Chem.* 117, 431-433(2005), *Angew. Chem. Int. Ed.* 44, 427-429

(2) Bartoschek, S., Klabunde, T., Defossa, E., Dietrich, V., Stengelin, S., Griesinger, C., Carlomagno, T., Focken, I., and K.U. Wendt: Drug Design for G-Protein-Coupled Receptors by a Ligand-Based NMR Method. *Angewandte Chemie International*, 49, 8, 1426-1429, (2010); Orts, J., Tuma, J., Reese, M., Grimm, S K., Monecke, P., Bartoschek, S., Schiffer, A., Wendt, K. U., Griesinger, C., Carlomagno, T.: Crystallography-independent determination of ligand binding modes, *Angew. Chem. Int. Ed.* 47, 7736-40 (2008); Reese, M., Sánchez-Pedregal, V. M., Kubicek, K., Meiler, J., Blommers, M. J. J. Griesinger, C., Carlomagno, T. (2007). Structural Basis of the Activity of the Microtubules Stabilizing Agent Epopthilone studied by NMR Spectroscopy in Solution, *Angew. Chem. Int. Ed.* 46, 1864-8; Sánchez-Pedregal, V. M., Reese, M., Meiler, J., Blommers, M. J. J., Griesinger, C., Carlomagno, T. (2005) The INPHARMA Method: Protein Mediated Interligand NOEs for Pharmacophore Mapping, *Angew. Chem.* 117, 2-4 *Angew. Chem. Int. Ed.* 44,2-4

(3) Fernandez, C. O., Hoyer, W., Zweckstetter, M., Jares-Erijman, E. A., Subramaniam, V., Griesinger, C., Jovin, T. M. (2004) NMR of α -synuclein complexes with polyamines elucidates aggregation kinetics, *EMBO J* 23, 2039-2046; Bertoncini, C. W., Jung, Y. S., Fernandez, C. O., Hoyer, Griesinger, C., Jovin, T. M., Zweckstetter, M. (2005) Release of long range tertiary interactions potentiates aggregation of natively unstructured α -synuclein, *Proc. Natl. Acad. Sci. USA* 102, 1430-1435; R. M. Rasia, R. M., C.W. Bertoncini, C. W., D. Marsh, D., W. Hoyer, W.,

D. Cherny, D., M. Zweckstetter, M., C. Griesinger, C., T.M. Jovin, T. M., Fernandez, C. O. (2005) Structural characterization of copper (II) binding to a-synuclein: New insights into the Bioinorganic Chemistry of Parkinson's disease Proc. Natl. Acad. Sci. USA 102, 4294-4299; Bernado, P., Bertoncini, C.W., Griesinger, C., Zweckstetter, M., Blackledge, M. (2005) Defining long-range order and local disorder in native alpha-synuclein using residual dipolar couplings. J Am Chem Soc. 127(51) 17968; Binolfi, A., Rasia, R. M., Bertoncini, C.W., Ceolin, M., Zweckstetter, M., Griesinger, C., Jovin, T. M., Fernández C. O. (2006) Interaction of a-Synuclein with Divalent Metal Ions Reveals Key Differences: A Link between Structure, Binding Specificity and Fibrillation Enhancement. J. Am. Chem. Soc. 128 (30): 9893-9901; Bertoncini, C.W., Rasia, R. M., Lamberto, G. R., Binolfi, A., Zweckstetter, M., Griesinger, C., Fernandez, C. O. (2007) Structural characterization of the intrinsically unfolded protein a-synuclein, a natural negative regulator of a-synuclein aggregation". J. Mol. Biol. 327 (3), 708-722; P. Karpinar, M. Babu Gajula Balija, S. Eimer, S. Kügler, B. H. Falkenburger, G. Taschenberger, F. Opazo, H. Heise, D. Riedel, L. Fichtner, A. Voigt, G. H. Braus, M. Baldus, A. Herzig, H. Jäckle, J. B. Schulz, C. Griesinger, M. Zweckstetter, "Structure based pre-fibrillar a-synuclein variants increase toxicity in Parkinson's Disease models", EMBO J 28, 3256-3268 (2009); "New drugs for inhibiting aggregation of proteins involved in diseases linked to protein aggregation and/or neurodegenerative diseases." EP 08010458.1; submitted: 09.06.08; WO 2010/000372 A2, Jan. 7. 2010; Giese, Bertsch, Habeck, Wagner, Weber, Kretzschmar, Hirschberger, Tavan, Geissen, Groschup, Griesinger, Leonov, Ryazanov

31 de Agosto - Prof. Thereza A. Soares, Dept. de Química, UFPE

Engineering of Protein-based Scaffolds

****Excepcionalmente terça-feira às 11:00 horas****

30 de Agosto - Prof. Cláudio Luis Donnici, Dept. de Química, UFMG

Química & síntese na UFMG: Criando estruturas e construindo moléculas para um mundo melhor

24 de Agosto - Prof. Abraham Sicsu, Pesquisador da Fundação Joaquim Nabuco

Perspectivas de Novos Negócios em Cadeias Produtivas Seleccionadas do Recife: contribuição da Inovação Tecnológica

18 de Agosto - Prof. Marco Sacilotti, Université de Bourgogne, França

Transições Ópticas de Interface e Separação de Cargas Elétricas em Materiais Inorgânicos e Orgânicos

Uma pergunta intrigante: porque as plantas são verdes? Os cientistas ainda não sabem a resposta a esta pergunta. Os processos fotossintéticos, como a fotossíntese, são aceitos/explicados pelos cientistas e são baseados em separação de cargas elétricas (e^- , h^+ , que se atraem), após absorção de fótons solares. Este aspecto de separação das cargas elétricas não é razoavelmente explicado pela ciência. Estaremos, nesta palestra, mostrando alguns aspectos, do ponto de vista de um físico experimental, como e porque as explicações dos processos fotossintéticos naturais e artificiais não representam mecanismos e entidades físicas corretas. Na verdade, o modelo atual do mecanismo da fotossíntese (Th. Forster e outros) não respeita entidades físicas. Em consequência, mostraremos que os modelos atuais desrespeitam as leis da física. Mostraremos as ferramentas necessárias para tal efeito físico de

separação de cargas elétricas : a existência do campo elétrico e a energia despendida, baseado na engenharia de bandas de energia, utilizadas em semicondutores e óxidos. Os estudos ópticos de transmissão, absorção e reflexão em folhas/plantas apresentam dados curiosos há décadas: as folhas não poderiam ter vida longa em dias ensolarados (de países tropicais ou equatoriais) se não existirem mecanismos físicos/ópticos rápidos energia solar absorvida (fótons). Apresentaremos um modelo físico (que existe) que explica vários destas deficiências relacionadas à fotovoltaicos “separação de cargas”, sem violar leis da física. Estamos propondo que o verde das arvores seria majoritariamente uma emissão e não uma reflexão, como sustentado na literatura. Estamos associando esta “emissão verde” à energia gasta para separar cargas elétricas nos processos fotovoltaicos. Um grupo de pesquisa chinês mostrou que, “dopando” uma planta com nanopartículas de ouro, pode-se mudar a cor das folhas desta. Sendo que, mudando-se o meio onde estão as proteínas, muda-se a cor (emissão?) da planta, qual seria a longevidade dos modelos apresentados nos livros escolares que “culpam” a clorofila pelo verde (refletido!) da cor das nossas florestas? Estaremos igualmente apresentando alguns dados sobre FRET (transporte de energia entre moléculas), GFP (proteínas emitindo no verde) e fotovoltaicos artificiais, contendo todos alguns problemas intrínsecos e críticos nos mecanismos de transportes (cargas elétricas e energia).

10 de Agosto - Prof. David Antonelli, Sustainable Environment Research Center, University of Glamorgan, UK

Exploiting the Kubas Interaction in Hydrogen Storage

Hydrogen is the ideal fuel because it contains the most energy per gram of any chemical substance and forms water as the only byproduct of consumption. However storage still remains a formidable challenge because of the thermodynamic and kinetic issues encountered when binding hydrogen to a carrier. In this study we demonstrate how the principal binding sites in a new class of hydrogen storage materials based on the Kubas interaction can be tuned by variation of the coordination sphere about the metal to dramatically increase the binding enthalpies and performance, while also avoiding the shortcomings of hydrides and physisorption materials, which have dominated most research to date. This was accomplished through hydrogenation of chromium alkyl hydrazide gels, synthesized from bis(trimethylsilylmethyl) chromium and hydrazine, to form materials with low coordinate Cr hydride centers as the principal H₂ binding sites, thus exploiting the fact that metal hydrides form stronger Kubas interactions than the corresponding metal alkyls. This led to up to a six fold increase in storage

capacity at room temperature. The material with the highest capacity has an excess reversible storage of 3.23 wt.% at 298 K and 170 bar without saturation, corresponding to 40.8 kg H₂/m³, surpassing the 2015 DOE goal for volumetric density (40 kg/m³) at a safe operating pressure. These materials possess linear isotherms and enthalpies that rise on coverage, retain up to 100 % of their adsorption capacities on warming from 77 K to 298 K, and have no kinetic barrier to adsorption or desorption. In a practical system these materials would use pressure instead of temperature as a toggle and can thus be used in compressed gas tanks, currently employed in the majority hydrogen test vehicles, to dramatically increase the amount of hydrogen stored, and therefore range of any vehicle.

13 de Julho - Prof. Luiz Carlos Dias, Instituto de Química, UNICAMP

Aventuras na área da síntese total de compostos orgânicos bioativos.

Nesta conferência, discutiremos a posição central da química orgânica, química medicinal e da síntese orgânica para a obtenção de fármacos. Vamos apresentar também os avanços recentes de nosso grupo na área de controle da estereoquímica relativa em sistemas acíclicos e esforços que resultaram na síntese total de produtos naturais e não naturais bioativos, assim como do princípio ativo do Lipitor, medicamento mais vendido no mundo. Também serão apresentados resultados de colaboração com a Organização Mundial da Saúde (OMS) no desenvolvimento de compostos para tratamento de Doença de Chagas.

06 de Julho - Prof. Pedro Luiz Guzzo, Departamento de Engenharia de Minas, UFPE

Sensibilização do quartzo com radiação gama e tratamento térmicos para aplicações em

dosimetria termoluminescente.

Será abordado um procedimento de sensibilização que permite modificar as propriedades luminescentes de cristais de quartzo natural, tornando-os sensíveis às doses de radiação ionizante usualmente empregadas em radiodiagnóstico e radioterapia (mili-Gray). Os mecanismos responsáveis por esta sensibilização serão discutidos em função de impurezas e defeitos

pontuais que atuam como portadores de carga na estrutura do cristal e que podem ser caracterizados por espectroscopias de absorção no ultravioleta-visível, infravermelho-médio e ressonância paramagnética eletrônica. Serão apresentadas algumas propriedades dosimétricas (estabilidade, reprodutibilidade e linearidade da resposta TL em função da dose) medidas com discos de quartzo produzidos nas formas monocristalina e particulada e também com dosímetro comercial.

29 de Junho - Dr. Daniel López Malo, DQF, UFPE

Desenvolvimento de métodos automatizados baseados em multicomutação para a determinação de pesticidas e fármacos em amostras de interesse ambiental com detecção luminescente fotoinduzida

O controle dos produtos das indústrias farmacêutica e agroquímica no meioambiente tem se tornado indispensável nos últimos tempos, devido aos problemas derivados da utilização intensiva e descontrolada dos mesmos. Neste colóquio discutiremos os métodos que temos empregado para a quantificação de analitos, como o de detecção luminescente, quimiluminescência e fluorescência. Estes métodos permitem a detecção de baixas quantidades que se encontram em águas esolotas, que podem ser da ordem de poucas partes por bilhão. Tem sido desenvolvidos processos de fotodegradação como forma limpa e rápida de derivatizar os analitos. Foram otimizados os parâmetros físico-químicos e os parâmetros hidrodinâmicos do sistema. Também foram estudados os possíveis interferentes e como eliminá-los. Finalmente apresentaremos os métodos aplicados a amostras reais.

22 de Junho - Doutorando Miguel Angel Pelagio Flores, Programa de Pós-Graduação em Química, UFPE

Terras Raras: Para que elas servem atualmente e a situação de Quase Monopólio

Os elementos de terras raras tornaram-se indispensáveis em muitas aplicações eletrônicas, ópticas, magnéticas e catalíticas - de iPods aos catalisadores, de geradores de energia eólica aos discos rígidos dos computadores, aos veículos elétricos híbridos, à refrigeração magnética. Uma boa parte das aplicações das terras raras são essenciais para o desenvolvimento de tecnologias limpas, mas a China passou a dominar o mercado nestes vinte anos e hoje comercializa mais de 97% dos compostos de terras raras, a demanda interna e as restrições ambientais fizeram que a China eleve-se o preço e também estabeleceu cotas de exportação, esta situação tem alertado aos principais consumidores de terras raras, Japão e Estados Unidos, juntamente com outros países (entre eles o Brasil) iniciaram gestões internas para retomar sua produção das terras raras e atenuar um pouco esta situação. Neste seminário vamos abordar a importância das terras raras e sobre a situação de quase monopólio da China.

Sobre o Palestrante: *Miguel nasceu na cidade de Pénjamo, Guanajuato, Mexico, e fez bacharelado em Engenharia Química no Instituto Tecnológico de Celaya, Mexico. Posteriormente trabalhou na General Motors México, e em 2008 começou o doutorado em Nanociências e Nanotecnologia no departamento de Materiais Avançados do Instituto Potosino de Investigación Científica y Tecnológica, na cidade de San Luis Potosi, IPICYT –Mexico. Em 2010 ingressou no doutorado no DQF.*

15 de Junho - Prof. Solange Coutinho, Dept. de Design, UFPE

Design em Diálogo

Este colóquio visa explorar as possíveis interações do design com outras áreas do conhecimento. Será apresentado um breve panorama do Design no Brasil e a sua evolução como área de pesquisa, desenvolvimento e inovação no planejamento e configuração de artefatos e sistemas informacionais. Apresentará o cenário atual do ensino, da pesquisa e da extensão em design na UFPE (Recife e Caruaru) de forma a contextualizar os prováveis espaços para articulações futuras.

03 de Junho às 15:00 hs - Colóquio Especial

Prof. Ricardo Brandão, Dept. de Análises Clínicas e Toxicológicas, UFSM

O efeito do disseleneto de difenila sobre a toxicidade induzida por cloreto de mercúrio em camundongos.

O mercúrio (Hg) é um elemento sem função fisiológica no organismo humano, sendo tóxico aos seres vivos. Este metal possui ampla aplicação na indústria e pode causar efeitos deletérios em inúmeros órgãos, como fígado, rins e cérebro, além de causar alterações imunológicas e hematológicas. O estresse oxidativo parece estar envolvido na toxicidade induzida por este metal. O composto disseleneto de difenila (PhSe)₂, o qual é um composto orgânico de selênio, possui inúmeras propriedades farmacológicas, dentre as quais destaca-se a sua ação antioxidante, embora também apresente propriedades tóxicas. Neste colóquio vamos abordar os efeitos toxicológicos e farmacológicos do (PhSe)

²
quando associado ao cloreto de mercúrio (HgCl

²
) em camundongos.

01 de Junho - Prof. Ricardo Oliveira, DQF, UFPE

Metabolômica & Ensino de Química

Os sistemas vivos respondem às ações externas no sentido de restabelecer o equilíbrio. Com isso, há uma mudança no perfil de metabólitos endógenos que pode ser correlacionada com a ação externa. A metabolômica usa ferramentas quimiométricas para identificar essa mudança e associar ao status bioquímico da amostra. Esse conhecimento pode ser utilizado para auxiliar o profissional de saúde no diagnóstico de doenças; na investigação de casos de uso de drogas de abuso; na avaliação de novos fármacos; dentre outros. Neste seminário, apresentaremos as técnicas e ferramentas normalmente utilizadas na metabolômica, bem como os trabalhos que desenvolvemos em parceria com o HC da UFPE visando à construção de modelos metabolômicos para classificação de amostras de urina de pacientes portadores de esteatose hepática ou hepatite viral. Apresentaremos também os trabalhos que estamos iniciando na área de Ensino de Química. Considerando que o ensino de ciências deve ser conduzido no sentido de formar cidadãos socialmente comprometidos e cientificamente alfabetizados, estamos formando um grupo de pesquisa que se propõe a construir estratégias multidisciplinares de ensino aprendizagem usando a “História de Pernambuco” como tema gerador do conhecimento. As estratégias serão construídas sob três pilares: ataque às concepções alternativas; abordagem CTS(A) – Ciência, Tecnologia e Sociedade; e aprendizagem significativa.

**25 de Maio - Prof. Juergen Eckert, Department of Chemistry, University of South Florida
Tampa, USA**

Will Porous Materials be the Hydrogen Storage Medium in your Car's Fuel Tank?

In order for porous materials to be used as media for mobile storage of hydrogen as a fuel, new systems providing for stronger interactions without dissociating H₂ need to be developed. This requires detailed molecular level knowledge of hydrogen binding. However, characterization of H₂ sorption is almost exclusively carried by thermodynamic measurements, which only give average properties for all the occupied sites. Inelastic neutron scattering (INS) spectroscopy probes the hindered rotations of adsorbed hydrogen molecules. The lowest of these transitions may be described as rotational tunneling, and its observation provides extraordinarily fine detail on the interaction of molecular hydrogen with host materials. INS is perhaps the most powerful of the few molecular level techniques available to study H₂ binding, and can be interpreted in a very direct way by computational studies despite the need of accurate potential energy surfaces. Our systematic studies on a large number of porous materials provide detailed information on hydrogen binding strengths, which provide a clear direction for efforts in materials synthesis towards necessary improvements in their H₂ sorption properties as a storage medium.

The work reported herein results from collaborations with many investigators, particularly I. Matanović, P. Georgiev, M. Eddaoudi, A. K. Cheetham, O. Yaghi and their groups.

18 de Maio - Profa. Giovannia Pereira, DQF, UFPE

Estudo Relaxométrico de Diferentes Sistemas Paramagnéticos como Potenciais Agentes de Contraste para Imagem por Ressonância Magnética

Imagem por Ressonância Magnética (IRM) é considerada uma das mais poderosas técnicas não-invasivas de diagnóstico. Devido à baixa sensibilidade da técnica, a investigação de eventos moleculares a nível celular requer uma concentração relativamente elevada de agentes de contraste (ACs) a fim de conseguir um aumento do contraste observado. Sistemas moleculares, nomeadamente quelatos contendo íons gadolínio e mais recentemente nanopartículas paramagnéticas têm uma ampla gama de aplicações como ACs. Nessa palestra, pretende-se mostrar o estudo físico-químico de diferentes sistemas paramagnéticos como potenciais agentes de contraste para IRM.

11 de Maio - Prof. Leandro Helgueira Andrade, Instituto de Química, USP-SP

Reações Enzimáticas de Compostos Orgânicos de Selênio

As enzimas são excelentes catalisadores de inúmeras reações químicas de compostos orgânicos com grande potencial sintético. Apesar desse potencial, os compostos químicos mais estudados são constituídos principalmente de C, H, O, N, S e halogênios. Inspirados pelas importantes características das reações enzimáticas, decidimos nos dedicar à investigação dessas reações com compostos orgânicos de selênio para a preparação de compostos opticamente ativos. Além desse uso de enzimas, elas têm sido utilizadas como alvos moleculares durante o desenvolvimento de novos medicamentos. Isto ocorreu principalmente após a compreensão de sistemas biológicos e o evidenciamento de que enzimas catalisam reações importantes para a sobrevivência de um organismo. Nesta palestra serão apresentadas nossas contribuições referentes ao uso de enzimas (álcool desidrogenases, lipases, transaminases, mono-oxigenases) como catalisadores de reações orgânicas, bem como o uso de compostos de selênio como inibidores de proteases (cisteína proteases e proteassoma).

4 de Maio - Profa. Maryene Alves Camargo, DQF-UFPE

Lantanídeos: Novas perspectivas em Bioinorgânica

Muitas das reações cruciais da vida na terra são catalisadas por metaloenzimas e vários esforços têm se focalizado na preparação e caracterização de “complexos-modelo” que

mimetizem as propriedades espectrais e catalíticas das metaloenzimas. Diante disso, é bastante conhecida a eficiente ação dos íons lantanídeos Ln (III) frente à hidrólise de ésteres de fosfato, apresentando-se como potenciais constituintes no desenvolvimento de nucleases artificiais. As características intrínsecas dos íons Ln (III) os promovem ainda a eficientes sondas moleculares, tornando-se de enorme importância no âmbito do desenvolvimento de eficientes sistemas biomoleculares.

27 de Abril - Prof. Wagner Rodrigues, DF - IEx - UFMG)

Decoração de nanotubos de carbono de parede múltipla com nanocristais semicondutores e o Centro para Microtecnologias e Nanotecnologias - CMINAS

Nanotubos de carbono de parede múltipla foram usados como substrato para a síntese de nanocristais de sulfeto de cádmio e sulfeto de cobre. As rotas para a decoração dos nanotubos com ambos materiais serão discutidas e a produção de filmes de nanotubos decorados será apresentada. O potencial uso desses materiais em dispositivos fotovoltaicos de grande área será avaliado. Apresentaremos também a proposta de criação do CMINAS, um centro para desenvolvimento e industrialização de tecnologias baseadas em nano e microsistemas.

13 de Abril - Prof. Amilton Martins dos Santos, DEQ, USP-SP.

Synthesis of polymer-layered silicate nanocomposites via Pickering emulsion polymerization.

Very recently, a number of groups have shown that waterborne polymer/clay nanocomposite

latexes can be produced in the absence of any conventional surfactant. For instance, Bon et al. reported an efficient method to fabricate polymer latexes armored with Laponite platelets by soap-free miniemulsion polymerization. In this process, referred to as “Pickering polymerization” by analogy with the stabilization of emulsions with inorganic solids, the clays adhere to the surface of the miniemulsion droplets, and stabilize the hybrid particles by forming thereof a protecting armor. In this work, we describe the use of Laponite clay platelets to stabilize high solids content polystyrene and poly(styrene-co-butyl acrylate) latexes produced by conventional emulsion polymerization. Following previous works, poly(ethylene glycol) methyl ether (meth)acrylate macromonomers were used to promote polymer/clay interactions and produce Laponite-armored latexes. The influence of the Laponite content, the nature of the macromonomer as well as the type of initiator on the latex particle size and polymerization kinetics is discussed. In addition, on line calorimetric experiments were performed with the purpose of understanding the influence of Laponite on reaction rate and gain insights into the polymerization mechanism. At last, the thermomechanical properties of the resulting poly(styrene-co-butyl acrylate)/Laponite nanostructured films were investigated by dynamic mechanical analyses while cryo-TEM was used to characterize particle morphology. It was shown that the majority of the clay platelets were placed at the surface of the Laponite-armored polymer latexes. The resulting nanostructured films display enhanced mechanical properties.

30 de Março - Dr. Stanislav Stoyanov, National Institute for Nanotechnology NINT, Theory and Modelling, National Research Council of Canada.

Multiscale modeling for nanotechnology applications: cellulose dispersion, gelation, inhibitor docking and heavy oil processing.

We develop multiscale modeling methodologies aimed at predicting the behavior of multicomponent systems under external conditions, based on combinations of the statistical-mechanical 3D-RISM-KH molecular theory of solvation¹ with quantum mechanics,² molecular mechanics and molecular dynamics³ for the solute macromolecule. In these self-consistent field couplings, the 3D-RISM-KH theory provides accurate description of different solvent systems, solvent mixtures, electrolyte solutions, solvent close to phase transitions, accounts for hydrogen bonding, hydrophobicity, and solvent molecules in cavities of the solute macromolecule. To predict the effect of external conditions on electronic structure, nanochemistry, and photochemistry in solution, we employ the self-consistent field, Kohn-Sham DFT/3D-RISM-KH multiscale method implemented by our group in the Amsterdam Density

Functional (ADF) computational chemistry software,⁴ as well as the orbital-free embedding (OFE) method⁵ we coupled with 3D-RISM-KH for the electron density of a macromolecule in an environment.⁶ We apply these methods to nanotechnology problems:

- Nanocrystalline cellulose (NCC) for green materials. An important challenge in NCC research is to accurately predict the degree and type of surface modifications necessary to achieve dispersion without altering crystallinity and mechanical properties. We study the effect of grafting modifications on hydrogen bonding, solvation structure and thermodynamics of NCC,⁷ and model the process of cellulose swelling in solution.
- Prediction of gelation ability. Theoretical insight into the formation and stability of polymer gels allows establishing a procedure for gelation ability prediction based on calculated mobility and compressibility of a solution.⁸
- Inhibitor docking. We propose a multiscale approach for biomolecular modeling based on the 3D-RISM-KH theory that provides a natural link between different levels of coarse-graining details in the multiscale description of the solvation structure and thermodynamics. This approach is capable of predicting binding sites for the inhibitors of the pathological conversion and aggregation of amyloidogenic proteins in agreement with experimental data. ⁹
- Heavy oil processing. We predict the intermolecular and molecule-zeolite interactions¹⁰ of petroleum model compounds and their effect on absorption,¹¹ emission, NMR and IR spectra to understand the role of hydrogen bonding and π - π interactions in heavy oil aggregation.¹²

1 Kovalenko, A. Three-dimensional RISM theory for molecular liquids and solid-liquid interfaces, In *Understanding Chemical Reactivity: Molecular Theory of Solvation*, F. Hirata, ed., Kluwer Academic Publishers, 24 (2003), pp.169-275; Kovalenko A.; Hirata, F. *J. Chem. Phys.* 1999, 110, 10095-10112.

2 Gusarov, S.; Ziegler, T.; Kovalenko, A. *Phys. Chem. A* 2006, 110, 6083-6090; Casanova, D.; Gusarov, S.; Kovalenko, A.; Ziegler, T. *J. Chem. Theory. Comput.* 2007, 3, 458-476.

3 Luchko, T.; Gusarov, S.; Roe, D. R.; Simmerling, C.; Case, D. A.; Tuszynski, J.; Kovalenko, A. *J. Chem. Theory Comput.* 2010, 6, 607-624.

4 Gusarov, S.; Ziegler, T.; Kovalenko, A. *J. Phys. Chem. A* 2006, 110, 6083-6090; Casanova, D.; Gusarov, S.; Kovalenko, A.; Ziegler, T. *J. Chem. Theory. Comput.* 2007, 3, 458-476.

5 Wesolowski, T. A.; Warshel, A. *J. Phys. Chem.* 1993, 97, 8050-8053;

6 Kaminski, J. W.; Gusarov, S.; Wesolowski, T. A.; Kovalenko, A. J. *Phys. Chem. A* 2010, 114, 6082-6096.

7 Stoyanov, S. R.; Gusarov, S.; Kovalenko, A. *Environm. Nanotechnol.*, in press.

8 Lui, X.; Lyubimova, O.; Kobryn, A. E.; Gusarov, S.; Kovalenko, A. *Proc. Computer Sci.* 2011, in press.

9 Imai, T.; Oda, K.; Kovalenko, A.; Hirata, F.; Kidera, A. *J. Am. Chem. Soc.* 2009, 131, 12430–12440; Stumpe, M. C.; Blinov, N.; Wishart, D.; Kovalenko, A.; Pande, V. S. *J. Phys. Chem. B*, 2011, 115, 319–328; Blinov, N.; Dorosh, L.; Wishart, D.; Kovalenko, A.; *Mol. Simul.*, 2011, in press.

10 Stoyanov, S.R.; Gusarov, S.; Kovalenko, A. Multiscale Modeling of the Adsorption Interaction Between Model Bitumen Compounds and Zeolite Nanoparticles in Gas and Liquid Phase, In *Industrial Applications of Molecular Simulations*, Taylor and Francis Books, in press; Stoyanov, S. R.; Gusarov, S.; Kovalenko, A. *Mol. Simul.* 2008, 34, 943-951; Stoyanov, S. R.; Gusarov, S.; Kuznicki, S. M.; Kovalenko, A. *J. Phys. Chem. C* 2008, 112, 6794-6810; Stoyanov, S. R.; Gusarov, S.; Kovalenko, A. *Mol. Simul.* 2008, 34, 953-960.

11 Stoyanov, S. R.; Yin, C.-X.; Gray, M. R.; Stryker, J. M.; Gusarov, S.; Kovalenko, A. *J. Phys. Chem. B* 2010, 114, 2180-2188. 12 Costa, L. M.; Hayaki, S.; Stoyanov, S. R.; Gusarov, S.; Tan, X.; Gray, M. R.; Stryker, J. M.; Kovalenko, A., in preparation.

23 de Março - Professor Jorma Hölsä, Universidade de São Paulo, Instituto de Química, São Paulo - SP, Brazil; University of Turku, Department of Chemistry, FI-20014 Turku, Finland Turku and University Centre for Materials and Surfaces (MatSurf), Turku, Finland

Persistent Luminescence: From Origins to Applications.

The persistent luminescence materials have been known since the discovery of the persistent emission from the famous Bologna Stone in the early 17th century. The history of luminescence is thus the history of persistent luminescence! These materials can emit light for hours or even days after the removal of the irradiation source and have thus a myriad of applications, from simple self-lit signalization to pressure and temperature sensing, solar cells and medical imaging. However, the origin of persistent luminescence is still not entirely understood. In this talk, the prerequisites for obtaining efficient persistent luminescence as efficient photoluminescence with the proper choice of the strong emitter as Eu^{2+} , Ce^{3+} or Tb^{3+} and Mn^{2+} , the creation of defects capable of trapping and storing the excitation energy for days etc are described in detail. Eventually, an overview of the persistent luminescence materials to the applications is given.

16 de Março - Professor Sérgio Resende, Dept. de Física, Universidade Federal de Pernambuco

Colóquio Inaugural do Semestre 2011.1

Título: "O Mais Novo Condensado de Bose-Einstein: Uma Gás de Mágns".

Na classificação de partículas em mecânica estatística, aquelas que podem ocupar um mesmo estado quântico com um número arbitrário são chamadas de bósons. Em 1924 Einstein previu que em certas condições uma população macroscópica de bósons poderia ocupar o mesmo estado quântico, um fenômeno que passou a ser chamado condensação de Bose-Einstein (BEC). Há várias décadas sabe-se que esta condensação explica a transição de ^4He para superfluido em T

04 de Março - Professora Glaura Goulart Silva, Universidade Federal de Minas Gerais

Título: "Compósitos Poliméricos com Nanomateriais de Carbono: Preparação e Caracterização Visando Produtos para o Setor de Petróleo e Energia".

No Laboratório de Materiais Poliméricos Multicomponentes do Departamento de Química da UFMG têm sido investigados nanocompósitos de poliuretana e epóxi com a adição de nanotubos de carbono e grafite esfoliado. Métodos de modificação química dos nanomateriais de carbono são empregados a fim de garantir eficientes dispersão e interação das nanocargas com a matriz polimérica. A caracterização físico-química dos nanomateriais de partida e dos nanocompósitos é realizada com o auxílio de diversos colaboradores e utilizando técnicas como Espalhamento Raman, XPS, MEV, MET, análise térmica e mecânica entre outras. Os materiais são testados com respeito a propriedades de interesse tecnológico especialmente no contexto do setor de petróleo e energia.

23 de Fevereiro - Professor Alberto Ferrer, Universidad Politécnica de Valencia, Espanha

Chemometrics in Process Control and Monitoring

Chemometrics is the science of extracting information from chemical systems by data-driven means. Process control is a statistics and engineering discipline that deals with architectures, mechanisms and algorithms for maintaining the output of a specific process under a desired trajectory. Statistical process control (SPC) is the application of statistical methods to the monitoring and control of a process to ensure that it operates at its full potential to produce conforming product. Process analytical technology (PAT) is a system for designing, analyzing, and controlling manufacturing through timely measurements (i.e., during processing) of critical

quality and performance attributes of raw and in-process materials and processes with the goal of consistently ensuring final product quality. In this talk the links among chemometrics, process control and process monitoring and their implications on PAT will be outlined. Real case studies will be used to illustrate these issue.

16 de Fevereiro - Professor Valdir Comasseto, Universidade de São Paulo, São Paulo

Telúrio: Uma Viagem no Tempo e no Espaço

09 de Fevereiro - Prof. Luisa Cervera, Universidade de Valência, Espanha

Especiacion no Cromatografica

Especialmente às 10:00 hs

04 de Fevereiro - Prof. Ludger Wessjohan, Leibniz Institute of Plant Biochemistry, Alemanha

Enzymatic C-C-Coupling: Understanding Prenyldiphosphate Transferring Enzymes.

Especialmente às 9:00 hs

Colóquios Apresentados Anteriormente

[[2005](#)] [[2006](#)] [[2007](#)] [[2008](#)] [[2009](#)] [[2010](#)]