

CICLO DE ESTUDOS  
1º SEMESTRE DE 2021

PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM QUÍMICA  
DEPARTAMENTO DE QUÍMICA - FFCLRP/USP



## Abordagem de novas funções dos lipídios em processos imunológicos

**Prof. Dr. Carlos Arterio Sorgi**

**DQ/FFCLRP-USP**



<https://stream.meet.google.com/stream/28c52e3d-2339-4207-b046-618e048e5b73>

09 de Abril de 2021

14 horas

Através da utilização da espectrometria de massas no desenvolvimento da lipidômica, propomos uma abordagem multidisciplinar para identificação de biomarcadores e mediadores lipídicos no contexto do microambiente e da resposta imune pulmonar, especificamente nas funções dos macrófagos alveolares em infecções bacterianas e pelo SARS-CoV-2. Dessa forma, identificamos espécies de fosfolipídios abundantes no líquido surfactante e seus principais produtos oxidados, como também lipídios da classe dos eicosanoides. Estes lipídios, em diferentes modelos de infecção, demonstraram atividade relacionada com a modulação da inflamação e defesa contra os patógenos. A identificação e os estudos das funções de lipídios na patofisiologia de doenças são importantes para a emergente Terapia de Lipídios de Membrana (TLM), que tem como proposta a regulação farmacológica da composição lipídica das membranas e a formação de metabólitos lipídicos, com foco no tratamento de doenças.

## **Análise de acelerantes em detritos de incêndio por Cromatografia em Fase Gasosa Acoplada à Espectrometria de Massas**

**Me. Lais Helena P. Bueno Carmona**

**Doutoranda no PPGQ**



<https://stream.meet.google.com/stream/e7198598-3ccb-4e0d-ad49-8ab29a2b58dd>

16 de abril de 2021

14 horas

A ocorrência de incêndios é uma preocupação mundial, pois anualmente gera grande quantidade de mortes, além de prejuízos financeiros e ambientais (BRUSHLINSKY et al., 2019). Há dois tipos de incêndio: os acidentais e aqueles que foram criminosamente iniciados, e nesse caso há o uso um acelerante, podendo ser um líquido inflamável, utilizado para iniciar o fogo e causar um grande dano (MULLER; LEVY; SHELEF, 2011). Os acelerantes mais utilizados por criminosos são aqueles que se tem fácil acesso, tais como gasolina e diesel e apesar do fogo ter capacidade de causar grande danos aos vestígios, os acelerantes depositados na cena do crime podem ser identificados (HOWARD; BRUCE MCKAGUE, 1984). Para isso é necessário saber avaliar a cena de crime, para coletar uma amostra representativa, sendo possível, ao realizar o preparo de amostra em laboratório, extrair quantidades significativas de acelerantes para serem analisados e identificados por Cromatografia em Fase Gasosa Acoplada à Espectrometria de Massas (GC/MS) (STAUFFER; DOLAN; NEWMAN, 2008). Desta forma, neste seminário serão abordados os aspectos relacionados à perícia de incêndio, desde a identificação de acelerantes em cena de crime, preparo das amostras enviadas ao laboratório até à forma de análise por GC/MS e os possíveis interferentes que podem levar a um falso positivo, com foco principal em gasolina e diesel como acelerantes.

### **Referências:**

- BRUSHLINSKY, N. N.; AHRENS, M.; SOKOLOV, S. V.; WAGNER, P. World Fire Statistics. [S. l.], v. 24, 2019.
- HOWARD, John; BRUCE MCKAGUE, A. A Fire Investigation Involving Combustion of Carpet Material. Journal of Forensic Sciences, [S. l.], v. 29, n. 3, p. 11754J, 1984. DOI: 10.1520/JFS11754J. Disponível em: <http://www.astm.org/doiLink.cgi?JFS11754J>. Acesso em: 23 mar. 2021.
- MULLER, Dan; LEVY, Aharon; SHELEF, Ran. Detection of gasoline on arson suspects' hands. Forensic Science International, [S. l.], v. 206, n. 1–3, p. 150–154, 2011. DOI: 10.1016/j.forsciint.2010.07.031. Acesso em: 23 mar. 2021.
- STAUFFER, Eric; DOLAN, Julia A.; NEWMAN, Reta. Fire Debris Analysis. [s.l.] : Elsevier, 2008. DOI: 10.1016/B978-0-12-663971-1.X5001-5. Acesso em: 23 mar. 2021.

**Massimo Bottini, PhD**



Department of Experimental Medicine  
University of Rome Tor Vergata - Via  
Montpellier, 1 00133 Roma, ITALY

[massimo.bottini@uniroma2.it](mailto:massimo.bottini@uniroma2.it)

Phone: +39 06 72596390

Sanford Burnham Prebys Medical Discovery  
Institute 10901 North Torrey Pines Road -  
La Jolla, CA 92037, USA

[mbottini@SBPdiscovery.org](mailto:mbottini@SBPdiscovery.org)

Phone: +1 858 6463100 x3063

Fax: +1 858 7139925

## **“Role of the Orphan Phosphatase 1 (PHOSPHO1) in Matrix Vesicle-Driven Biom mineralization”**

**23 de abril de 2021 – 14 horas**

<https://stream.meet.google.com/stream/aaf8b8e3-3b8b-4066-8664-1fe24e41f2e3>

Bone ossification is a result of the work of a special class of extracellular vesicles (EVs), called matrix vesicles (MVs). MVs are released by outward budding from the apical microvilli of chondrocytes and osteoblasts. Studies have shown that released MVs are pre-filled with amorphous aggregates of  $\text{Ca}^{2+}$  and inorganic phosphate (Pi) complexed with phospholipids and proteins, also referred to as the nucleational core (NC). Upon further accumulation of  $\text{Ca}^{2+}$  and Pi ions in the MVs' lumen, the NC form crystalline minerals that propagate onto collagen fibrils after the release in the ECM. Current knowledge describes MVs as harbouring the complete biochemical machinery necessary to drive the maturation of the NC and the propagation of apatite minerals. Orphan phosphatase 1 (PHOSPHO1, *Phospho1*) has been identified as crucial for the accumulation of Pi ions in the MVs' lumen. Recent studies from our research group have shown that PHOSPHO1 also has a crucial role in the biogenesis of MVs as well as in the assembly of the NC in the MVs' lumen. In this seminar, I will describe our current knowledge on the MV biogenesis and function with a focus on the role of PHOSPHO1 in these processes.

**Profa. Dra. Adriana Karla Cardoso  
Amorim Reis  
UNIFESP – Diadema**



<https://stream.meet.google.com/stream/0733bbd5-b3bd-41da-a486-56cec540906a>

**30 de abril de 2021 – 14 horas**

### **Tióis e S-nitrosotióis: síntese e estudo conformacional e avaliação de atividades biológicas/farmacológicas.**

Nossa pesquisa envolve a preparação de novos tíois (ésteres e amidas) e S-nitrosotióis derivados e a avaliação da atividade biológica dos mesmos frente a linhagens de células tumorais de mama. Os S-Nitrosotióis são potentes vasodilatadores e inibidores de agregação plaquetária. Estas atividades e o potencial dessas moléculas atuarem como biorreguladoras estão associados à habilidade de liberação de óxido nítrico (NO). A possível atividade biológica dos produtos aliada aos poucos estudos enfatizando a conformação e reatividade desses compostos são nossa motivação.

Estudos da estabilidade relativa das possíveis conformações dos compostos para a obtenção das populações dos confôrmeros mais estáveis são realizados através de cálculos teóricos e dados espectroscópicos no infravermelho.

Testes de susceptibilidade aos compostos foram realizados nas linhagens celulares MCF-10A, MDA-MB-231, MCF-7 e HUVEC e mostraram resultados promissores.

**Dra. Bianca Chierгато Maniglia**  
**Ex-aluno do PPGQ-USP**



<https://meet.google.com/nkg-sgvk-mpb>

<https://stream.meet.google.com/stream/d5f5fb56-b9c7-41af-8f1f-33a32287caec>

**07 de maio de 2021 – 14 horas**

### **3D printing using starch-based inks**

3D printing is a futuristic technology that consists of additive manufacturing that allows the creation of personalized and creative products. 3D printing can deliver a product that adapts to specific criteria of consumption, texture, taste, cost, practicality and nutrition. Extrusion-type 3D printing is the most common for the production of printed foods, as it is easy to process and allows the use of different types of materials (called “inks”). Starch is the most important carbohydrate in the human diet, considered cheap and accessible food source, and has been widely used as a thickener and gelling agent in several food formulations. In this context, this carbohydrate is of great interest for 3D printing application. However, to achieve the desired quality and precision of the starch-based printed food, it is necessary to consider crucial factors such as the selection of starchy source and production method of the starchy inks, knowledge of the physical-chemical and rheological properties of the starchy inks, selection of the design and the capacity of the equipment. In this seminar, I will present the concepts, challenges, the main findings by our research, and the future perspectives in the 3D food printing using starch-based inks.

### ***Espectrometria de Massas de Oligossacarídeos***

Carolina V. Garbelotti



<https://stream.meet.google.com/stream/22c512ea-0262-4544-8fe9-fe69b487db70>

**14 de maio de 2021**

**14 horas**

A compreensão da estrutura e organização de polímeros de carboidratos é de grande importância para diversas áreas de pesquisa. Dois grandes exemplos são o estudo do glicoma, aplicado, por exemplo, no entendimento, detecção e desenvolvimento de tratamentos para doenças autoimunes, câncer, infecções virais<sup>1</sup>; e o estudo da composição e estrutura da parede celular vegetal para melhoria na qualidade e resistência dos cultivos agrícolas e uso sustentável da biomassa residual gerada em grandes quantidades<sup>2</sup>. Desta forma, o desenvolvimento destas áreas depende de análises que proporcionem informações detalhadas sobre a composição e organização estrutural destes biopolímeros, que são conhecidos por sua grande complexidade e heterogeneidade. A espectrometria de massas, por ser uma técnica extremamente versátil, vem sendo aplicada com sucesso para a análise de oligossacarídeos e proporcionando grande avanços. Apresentando alta sensibilidade, e possibilidades de trabalhar com variações em parâmetros como tipo de ionização e equipamento, uso de análises em tandem (MS<sup>n</sup>) e modulações nas energias empregadas na fragmentação dos íons, é possível obter diferentes níveis de detalhamento estrutural, desde composição geral até localização de modificações, tipos de ligações e diferenciação de isômeros<sup>3,4</sup>. Neste seminário, então, serão abordados alguns princípios e detalhes da aplicação desta técnica de análise para oligossacarídeos e exemplos de aplicações em áreas de estudos diversas.

**Referências:** Illiano, A., Pinto, G., Melchiorre, C., Carpentieri, A., Faraco, V., & Amoresano, A. (2020). Protein Glycosylation Investigated by Mass Spectrometry: An Overview. *Cells*, 9(9), 1986. <https://doi.org/10.3390/cells9091986>. Bauer, S. (2012). Mass spectrometry for characterizing plant cell wall polysaccharides. *Frontiers in Plant Science*, 3, 45. <https://doi.org/10.3389/fpls.2012.00045>. Kailemia, M. J., Ruhaak, L. R., Lebrilla, C. B., & Amster, I. J. (2014). Oligosaccharide analysis by mass spectrometry: A review of recent developments. *Analytical Chemistry*, 86(1), 196–212. <https://doi.org/10.1021/ac403969n>. Zaia, J. (2004). Mass spectrometry of oligosaccharides. *Mass Spectrometry Reviews*, 23(3), 161–227. <https://doi.org/10.1002/mas.10073>

## Nanoscale Energy Transducer: From Biological Assays to Respiration Processes

**Prof. Dr. Paulo R. Bueno**



[https://stream.meet.google.com/stream/  
b45e563a-ffe6-4da1-9c3e-d3db63187547](https://stream.meet.google.com/stream/b45e563a-ffe6-4da1-9c3e-d3db63187547)

**21 de maio de 2021  
14 horas**

### **ABOUT THE SEMINAR**

Examinations of energy storage and charge transfer at the molecular scale underpin not only fundamental developments in our understanding of electron transfer and transport but also a vast array of energy capture, sensor, data storage and electronic technologies. In this seminar it is presented a quantum capacitive analysis and approach of such interfaces and a detailed introduction of the concepts involving energy storage at the molecular scale. The seminar considers how the fundamental quantized properties associated with charge storage, particularly in molecular films, are linked in a manner that spans nanoscale electronics, redox switches and derived nanoscale sensing; it will be demonstrated that it also comprises phenomena involving the respiration of biological films.

### **KEY RELATED REFERENCES [1-6]**

- [1] P.R. Bueno, *The Nanoscale Electrochemistry of Molecular Contacts*, Springer 2018.
- [2] P.R. Bueno, *Common Principles of Molecular Electronics and Nanoscale Electrochemistry*, *Analytical Chemistry* 90(12) (2018) 7095-7106.
- [3] P.R. Bueno, *Nanoscale Origins of Super-capacitance phenomena*, *Journal of Power Sources* 414 (2019) 420-434.
- [4] P.R. Bueno, F.C.B. Fernandes, J.J. Davis, *Quantum Capacitance as a Reagentless Molecular Sensing Element*, *Nanoscale* 40(9) (2017) 15362-15370.
- [5] P.R. Bueno, *Electron transfer and conductance quantum*, *Physical Chemistry Chemical Physics* 22(45) (2020) 26109-26112.
- [6] P.R. Bueno, J.J. Davis, *Charge transport and energy storage at the molecular scale: from nanoelectronics to electrochemical sensing*, *Chemical Society Reviews* 49(21) (2020) 7505-7515.



### **Avaliação *in silico* do potencial de toxicidade de compostos bioativos**

**Me. Guilherme Martins da Silva**



<https://stream.meet.google.com/stream/7b3d5da1-9bb1-4962-96dc-8038ebfb6d6a>

**28 de maio de 2021**

**14 horas**

Estudos de toxicidade consistem em uma etapa essencial no desenvolvimento de substâncias químicas de interesse, especialmente de compostos bioativos, tais como fármacos e agroquímicos. A avaliação *in silico* do potencial de toxicidade destes compostos vem ganhando cada vez mais destaque nos últimos tempos, sobretudo na área de planejamento e desenvolvimento de fármacos, bem como com vistas à aprovação de novos pesticidas por agências regulatórias no mundo inteiro. Consideram-se, aqui, duas principais vantagens: economia de custos, número e tempo de ensaios; e redução de experimentos que utilizam animais de laboratório. De fato, agências regulatórias de diversos países requerem atualmente o relato preliminar de resultados obtidos *in silico*, em complementariedade e/ou substituição a dados de ensaios de toxicidade que necessitariam ser realizados *in vitro* ou *in vivo*. Assim, neste cenário, há uma vasta gama de metodologias e programas computacionais para a predição de toxicidade, que vão desde abordagens clássicas de *QSAR/QSTR*, programas baseados em regras de conhecimento (*expert systems*), até técnicas de inteligência artificial. Desta forma, nesta apresentação será traçado um panorama geral destas diversas metodologias e *software* hoje disponíveis, com menção aos respectivos modelos químicos e *endpoints* toxicológicos. Acrescenta-se, ainda, uma breve revisão à atual compreensão sobre a aplicabilidade e relevância de predições computacionais de toxicidade no contexto de desenvolvimento de compostos bioativos.

#### **Referências:**

- G. M. Silva et al. In silico methods to predict relevant toxicological endpoints of bioactive substances. In: Functional Properties of Advanced Engineering Materials and Biomolecules. 1ed. Suíça: Springer, 2021.
- N. Greene et al. Computational toxicology, friend or foe? Toxicology Research, 4, 5, 1159–1172, 2015.
- J. Kling. Toxicology testing steps towards computers. Lab. Anim. 48, 40–42, 2019.
- J. Hemmerich et al. In silico toxicology: from structure-activity relationships towards deep learning and adverse outcome pathways. WIREs Comp. Mol. Sci. 2020;10:e1475.

## Planejamento experimental: aplicações para o desenvolvimento de métodos de enantioseparação por técnicas de eletromigração em capilares.

Me. Icaro Salgado Perovani



11/06/2021 – 14 horas

<https://stream.meet.google.com/stream/69dced0a-b943-4061-bcc7-1b4e15b95808>

<https://meet.google.com/qvb-zhfj-vro>

Enantiômeros de um composto podem apresentar comportamento enantioselectivo no organismo, o que demonstra a importância dos estudos enantioselectivos (ALVAREZ-RIVERA et al., 2020). O limoneno é um exemplo bastante interessante. O enantiômero *R*-(+)-limoneno tem odor de laranja, já a sua imagem especular, *S*-(-)-limoneno, tem odor de limão (ALVAREZ-RIVERA et al., 2020). Compostos quirais candidatos a fármacos também podem apresentar esse comportamento. Um enantiômero pode ser biologicamente ativo enquanto o outro pode não ter efeito significativo ou, até mesmo, ser tóxico para o organismo. Nessa perspectiva, métodos de separação quiral se tornam vitais para o desenvolvimento de estudos enantioselectivos. Dentre esses métodos, as técnicas de separação por eletromigração em capilares se destacam devido a sua eficiência, baixo consumo de materiais e amostra (CARRÃO et al., 2020). Apesar disso, o desenvolvimento de um método de enantioseparação é custoso e demorado, principalmente se o composto a ser analisado possui muitos centros quirais. Nesse sentido, a utilização de métodos multivariados para a otimização da enantioseparação, em contraste com a metodologia univariada, se apresenta como uma alternativa mais eficiente para se compreender o efeito das variações dos parâmetros eletroforéticos sobre a enantioseparação (HIBBERT, 2012). As vantagens do planejamento experimental, não se limitam apenas a eficiência em explorar a região experimental, mas também, identificar as variáveis que influenciam de maneira significativa a enantioseparação, o que também permite ao pesquisador melhorar a robustez do método eletroforético (LEARDI, 2009; PEROVANI; SERPELLONE; OLIVEIRA, 2021).

### Referências

- ALVAREZ-RIVERA, G. et al. Chiral analysis in food science. **TrAC Trends in Analytical Chemistry**, v. 123, p. 115761, fev. 2020. Disponível em: <<https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0165993619305606>>.
- CARRÃO, D. B. et al. Enantioseparation of pesticides: A critical review. **TrAC Trends in Analytical Chemistry**, v. 122, p. 115719, 1 jan. 2020. Disponível em: <<https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0165993619304303>>.
- HIBBERT, D. B. Experimental design in chromatography: A tutorial review. **Journal of Chromatography B**, v. 910, p. 2–13, dez. 2012. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1016/j.jchromb.2012.01.020>>.
- LEARDI, R. Experimental design in chemistry: A tutorial. **Analytica Chimica Acta**, v. 652, n. 1–2, p. 161–172, 2009.
- PEROVANI, I. S.; SERPELLONE, C. O.; OLIVEIRA, A. R. M. An appraisal of experimental designs: Application to enantioselective capillary electromigration techniques. **ELECTROPHORESIS**, v. 0, p. 1–18, 15 fev. 2021. Disponível em: <<https://onlinelibrary.wiley.com/doi/10.1002/elps.202000334>>.

## Microplásticos atmosféricos: uma abordagem geral, seus efeitos na saúde e o impacto da pandemia de COVID-19

**Profa. Dra. Roberta Cerasi Urban**

**Ex-aluna do PPGQ-DQ e**

**Profa. Dra. na UFSCar**



**18 de junho de 2021 às 14h**

<https://stream.meet.google.com/stream/ca94fecd-da91-49d5-9ed4-d5543624911f>

A produção e o uso de plásticos vêm crescendo rapidamente nos últimos 50 anos, contribuindo por exemplo para melhorias na saúde por meio de equipamentos médicos descartáveis. Globalmente, em 2017, cerca de 300 milhões de toneladas de plásticos foram produzidos, o que segundo projeções, deve acarretar mais de 12 bilhões de toneladas de resíduos plásticos depositados no ambiente, até 2050.<sup>1</sup> Os resíduos plásticos podem se degradar ou decompor formando micro (MP) e nanoplásticos (NP) secundários, ou ainda MP podem ser fabricados para aplicações específicas e são chamados primários.<sup>2</sup> O primeiro estudo que reportou MP na atmosfera foi realizado em Paris, posteriormente, outros foram realizados em outras cidades europeias, asiáticas e americanas, e até em locais remotos, como os Pirineus Franceses, e em áreas de conservação nos Estados Unidos.<sup>2</sup> Os MP atmosféricos podem ser emitidos por diversas fontes, e os polímeros determinados mais frequentemente e/ou em maiores concentrações, polietileno (PE), polipropileno (PP), e polietileno tereftalato (PET), são provenientes de fibras têxteis e filmes plásticos.<sup>2</sup> A grande geração de resíduos e a resistência à degradação podem tornar os MP e NP um risco a saúde humana e ao meio ambiente. Os seres humanos podem ser expostos à estes por inalação, ingestão de alimentos e água, e contato dérmico. Suas grandes áreas superficiais podem causar estresse oxidativo, citotoxicidade e translocação para outros tecidos, enquanto sua natureza persistente limita sua remoção do organismo, levando à inflamação crônica.<sup>2</sup> Os MP e NP também podem atuar como carreadores de poluentes e de aditivos para os organismos.<sup>2</sup> Em 2020, o novo coronavírus (SARS-CoV-2), o agente da COVID-19, fez crescer a demanda por equipamentos de proteção individuais, e a má gestão destes EPIs está resultando em contaminação ambiental plástica generalizada.<sup>3</sup> A pandemia também contribuiu para a reversão de algumas proibições de plásticos do tipo *single-use*.<sup>3</sup> Se por um lado a pandemia tem acarretado maiores descartes destes materiais no ambiente, o uso de máscaras faciais reduzem as exposições dos seres humanos aos MP por inalação em até 25,5 vezes, portanto, há uma necessidade de mais estudos nesta área.<sup>4</sup>

R. Geyer, J. R. Jambeck and K. L. Law, *Sci. Adv.*, 2017, 3, e1700782.

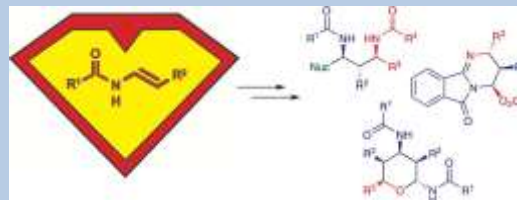
Y. Zhang, S. Kang, S. Allen, D. Allen, T. Gao and M. Sillanpää, *Earth-Science Rev.*, 2020, 203, 103118.

J. C. Prata, A. L. Patrício Silva, T. R. Walker, A. C. Duarte and T. Rocha Santos, *Environ. Sci. Technol.*, , DOI:10.1021/acs.est.0c02178.

L. Li, X. Zhao, Z. Li and K. Song, *J. Hazard. Mater.*, 2021, 411, 124955.

## Rapid Assembly of Molecular Complexity from Simple Enamides”

The efficient assembly of structurally complex molecules containing multiple continuous stereogenic centers still constitutes a tremendous challenge for any synthetic organic chemist.



Prof. Georg Manolikakes Department of  
Chemistry – TU Kaiserslautern/Germany

25 de junho de 2021



[manolikakes@chemie.uni-kl.de](mailto:manolikakes@chemie.uni-kl.de)

<https://www.chemie.uni-kl.de/en/manolikakes>

In the last years my group have demonstrated the synthetic utility of enamides as versatile starting materials for the rapid assembly for molecular complexity.

Starting from the synthesis of acyclic 1,3-diamines with three continuous stereocenters, we have expanded the synthetic repertoire of enamides towards the construction of unusual tricyclic dihydropyrimido[2,1-a]isoindole-6(2H)-ones with three continuous stereogenic centers. Recently have our efforts culminated in the development of a new domino reaction for the stereoselective synthesis of fully substituted tetrahydropyrans. In this latest process three new *s*-bonds and five continuous stereocenters are formed in a single operation with an outstanding degree of stereocontrol.

### References:

P. Kramer, G. Manolikakes, *Synlett* 2020, 31, 1027.

J. Halli, M. Bolte, J. Bats, G. Manolikakes, *Org. Lett.* 2017, 19, 674.

J. Halli, P. Kramer, J. Grimmer, M. Bolte, G. Manolikakes, *J. Org. Chem.* 2018, 83, 12007.

P. Kramer, J. Schönfeld, M. Bolte, G. Manolikakes, *Org. Lett.* 2018, 20, 178.

P. Kramer, J. Grimmer, M. Bolte, G. Manolikakes, *Angew. Chem. Int. Ed.* 2019, 58, 13056.

## APLICAÇÃO DE MATERIAIS DE ACESSO RESTRITO EM BIOANÁLISES

Me. Jonas Carneiro Cruz



02 de julho de 2021

<https://stream.meet.google.com/stream/81c6de83-72cc-4e9a-815e-41947f00acf7>

Os fluidos biológicos são considerados amostras complexas. Estas matrizes possuem uma série de interferentes que podem causar diversos erros analíticos e problemas instrumentais. Dentre os principais contaminantes de sistemas bionalíticos, é possível destacar principalmente as proteínas (macromoléculas). Estes compostos podem adsorver na fase estacionária das colunas cromatográficas (diminuição da eficiência da separação cromatográfica), além de suprimir a ionização dos analitos (diminui a sensibilidade analítica de sistemas LC-ESI-MS/MS). Portanto, a determinação de compostos orgânicos em sistemas cromatográficos requer a etapa de preparo de amostra para isolar e pre-concentrar os analitos, que muitas vezes estão presentes em níveis de traços. Assim, os materiais de acesso restrito (RAMs) têm sido amplamente utilizados como sorventes para extrair uma vasta gama de analitos de diversas matrizes biológicas. Estes materiais podem ser considerados uma excelente alternativa as fases estacionárias convencionais devido à sua capacidade de reter seletivamente compostos de baixo peso molecular enquanto é capaz de excluir macromoléculas por diferentes mecanismos (barreira física ou química). Portanto, devido às características inovadoras destes materiais, os RAMs vêm ganhando cada vez mais espaço na química analítica moderna.

Deste modo, este seminário irá abordar os principais avanços dos RAMs como fases inovadoras no preparo de amostra de matrizes de origem biológica por LC-MS/MS .

### Referência

DE FARIA, Henrique Dipe et al. New advances in restricted access materials for sample preparation: a review. **Analytica chimica acta**, v. 959, p. 43-65, 2017.

BORGES, K. L; FIGUEIREDO, E. C; QUEIROZ, M. E. **Preparo de Amostras para Análise de Compostos Orgânicos**. LTC, 2015

QUEIROZ, Maria Eugênia C.; SOUZA, Israel D. Restricted access media. In: **Solid-Phase Extraction**. Elsevier, 2020. p. 129-149

**Dra. Maria Rute Ferreira**

**Universidade de Aveiro**



**16 de julho de 2021 às 14h**

**[stream.meet.google.com/stream/0b439e3](https://stream.meet.google.com/stream/0b439e3)**

**3-3c5d-4590-af59-04a61fcac46e**

***New generation of photonic materials for Internet of Things***

Photonics is the driving force of technological innovation in a broad number of fields with extraordinary societal impact. An integrated perspective featuring photonics as a fundamental player for the Internet of Things (IoT) will be presented with emphasis on illustrative examples of recent advances in mobile optical sensing and smart labelling.

***Triagem virtual baseada em alto desempenho via Docking molecular para estresse Oxidativo  
mediado por enzima ROS***

**Me. Rai Campos Silva**



**23 de julho de 2021 às 14h**

**<https://stream.meet.google.com/stream/cfc16c65-28d0-4c15-a859-0596d0ee4136>**

A regulação de homeostases redox e a redução do estresse oxidativo é uma das várias estratégias usadas no desenvolvimento de fármacos antitumoral. Compreendido a partir de estudos in silico, como uma molécula em particular que se liga ao receptor proteico, permitindo a seleção de compostos promissores que podem ser utilizados em farmacoterapia antineoplásico. O acoplamento molecular pode utilizar o estudo e relações entre o complexo proteína-ligante a partir da origem da interação ligante x alvo biológico. Os algoritmos de Docking usados apresentam uma alta complexidade, contudo, com o aprimoramento dos sistemas implementados para realizar tais estudos, atualmente coexistem interfaces mais acessíveis para usuários de diversos níveis de experiência. Um estudo comparativo de vários algoritmos de acoplamento pode fornecer informações úteis para selecionar o algoritmo apropriado para a pesquisa, planejamento e seleção de fármacos utilizando técnicas computacionais. Assim, a partir desta perspectiva, a proposta desta apresentação é fornecer novas informações sobre como é possível o estudo via validação de protocolos de simulações de Docking molecular em duas enzimas espécies oxigênio reativas (ROS): Citocromo P450 (CYP450) e NADPH oxidase (NOX), suas interações com agentes antineoplásicos a partir dos valores de menor afinidade de ligação ( $\Delta G$ ) para o complexo receptor-ligante e associá-los à farmacoterapia antitumoral.

## Plataformas vacinais para Covid-19 e combate às Fake News na pandemia

**Prof. Dr. Luiz Carlos Dias - UNICAMP**



**Dia 30 de julho de 2021 às 14h**

**Alunos PPGQ -**

<https://meet.google.com/zxx-sgda-eox>

**Convidados -**

<https://stream.meet.google.com/stream/2c25242b-6db9-48f6-a259-190709956a06>

Resumo: Nesta palestra serão abordadas as principais plataformas das vacinas em uso contra a Covid-19 e ações de combate à desinformação, disseminação de fake news e aos movimentos negacionistas, anticiência e antivacinas na pandemia.

**Informações biográficas:** Professor Titular da Unicamp, membro titular da Academia Brasileira de Ciências, membro Titular da Academia de Ciências do Estado de São Paulo, Comendador da Ordem Nacional Do Mérito Científico e membro da Força-Tarefa da Unicamp no combate à Covid-19. Coordena um consórcio internacional em colaboração com as organizações sem fins lucrativos *Medicines for Malaria Venture* (MMV) e com a *Drugs for Neglected Diseases initiative* (DNDi) com o objetivo de desenvolver novos fármacos para o tratamento de doenças parasitárias tropicais como malária e Chagas





CICLO DE ESTUDOS  
2º SEMESTRE DE 2021



PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM QUÍMICA  
DEPARTAMENTO DE QUÍMICA - FFCLRP/USP

**Profa. Dra. Alma Blasida C. Elizaur Catirse**

**Faculdade de Odontologia de Ribeirão**

**Preto/USP**



**27/08/2021**

**Formação de Multiplicadores de prevenção do câncer bucal e ao uso de próteses e sua manutenção- Programa Aprender na Comunidade.**

O objetivo deste seminário é formar multiplicadores de medidas preventivas do uso de próteses por meio da utilização de técnicas apropriadas de higienização bucal e das próteses, além de orientar sobre o auto exame como prevenção do câncer bucal.

<https://stream.meet.google.com/stream/eecee3>

[4b-b574-4110-b1ea-e76d48b8eb00](https://stream.meet.google.com/stream/eecee3)

**Prof. Dr. Giuliano Cesar Clososki**  
**FCFRP/USP**



**03 de setembro de 2021 às 14h**

<https://stream.meet.google.com/stream/2946a9e6-e808-45cf-9dd4-c33d859003d1>

## **REAÇÕES QUIMIO- E REGIOSSELETIVAS: CONTRIBUIÇÕES VISANDO A DESCOBERTA E ESCALONAMENTO DE FÁRMACOS**

No seminário, pretende-se discutir a aplicação de estratégias de funcionalização quimiosseletiva e regiosseletiva de diversos substratos aromáticos e heterocíclicos de interesse medicinal, dentre os quais quinolinas, indolizinas e quinazolininas, utilizando reagentes organometálicos mistos de lítio, magnésio e de zinco. Com o objetivo de demonstrar a relevância sintética destas reações, algumas aplicações na síntese ou modificação estrutural de moléculas de grande interesse medicinal, como do antimalárico cloroquina e dos antitumorais tamibaroteno e verubulina, serão também apresentadas.



**Prof. Caio Costa Oliveira- UNICAMP**

**17 de setembro de 2021 às 14h**

<https://stream.meet.google.com/stream/3795fa86-ce93-40fa-a6a4-6cbaa5f55f1a>

## **Aprendendo com o Desenvolvimento de Novos Compostos: Alguns Ensinaamentos para Pós-Graduandos**

A demanda da sociedade por novos fármacos, cosméticos, materiais funcionais, entre outros, tem crescido e impulsionado o desenvolvimento de métodos para a obtenção de moléculas que atendam à esta necessidade.

Neste cenário, a evolução dos métodos sintéticos garantiu o protagonismo da Química como provedora de alternativas eficientes para o aumento da complexidade e diversidade estrutural de moléculas funcionais.

Neste seminário, serão apresentados alguns exemplos que demonstram esta evolução. Os aspectos “filosóficos” dos trabalhos serão priorizados em relação aos mecanísticos. Assim, espera-se que estes ensinamentos sejam úteis para todos os admiradores das moléculas orgânicas, independentemente da sua área de atuação.



**Jake Barralet** - Faculty of Medicine,  
McGill University- Montreal Canada

**24 de setembro de 2021 às 14h**

<https://stream.meet.google.com/stream/50ca37dc-d094-4555-9501-a2e8a5e1fa56>

### **Blood from a stone: angiosomes and regeneration in cements.**

BEng (Hons) Leeds, PhD University of London performed Postdoctoral studies at Tokyo Dental and Medical University. He worked for Smith and Nephew before starting his academic career at the University of Birmingham. He is Vice Chair (Research), Alan Thompson Chair in Surgical Research, Department of Surgery, Research Director, Division of Orthopaedics, Associate Director Injury Repair and Recovery Program at RIMUHC, and Director of Innovation for the Steinberg Centre for Simulation and Interactive Learning and Faculty of Medicine at McGill University. He is a Professor in the Department of surgery and is joint appointed with Faculty of Dentistry. He researches material-mediated tissue regeneration focusing on the effect of inorganic ions on bone and skin



**Prof. Bruno Caillier**

**Université de Toulouse**

*Bruno.caillier@univ-jfc.fr*

**08 de outubro de 2021 às 14h**

<https://stream.meet.google.com/stream/dcd239c8-646f-458a-8fbe-4f1c59c81c7e>

### **From power supply to light emission : a dielectric barrier discharge insight**

Over the centuries man has sought and discovered many ways to produce light. With the understanding of physics related to the nature of light and electricity generation, many electrical light sources have been discovered, developed and then used industrially. Indeed, since the beginning of the 18th century, researchers such as Francis Hauksbee and Pierre Polinère [1, p. 19], [2] have been developing devices to generate "electric light". This search for efficient light production has not ceased and is still relevant with the rise of LEDs [3] or OLED for flat panel display [4].

First, during a historical approach, the different devices for producing light from electricity will be described: arc lamp, discharge lamp, filament lamp, LED, etc.. The place of electric discharges will be described, as well as the different mechanisms leading to an efficient generation of light.

In a second step, experimental work on the generation of visible or UV emissions by dielectric barrier discharges (DBD) will be presented. Discharge emissions can be used directly, whether for visible or UV applications, or indirectly through suitable phosphors [5] as illustrated in Figure 1.

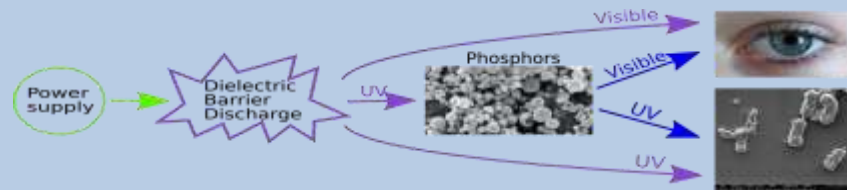


Figure 1 : From power supply to visible or UV emission

[1] J. Priestley, *The history and present state of electricity : with original experiments*. London : Printed for C. Bathurst, and T. Lowndes ... J. Rivington, and J. Johnson ... S. Crowder, G. Robinson, and R. Baldwin ... T. Becket, and T. Cadell ..., 1775.

[2] D. W. Corson, « Pierre Poliniere, Francis Hauksbee, and Electroluminescence: A Case of Simultaneous Discovery », *Isis*, vol. 59, n° 4, p. 402-413, 1968.

[3] B. Gayral, « LEDs for lighting: Basic physics and prospects for energy savings », *Comptes Rendus Phys.*, vol. 18, n° 7-8, p. 453-461, sept. 2017.

[4] H.-W. Chen, J.-H. Lee, B.-Y. Lin, S. Chen, et S.-T. Wu, « Liquid crystal display and organic light-emitting diode display: present status and future perspectives », *Light Sci. Appl.*, vol. 7, n° 3, p. 17168, mars 2018.

[5] B. Caillier *et al.*, « Decontamination Efficiency of a DBD Lamp Containing an UV-C Emitting Phosphor », *Photochem. Photobiol.*, vol. 91, n° 3, p. 526-532, mai 2015.

## Forest fires and agricultural burning: emissions and effects



**Prof. Celia Alves**

**Universidade de Aveiro - Portugal**

**15 de outubro de 2021 às 14h**

[https://stream.meet.google.com/stream/0b3c642e-](https://stream.meet.google.com/stream/0b3c642e-7186-4568-bbb7-b75829abd6ad?fbclid=IwAR1Kt1T1rYFb4eWuo164hceevki_IzwIR-vBffQ3N2bqX6d0cWQrcO8INr8)

[7186-4568-bbb7-](https://stream.meet.google.com/stream/0b3c642e-7186-4568-bbb7-b75829abd6ad?fbclid=IwAR1Kt1T1rYFb4eWuo164hceevki_IzwIR-vBffQ3N2bqX6d0cWQrcO8INr8)

[b75829abd6ad?fbclid=IwAR1Kt1T1rYFb4eWuo164hce](https://stream.meet.google.com/stream/0b3c642e-7186-4568-bbb7-b75829abd6ad?fbclid=IwAR1Kt1T1rYFb4eWuo164hceevki_IzwIR-vBffQ3N2bqX6d0cWQrcO8INr8)

[evki\\_IzwIR-vBffQ3N2bqX6d0cWQrcO8INr8](https://stream.meet.google.com/stream/0b3c642e-7186-4568-bbb7-b75829abd6ad?fbclid=IwAR1Kt1T1rYFb4eWuo164hceevki_IzwIR-vBffQ3N2bqX6d0cWQrcO8INr8)

Wildfires are predicted to increase with global climate change, resulting in longer fire seasons and larger areas burned. On the other hand, the use of fire to reduce or dispose of vegetative debris is a worldwide and long-standing practice, since it is a quick and inexpensive way to manage the large amounts of residues. However, the smoke from both sources affects human health, worsens air quality, and can trigger severe regional haze events. At both national and international levels, there is an increasing focus on the establishment of emission inventories and regulations of regional carbon emissions to the atmosphere. From the standpoint of atmospherically-based carbon monitoring programs, fires are challenging because they tend to be extremely variable in both space and time, they are expected to increase in number and severity, and because emission estimates depend on biofuel characteristics and combustion phase. In addition to high spatial and temporal variations in fuel loadings and lack of observational data, one of the most influential and variable parameters is the emission factor. Emission factors (EFs) of selected species for major biomes have been reviewed and summarized by Akagi et al. (2011). However, due to the variability and complexity of the burning conditions and limited on-site experiments, EFs for many biofuels are still uncertain. In addition, EFs measured in the laboratory may substantially differ from those obtained in the field. With the aim of quantifying and characterizing the emissions of trace gases and aerosol particles from representative wildfires and open agricultural burning events, the University of Aveiro has developed techniques to sample the smoke plumes under real conditions and to perform the detailed characterization of both the gas and particulate phases. The new datasets include carbon oxides, organic and inorganic volatile compounds, and a vast array of particulate constituents, including organic and elemental carbon (OC and EC), water soluble ions, metals and hundreds of individual organic compounds. The particulate matter samples were also tested for ecotoxicity by the *Vibrio fischeri* bioluminescence inhibition bioassay. Based on the 50%-effective concentration (EC50), Toxic Units (TU) were calculated. The TU values indicated that most samples presented significant acute toxicity. The comprehensive databases may be useful for numerical models to evaluate the impact of wildfires in the Mediterranean region, which is particularly uncovered by this type of studies. This research may also contribute to improve source apportionment models allowing to estimate the input of wildfires to the atmospheric levels at specific monitoring sites. The results consolidate previous argumentations that smouldering emissions make a significant contribution to the total emissions, and therefore cannot be neglected. The smoke plume is mainly composed of fine particles containing carcinogenic (e.g. polycyclic aromatic hydrocarbons) and compounds that cause oxidative stress (e.g. phenolics). Thus, populations regularly exposed to fire smoke are at high health risk. Smoke particles are carbonaceous in nature with a clear dominance of OC and much higher OC/EC values than those reported in the literature for other sources. Since EC plays a key role in radiative forcing and considering the discrepancies between the various studies, the magnitude of the emission factor for EC remains uncertain and deserves further investigation.

*Acknowledgements:* The experimental work supported by the project “Chemical and toxicological SOURCE PROFiling of particulate matter in urban air (SOPRO)”, POCI-01-0145-FEDER-029574, funded by FEDER, through COMPETE2020 - Programa Operacional Competitividade e Internacionalização (POCI), and by national funds (OE), through FCT/MCTES.

*Reference:* Akagi et al., 2011. Atmos. Chem. Phys. 11, 4039-4072.



### ***Modelos in vitro para avaliação do risco da exposição ao material particulado atmosférico***



**Me. Caroline Scaramboni**

**22 de outubro de 2021 às 14h**

**<https://stream.meet.google.com/stream/d6f1e6b5-2dc1-48f1-9299-fe485ce5c3fc>**

De acordo com a Organização Mundial da Saúde, a poluição do ar causa cerca de 7 milhões de mortes prematuras anualmente, devido a doenças cardiovasculares, câncer de pulmão e doenças respiratórias crônicas [1]. Em outubro de 2013, a Agência Internacional de Pesquisa sobre o Câncer classificou a poluição atmosférica externa como carcinogênica para humanos [2]. O material particulado (MP) é um poluente heterogêneo composto de partículas que variam em tamanho, massa e composição química, o que apresenta um desafio na avaliação dos seus efeitos na saúde. Dentre as diversas abordagens existentes para avaliar os efeitos da exposição ao MP, existem os estudos epidemiológicos, estudos in vivo, e os métodos alternativos, que englobam modelos in vitro e in silico [3]. Neste seminário, serão apresentados alguns modelos in vitro propostos na literatura para avaliação da toxicidade do MP. Entre eles, será discutido o uso do modelo convencional de cultura celular submersa, que envolve a adição de extratos de MP ao meio de cultura, para estimar fatores potenciais de risco de câncer, utilizando a ativação da sinalização de resposta ao dano no DNA como endpoint [4]. Além do modelo convencional, também será discutida a utilização do modelo de cultura na interface ar-líquido, desenvolvido mais recentemente e de maior complexidade, pois busca mimetizar as condições encontradas no trato respiratório humano [5].

[1] World Health Organization. Ambient air pollution: a global assessment of exposure and burden of disease. Geneva: WHO Press, 2016.

[2] International Agency of Research on Cancer. Outdoor Air Pollution - Volume 109 - Monographs on the evaluation of carcinogenic risks to humans. Lyon, France: IARC Press, 2016.

[3] Zavala, J. et al. New Approach Methods to evaluate health risks of air pollutants: critical design considerations for in vitro exposure testing. International Journal of Environmental Research and Public Health, v. 17, p. 2124, 2020.

[4] Dreij, K. et al. Cancer Risk Assessment of Airborne PAHs Based on in Vitro Mixture Potency Factors. Environmental Science and Technology, v. 51, n. 15, p. 8805–8814, 2017.

[5] Upadhyay, S.; Palmberg, L. Air-Liquid Interface: Relevant In Vitro Models for Investigating Air Pollutant-Induced Pulmonary Toxicity. Toxicological Sciences, v. 164, p. 21-30, 2018.

***Biomassa lignocelulósica: Os desafios em transformar resíduos agrícolas em biocombustíveis e outros produtos de interesse comercial.***



**Me. Luis Eduardo Gerolamo**

**29 de outubro de 2021 às 14h**

**<https://stream.meet.google.com/stream/d5565a8d-7397-497d-9ee0-2d820cd7f4fb>**

Em meio à crescente demanda energética mundial provocada pelo advento da revolução industrial ainda no início do século XIX, fatores como a crise do petróleo de 1970, crescimento populacional, aumento da urbanização, riscos de esgotamento das reservas de combustíveis fósseis e aumento na emissão de gases causadores do efeito estufa alavancaram a busca em várias nações por fontes de energia alternativas renováveis e mais limpas (AYDIN, 2019; BISSARO et al., 2020; OLGUIN-MACIEL et al., 2020; REBELLO et al., 2020; ZHOU et al., 2018). Combustíveis fósseis tais como petróleo (e derivados), carvão e gás natural são aqueles não renováveis oriundos de processos de decomposição de matéria orgânica animal e vegetal formados ao decorrer de milhões de anos (MILLER, 2015; SATO, 1991). Já as fontes renováveis são aquelas consideradas (ou praticamente) regeneráveis e inesgotáveis compreendendo a eólica, hidrelétrica, solar, geotérmica, e outras mais modernas como biomassas em geral (BULL, 2001; LU et al., 2020; PAO; FU, 2013).

Enquanto em 2018 os combustíveis fósseis foram responsáveis pelo fornecimento de aproximadamente 81% de toda a energia mundial, no Brasil, recursos renováveis representaram 48% do consumo energético total, sendo 32% oriundo da utilização de biocombustíveis como o etanol (IEA, 2020). No país, o combustível em questão é produzido majoritariamente a partir da fermentação da sacarose contida na cana-de-açúcar, sendo esperado para a safra 2020/2021 uma produção de 29,3 bilhões de litros de etanol total (anidro e hidratado) (CONAB, 2020). Considerando esse montante e o fato de cada tonelada de cana processada gerar 250 Kg de bagaço, será produzido também cerca de 157,7 milhões de toneladas desse subproduto (BERGMANN et al., 2018; CHANDEL et al., 2012), resíduo com grande potencial e rico em energia assim como outras biomassas lignocelulósicas geradas como subproduto de importantes culturas como a soja e milho (CHANDEL et al., 2021).

O termo biomassa lignocelulósica de maneira geral é designado para todo material orgânico de origem vegetal como matérias primas e resíduos agrícolas, lenha, grama e folhagens cuja constituição básica é formada por 3 componentes principais: celulose, hemicelulose e lignina (LIU et al., 2019; SANTOS et al., 2020). Com uma produção estimada de aproximadamente 100 bilhões de toneladas anuais em todo o mundo, tais materiais apresentam energia oriunda do Sol armazenada sob a forma de ligações químicas através da fotossíntese (AYDIN, 2019; LIU et al., 2019, 2020; REBELLO et al., 2020; SANTOS et al., 2020). Nesse sentido, o objetivo dessa apresentação é expor e discutir os principais desafios enfrentados nas 4 etapas principais (pré-tratamento, adição/produção de enzimas, sacarificação e fermentação) envolvendo os diferentes e novos tipos de processamento (como o CBP) propostos para a conversão da biomassa em biocombustíveis (foco no etanol 2G) e alguns outros produtos de valor agregado.



**Dr. Gustavo Parra**

Pesquisador do Instituto Butantã

**05 de novembro de 2021**

às **14h**

<https://stream.meet.google.com/stream/288fc625-8448-4ade-82cb-7864c81576c2>

**O dia a dia na produção/P&D de adjuvantes e vacinas na Divisão BioIndustrial do Serviço de Bacteriologia do Instituto Butantan**

Como é o dia a dia da produção e P&D de adjuvantes e vacinas em um grande produtor de imunobiológicos? Você sabe a trajetória para chegar até aqui? Nesse seminário contarei a minha trajetória desde a graduação em Física Médica pela FFCLRP-USP até o momento em que integrei o quadro multidisciplinar do time de tecnologistas e especialistas da Divisão BioIndustrial do Serviço de Bacteriologia do Instituto Butantan/SP. Em seguida apresentarei como a produção de um adjuvante, IB160, uma emulsão de óleo em água à base de esqualeno, pode ser fundamental na estratégia de fabricação de vacinas contra a gripe pandêmica, a fim de poupar doses da vacina e aumentar a proteção imunológica.

## Polímeros condutores e suas aplicações em supercapacitores.



Me. Farlon Felipe Silva Xavier

12 de novembro de 2021 às 14h

<https://stream.meet.google.com/stream/f9e17a4e-07fc-4225-b81d-7f2829058be8>

Os supercapacitores, dispositivos eletroquímicos com extraordinária capacidade de armazenagem de carga relativo ao seu pequeno tamanho [1], tem sido bastante estudado nas últimas décadas. Neste contexto, os polímeros condutores (PCs) têm se demonstrado promissor para tal aplicação, uma vez que apresentam boa flexibilidade de obtenção e manuseio, são maleáveis, de fácil associação na formação de compósitos e condutividade eletrônica comparável à de metais como Ferro e Cobre [1-4]. Dentre os PCs já estudados, o polipirrol (PPI) têm se destacado por se estável em diferentes meios e ao ar, de fácil obtenção (polimerização química ou eletroquímica), condutividade relativamente alta ( $\sim 600 \text{ S cm}^{-1}$ ) [2], tanto na forma neutra quanto na oxidada, e boa associação com diferentes materiais (Carbônicos, óxidos, sulfetos, hidróxidos, entre outros) [2-4]. Ademais, por meio da associação do PPI com outros materiais, se torna viável a sua aplicação, principalmente por dois principais conceitos: i) condutividade eletrônica aumentada: ao serem sintetizados sobre uma matriz hospedeira (*Síntese template*), por meio da limitação do espaço para o crescimento da cadeia polimérica e da interação PC-matriz, tem a sua condutividade eletrônica aumentada significativamente [2]; e ii) proteção contra lixiviação: ao revestirem os materiais, tais como óxidos, evitam a corrosão (lixiviação) e servem como “um protetor” durante os processos de carga e descarga, o qual aumenta a vida-útil do dispositivo [1,3]. Visto isto, neste seminário serão abordados resultados obtidos pela associação entre o PPI-Nanotubos de Carbono (NTC), por síntese *template* e  $\text{Bi}_2\text{O}_3$ @PPI como estrutura *core/shell* para aplicação como eletrodos em supercapacitores.

### Referências:

- [1] Xavier, F. F. S.; Bruziquesi, C. G. O.; Fagundes, W. S.; Matsubara, E. Y.; Rosolen, J. M.; Silva, A. C.; Canobre, S. C.; Amaral, F. A. “New Synthesis Method for a Core-Shell Composite Based on  $\alpha\text{-Bi}_2\text{O}_3$ @PPy and its Electrochemical Behavior as Supercapacitor Electrode”. *Journal of Brazilian Chemical Society*, v. 30, n. 4, p. 1-8, 2019. <https://doi.org/10.21577/0103-5053.20180192>.
- [2] Maia, D. J.; De Paoli, M. A.; Alves, O. L.; Zarbin, A. J. G.; Das Neves, S. “Síntese de polímeros condutores em matrizes sólidas hospedeiras. Revisão”. *Química Nova*, v. 23, n. 2, p. 204-215, 2000. <https://doi.org/10.1590/S0100-40422000000200011>.
- [3] Omastova, M.; Micusík, M. “Polypyrrole coating of inorganic and organic materials by chemical oxidative polymerization”. *Chemical Papers*, v. 66, n. 5, p. 392–414, 2012. <https://doi.org/10.2478/s11696-011-0120-4>.
- [4] Song, H.; Cai, K.; Wang, J.; Shen, S. “Influence of polymerization method on the thermoelectric properties of multi-walled carbon nanotubes/polypyrrole composites”. *Synthetic Metals*, v. 211, p. 58-65, 2016. <https://doi.org/10.1016/j.synthmet.2015.11.013>



**Me. André Luis Condeles**

**Dia 26 de novembro de 2021 às 14h**

<https://stream.meet.google.com/stream/e9469da1-2807-44fe-856e-ae8756d3b9cb>

### **Compostos borônicos fluorescentes como estratégia no estudo celular de peroxinitrito, um importante hidroperóxido associado a condições patofisiológicas.**

Os metabólitos celulares do oxigênio molecular, conhecidos como espécies reativas de oxigênio (ROS, *Reactive Oxygen Species*) e nitrogênio (RNS, *Reactive Nitrogen Species*), são consideradas inerentes de processos fisiológicos e patofisiológicos, com grande relevância no combate a organismos invasores, e também associadas a doenças cardiovasculares e neurodegenerativas[1, 2]. Dentre essas espécies podemos destacar o peróxido de hidrogênio (H<sub>2</sub>O<sub>2</sub>), ácidos hipoalosos (HOCl e HOBr) e o peroxinitrito (ONOO-)[1]. Nas últimas duas décadas, como resposta à crescente demanda científica por moléculas capazes de detectar tais espécies reativas, surgem compostos cujo produtos de oxidações são facilmente detectados. Boronatos, como são chamados, são ácidos ou esteres borônicos derivados de moléculas fluorescentes ou quimioluminescentes conhecidas, e apresentam excelente resolução cinética e seletividade na detecção de ONOO-[1]. No seminário serão abordados aspectos da reatividade de boronatos com peroxinitrito, e sua seletividade a este peróxido relativo a outros hidroperóxidos supracitados. Será discutida a aplicação de um derivado boronato no estudo da avaliação de fluxos de ONOO- em “tubo de ensaio”[3]. Também será abordado no seminário o uso de outro derivado boronato no estudo da formação quimicamente induzida e biogênica de ONOO- em estudos por imagem em modelos celulares [4].

[1] A. Sikora, J. Zielonka, K. Debowska, R. Michalski, R. Smulik-Izydorczyk, J. Pieta, R. Podsiadly, A. Artelska, K. Pierzchala, B. Kalyanaraman, Boronate-Based Probes for Biological Oxidants: A Novel Class of Molecular Tools for Redox Biology, *Frontiers in Chemistry* 8 (2020) 32.

[2] K. Brieger, S. Schiavone, F.J. Miller, K.H. Krause, Reactive oxygen species: from health to disease, *Swiss Medical Weekly* 142 (2012) 14.

[3] J. Zielonka, A. Sikora, J. Joseph, B. Kalyanaraman, Peroxynitrite Is the Major Species Formed from Different Flux Ratios of Co-generated Nitric Oxide and Superoxide DIRECT REACTION WITH BORONATE-BASED FLUORESCENT PROBE, *Journal of Biological Chemistry* 285(19) (2010) 14210-14216.

[4] N. Rios, L. Piacenza, M. Trujillo, A. Martinez, V. Demicheli, C. Prolo, M.N. Alvarez, G.V. Lopez, R. Radi, Sensitive detection and estimation of cell-derived peroxynitrite fluxes using fluorescein-boronate, *Free Radical Biology and Medicine* 101 (2016) 284-295.



**Me. Caroline Fernandes Grecco**

**03 de dezembro de 2021 às 14h**

<https://stream.meet.google.com/stream/3862b32b-78fc-4dfd-9ff2-121aa20157b8>

### **Técnicas de Preparo de Amostra: LC-MS/MS no modo *column-switching* para bioanálises.**

A bioanálise refere-se à determinação de substâncias xenobióticas (como por exemplo os fármacos e seus metabólitos) e bióticas (como por exemplo as proteínas, neurotransmissores e peptídeos) em matrizes biológicas, incluindo soro, plasma, líquido cefalorraquidiano, saliva e tecido.

Apesar dos recentes e significativos desenvolvimentos no campo bioanalítico, a cromatografia líquida acoplada à espectrometria de massas em tandem (LC-MS/MS), continua sendo a técnica fundamental.

As amostras biológicas possuem vários interferentes endógenos que podem suprimir a ionização das análises LC-MS/MS, diminuindo a seletividade e sensibilidade analítica. Portanto, a etapa do preparo de amostra nas análises LC-MS/MS é imprescindível para eliminar grande parte dos interferentes endógenos da matriz biológica e pré-concentrar os analitos quase sempre presentes em níveis de traços nestas amostras complexas<sup>1</sup>. Dentre as recentes técnicas de preparo de amostra, podemos destacar a LC-MS/MS no modo *column switching* que permite a automação das análises através da hifenação da etapa de preparo de amostra (pré-concentração dos analitos e remoção de grande parte dos componentes interferentes) com o sistema cromatográfico. Além disso, os sistemas online como o *column switching* reduzem o tempo de análise, o consumo de solventes orgânicos e resultam em métodos mais precisos e mais exatos, quando comparados às técnicas de preparo de amostra offline (extração em fase sólida e extração líquido-líquido). Estas análises online são realizadas em duas etapas (preparo da amostra e análise cromatográfica) com o acoplamento de duas colunas (1D e 2D) com diferentes fases estacionárias e dimensões<sup>2</sup>. Neste seminário serão discutidas as diferentes configurações dos sistemas *column switching*, inovadoras fases extratoras utilizadas na primeira dimensão e as principais variáveis que são avaliadas no desenvolvimento de um método para bioanálises.

1. Ocaña-González, J. A., Fernández-Torres, R., Bello-López, M. Á. & Ramos-Payán, M. New developments in microextraction techniques in bioanalysis. A review. *Anal. Chim. Acta* **905**, 8–23 (2016).

2. Domingues, D. S., Souza, I. D. de & Queiroz, M. E. C. Analysis of drugs in plasma samples from schizophrenic patients by column-switching liquid chromatography-tandem mass spectrometry with organic-inorganic hybrid cyanopropyl monolithic column. *J. Chromatogr. B* **993–994**, 26–35 (2015).

ced Pulmonary Toxicity. *Toxicological Sciences*, v. 164, p. 21-30, 2018.



**Me. Suzane Quintana Gomes**

**10 de dezembro de 2021 às 14h**

<https://stream.meet.google.com/stream/0a187857-634d-4c23-8f3d-18d76dab6807>

### **Conceitos e aplicações de estratégias utilizadas na etapa *Hit to Lead* (H2L) do processo de desenvolvimento de novos fármacos.**

O processo de descoberta de novos fármacos envolve várias etapas de pesquisa e desenvolvimento que podem durar mais de uma década, com um gasto total estimado em 1 bilhão de dólares. Esse processo pode ser dividido em duas grandes etapas: descoberta de fármacos (drug discovery) e desenvolvimento de fármacos (drug development). A descoberta de fármacos engloba a identificação e validação de alvos biológicos, triagem de compostos hits, processos de otimização de compostos hits e líderes e seleção do composto candidato para os testes pré-clínicos. A etapa de desenvolvimento de fármacos inclui os testes pré-clínicos, ensaios clínicos e aprovação em agências regulatórias.<sup>1</sup>

Os principais motivos pelo qual os medicamentos falham nos testes clínicos são: não são ativos em modelos *in vivo* ou não são seguros. Para evitar esses tipos de falhas, é necessário que cada etapa da descoberta de fármacos seja pensada e executada para minimizar os problemas *in vivo* de eficácia e segurança, porém, mantendo a potência desse fármaco.

Neste seminário, serão apresentados alguns conceitos químicos e farmacológicos, bem como alguns exemplos da etapa de otimização de compostos *hits*, conhecida como etapa *hit to lead* (H2L). Será demonstrado que, durante o processo *hit to lead*, o químico medicinal tem a função de refinar uma série de compostos, visando melhorar a sua potência e seletividade e, em alguns casos, examinar preliminarmente seu comportamento *in vivo*. Esse refinamento é realizado através dos estudos de SAR (relação estrutura-atividade) e síntese de análogos bioativos, a fim de se obter potenciais candidatos (leads) que passarão por uma última etapa de otimização antes de seguirem para os testes pré-clínicos.

Hughes, J.P., Rees, S., Kalindjian, S.B., Philpott, K.L. Principles of early drug discovery. *Br J Pharmacol.* **2011**,162(6), 1239-1249.

Rocha-Roa, C., Molina, D., Cardona, N. A Perspective on Thiazolidinone Scaffold Development as a New Therapeutic Strategy for Toxoplasmosis *Front Cell Infect Microbiol.* **2018**, 8, 360

Hughes, J.P., Rees, S., Kalindjian, S.B., Philpott, K.L. Principles of early drug discovery. *Br J Pharmacol.* **2011**,162(6), 1239-1249.

Rocha-Roa, C., Molina, D., Cardona, N. A Perspective on Thiazolidinone Scaffold Development as a New Therapeutic Strategy for Toxoplasmosis *Front Cell Infect Microbiol.* **2018**, 8, 360