



Universidade Federal de Minas Gerais  
Instituto de Ciências Exatas  
Departamento de Química

Tel.: 31 3409 5720

Fax: 31 3409-5700

Web: <http://www.qui.ufmg.br>

Belo Horizonte, 27 de Março de 2017

Ilmo. Sr.  
Dr. Dario Windmüller  
Chefe do Departamento de Química da UFMG

Venho por meio desta, solicitar a apreciação e aprovação pela Câmara Departamental dos projetos de Iniciação Científica Voluntária em anexo dos alunos Joel Ingrácia dos Santos e Verônica Andrade de Souza. Esclareço desde já, em razão da minha licença para estágio sabático, que estes alunos são acompanhados nas atividades laboratoriais por alunos de pós-graduação do grupo bem como pela Prof<sup>a</sup>. Denize Fávaro, com quem divido laboratório. Além disso, os alunos contam com reuniões frequentes comigo via Skype e Whatsapp.

Colocamo-nos à disposição para eventuais esclarecimentos.

Atenciosamente,

  
Prof. Tiago A. S. Brandão

Departamento de Química, ICEx/UFMG

*De Acordo.*  


**Plano de Trabalho e de Orientação de Iniciação Científica**

**Programa de Iniciação Científica Voluntária (ICV) da UFMG**

**Título: *Decifrando o mecanismo de formação e degradação da fosfoarginina***

**Coordenador do Projeto: *Tiago Antônio da Silva Brandão***

**Departamento Sede: *Instituto de Ciências Exatas, Departamento de Química***

**Bolsista ICV: *Joel Ingrácia dos Santos (Curso de Química)***

Belo Horizonte, Março de 2017.

O Projeto de Pesquisa do aluno visa avaliar a catálise intramolecular nucleofílica de grupos imidazolinas na reação de clivagem de diésteres de fosfato. Os diésteres de fosfato que serão utilizados são o *p*-nitrofenilfosfato de 1-(2,3-dihidro-1*H*-imidazolil)-2-naftila (**1Imi2P-pNP**) e seu isômero *p*-nitrofenilfosfato de 2-(2,3-dihidro-1*H*-imidazolil)-1-naftila (**2Imi1P-pNP**). Esses compostos são modelos bioinspirados no complexo enzima-substrato da reação catalisada por Arginina Quinase, uma fosfotransferase que utiliza uma arginina nucleofílica e um estado de transição estabilizado por cargas positivas. Assim, o estudo visa à construção de catalisadores dotados de eficiência e especificidade similar à enzimática.<sup>1,2</sup>

O plano de trabalho tem uma dinâmica que visa, ao final do projeto, que o aluno tenha um conhecimento básico do estudo de mecanismos de reações orgânicas de relevância biológica. Deste modo, o aluno aplicará fundamentos científicos diversos das áreas de Química Orgânica, Enzimologia e Físico-Química Orgânica.

O aluno será integrado ao “Laboratório de Catálise e Mecanismos de Reações - LCMR”, grupo criado em 2010, que exerce uma linha de pesquisa experimental no estudo de reações de interesse biológico que têm sido singular no Estado de Minas Gerais. Acredita-se que a qualidade do projeto, o aprimoramento científico do bolsista e seu conhecimento holístico da sociedade o auxiliem na formação profissional, preponderando na sua integração ao nosso Programa de Pós-Graduação. Como parte deste ideal, a avaliação do bolsista com relação à filosofia do grupo e da pesquisa científica será feita periodicamente conforme abaixo:

1. Encontros semanais com o orientador para discussão dos resultados obtidos;
2. Apresentação de seus resultados científicos nas reuniões de grupo;
3. Apresentação de um relatório parcial dos resultados obtidos após seis meses de projeto. Este relatório irá formar a base do relatório final;
4. Participação de reuniões científicas, em que o aluno apresentará os resultados do seu trabalho. Esta será uma forma importante de repercussão do projeto, em que o aluno terá oportunidade de discussão com os demais membros da comunidade científica;
5. Auxiliar na confecção dos artigos científicos, que serão um dos pontos culminantes do projeto.

**Cronograma de atividades:**

O aluno terá contato com técnicas de síntese orgânica, espectroscópicas e cinéticas. A estrutura e recursos são compatíveis com os estudos propostos. Os resultados dos experimentos abaixo formarão a base de evidências científicas para determinação dos mecanismos reacionais:

**Projeto de Pesquisa – Programa de Iniciação Científica Voluntária (ICV) da UFMG**  
**Título: Síntese e caracterização de materiais baseados em MCM-41 e sua aplicação como remediadores de efluentes**

**Coordenador do Projeto: Tiago Antônio da Silva Brandão**

**Departamento Sede: Instituto de Ciências Exatas, Departamento de Química**

**Bolsista ICV: Verônica Andrade de Souza (Curso de Química)**

Belo Horizonte, Março de 2017.

O **objetivo** deste projeto é a *preparação de catalisadores heterogêneos baseados em materiais mesoporosos do tipo MCM-41 com o propósito de remediar antibióticos e pesticidas*. Contaminantes comuns em efluentes que, devido a sua estabilidade, sofrem processos lentos de degradação e apresentam efeitos importantes sobre a saúde humana. A MCM-41 foi o material escolhido como suporte para a catálise heterogênea, pois apresenta estrutura definida, organizada e uma superfície passível de funcionalização.<sup>1</sup>

O projeto é importante, pois resíduos industriais, sejam eles farmacêuticos ou agrícolas, podem ser considerados um problema de saúde pública. Esses resíduos têm compostos que, em contato com o solo ou ambiente aquático, causam desequilíbrio ambiental, mesmo em baixas concentrações. Exemplo disso é o desenvolvimento crescente de resistência bacteriana a antibióticos comuns, o que tem tornado complexo o tratamento de infectados. Outro exemplo é dado pelos pesticidas organofosforados que inibem a acetilcolinesterase e causam desde problemas neurológicos a câncer. Os processos convencionais de tratamento de efluentes não garantem a remoção completa desses micropoluentes.<sup>2</sup> Assim, diversos estudos têm buscado a remoção de contaminantes de efluentes, seja por adsorção seja por degradação.<sup>3</sup> Com base nestes aspectos, acredita-se que um sistema de catálise heterogênea possa ser introduzido no tratamento de efluentes, pois, apresentam a principal vantagem de ser facilmente recuperado e, por conseguinte reutilizado, quesito problemático em catalisadores homogêneos.

A coordenação de metais de transição a sílicas do tipo MCM-41 permite uma série de aplicações que incluem a catálise de reações orgânicas, adsorção ou degradação.<sup>4,5</sup> A escolha da MCM-41 baseia-se em suas características físico-químicas e estruturais. Esse material apresenta elevada área superficial, com grupos hidroxila que podem ser facilmente funcionalizados com agentes silanizantes comerciais. Neste trabalho, a MCM-41 será funcionalizada com um agente silano ramificado com grupo amino, que posteriormente coordenará íons cobre (II). O material obtido será caracterizado por espectroscopia na região do infravermelho, análise térmica, análise elementar, adsorção e dessorção de N<sub>2</sub>, que permitirão conhecer a natureza do material bem como verificar a eficiência do processo de funcionalização. De modo a avaliar o papel catalítico da MCM-41, os produtos de reação serão monitorados em função do tempo por espectros de absorção no UV-Vis. Com os resultados deste trabalho espera-se ampliar o rol de sistemas catalíticos heterogêneos disponíveis para remediação de sistemas e tratamento de efluentes.

1. Hoffmann, F. *et al. Angew. Chem. Int. Ed.* **2006**, *45* (20), 3216-3251.

2. Margot, J. *et al. Wiley Interdiscip. Rev. - Water* **2015**, *2* (5), 457-487.

3. Rivera-Jimenez, S. M. *et al. Microporous Mesoporous Mater.* **2010**, *132* (3), 470-479.

4. Moorthy, M. *et al. J. Porous Mater.* **2016**, *23* (4), 977-986.

5. Hosseinzadeh, R. *et al. Catal. Lett.* **2016**, *146* (7), 1194-1203.

### Cronograma de atividades:

O bolsista terá contato com técnicas de síntese, análises termogravimétricas e espectroscópicas, estudos de adsorção, além de cinética relacionada ao estudo de mecanismos de reações orgânicas. A seguir estão resumidas as metodologias e possíveis resultados para os estudos propostos neste projeto:

- i. *Síntese dos materiais mesoporosos*: a MCM-41 não funcionalizada será sintetizada pelo método de Mokhonoana and Coville.<sup>1</sup> Basicamente, tetraortossilicato é adicionado lentamente em uma solução alcalina com brometo de cetiltrimetilamônio (CTAB) sofrendo polimerização para formar estruturais hexagonais induzidas por um *template* micelar. O CTAB é removido em etapas de lavagem e calcinação.
- ii. *Funcionalização da MCM-41 com grupos amino e coordenação com Cu<sup>2+</sup>*: a funcionalização da MCM-41 será realizada com 3-aminopropiltriétoxissilano (APTES) em refluxo com tolueno por 24 horas conforme descrito por Luštická *et al.*<sup>2</sup> A coordenação de Cu<sup>2+</sup> será realizada com o respectivo sal de cloreto.
- iii. *Caracterização dos materiais mesoporosos*: espectroscopia na região do infravermelho e análise térmica serão utilizadas para identificar a identidade e grau de funcionalização dos materiais. Técnicas como análises de adsorção e dessorção de N<sub>2</sub>, permitirão o cálculo de área e distribuição de poros do material. Dados de difração de raios-X indicarão o grau de organização do material mesoporoso.
- iv. *Monitoramento cinético*: as reações de degradação de amoxicilina e análogos de pesticidas serão acompanhadas em função do tempo por espectrofotometria acoplada a um sistema de fluxo contínuo mantido por uma bomba peristáltica. Estudos serão conduzidos para diferentes materiais funcionalizados, em diferentes pHs e sob condições de reuso do catalisador heterogêneo.

De acordo com o exposto acima, abaixo está o **cronograma de atividades** para um ano em que o plano de trabalho do bolsista de iniciação científica pretende concluir:

Cronograma de atividades para um ano	Bimestre					
	1	2	3	4	5	6
Levantamento e atualização bibliográfica	x	x	x	x	x	x
i. síntese dos materiais mesoporos	x	x	x			
ii. funcionalização dos materiais		x	x	x		
iii. coordenação com fons metálicos				x	x	
iv. Obtenção das cinéticas de hidrólise				x	x	x
Tratamento dos dados		x	x	x	x	x
Preparação de relatórios			x			x

### Referências Bibliográficas

- (1) Mokhonoana, M.; Coville, N. *J. Sol-Gel Sci. Technol.* **2010**, *54*, 83.
- (2) Luštická, I.; Vrbková, E.; Vyskočilová, E.; Paterová, I.; Červený, L. *React. Kinet. Mech. Cat.* **2013**, *108*, 205.