

10 a 15 de dezembro

XV Semana de Iniciação Científica da URCA

I Encontro de Líderes de Grupos de Pesquisa do Ceará
II Encontro de Pesquisadores de Bioprospecção do Nordeste

CIÊNCIA E SUSTENTABILIDADE: A CONTRIBUIÇÃO DA PESQUISA

DESENVOLVIMENTO DE UM PROGRAMA PARA TRATAMENTO DE DAODS ESPECTRAIS

Ana Márcia Rodrigues dos Santos (Universidade Regional do Cariri)
Diniz Maciel de Sena Junior (Universidade Regional do Cariri - URCA)

A investigação de produtos naturais com potencial atividade farmacêutica é uma tarefa complicada devido ao grande número de compostos existentes nas amostras (de extratos ou óleos), e à própria estrutura molecular dos mesmos. Com a finalidade de investigar a estrutura de entidades tão pequenas como as moléculas, devemos utilizar ferramentas de tamanho adequado, e a radiação eletromagnética é uma delas. Sua interação com as substâncias resulta em uma variedade de fenômenos, dentre os quais as vibrações das ligações moleculares, que podem ser ativadas pela radiação na região do infravermelho. Conforme aumenta a complexidade de uma estrutura molecular, mais difícil torna-se a interpretação de seu espectro no infravermelho. Para facilitar sua análise, cálculos teóricos podem ser utilizados para simular o espectro de uma substância com boa precisão. A fim de se obter uma melhor correlação entre os espectros calculados e aqueles obtidos experimentalmente, faz-se necessário corrigir os primeiros através da aplicação de um fator de escala apropriado, que pode variar em função do sistema estudado e/ou do método de cálculo empregado. Este fator pode ser calculado a partir dos dados teóricos e experimentais, através de um ajuste de mínimos quadrados, a fim de minimizar a diferença entre eles, como descrito na literatura por Scott e Radom. Seguindo sua metodologia, a obtenção de fatores de escala para uma variedade de espectros tem sido feita no Laboratório de Bioinformática Avançada utilizando planilhas eletrônicas, o que demanda intervenção do usuário e um tempo considerável de execução, sem mencionar a susceptibilidade a erros de operação. Com o propósito de tratar os dados espectrais de maneira rápida e confiável, torna-se importante desenvolver um programa próprio para isso. A linguagem de programação ideal para este problema é o FORTRAN (FORMula TRANslation System), inventada por John Backus, da IBM, na década de 50, com o objetivo de tratar dados numéricos de forma eficiente. Assim, o presente projeto tem como objetivo geral desenvolver um programa de computador para calcular as correlações entre dados experimentais e teóricos de espectros vibracionais (Raman e infravermelho), obtendo os respectivos fatores de escala e facilitando a interpretação dos dados tratados. O programa deve ser capaz de realizar a leitura dos dados teóricos e experimentais previamente arquivados, e o cálculo automático dos fatores de escala para toda região espectral, e para as regiões de alta e de baixa frequência separadamente, como também tem sido feito na literatura. Inicialmente ele será testado com dados já trabalhados para verificar sua exatidão, e sendo aprovado, passará a ser o principal método para obtenção dos fatores de escala no laboratório.

Palavras-chave: Espectros vibracionais, Fatores de escala, Infravermelho, Raman, FORTRAN.



DISTRIBUIÇÃO DE PAULING A PARTIR DO PERIODIC TABLE

Rafael Silva Santos (E. E. E. P. Otília Correia Saraiva)
Talita Vanessa Filgueira Quesado (Escola Estadual de Educação Profissional Otília Correia Saraiva)
Cristian Gonçalves Araújo (Universidade Regional do Cariri – URCA)
Francisco Augusto Silva Nobre (Universidade Regional do Cariri – URCA)

Para um bom entendimento da tabela periódica, o educando primeiramente precisa saber de alguns conhecimentos prévios. Para isso é necessário saber que a mesma é formada por dezoito colunas, que também podem ser chamadas de grupos ou famílias, que tem sete períodos, que podem ser chamado também de linhas horizontais. Cada elemento é representado por um símbolo, seu nome, valor da massa atômica e número atômico, sendo que todos os elementos são organizados na tabela de forma crescente de número atômico, no sentido da esquerda para a direita. A partir do número atômico, o educando, através do diagrama de Pauling, poderá saber em que grupo e qual o período que o elemento esta situado na tabela, e se ele é de transição ou não. A partir disso podendo haver dificuldades dos educandos ao fazer a distribuição de Pauling, pois a mesmas requer muita atenção para que não ocorra nenhum erro, o presente trabalho visa apresentar uma ferramenta que o software Periodic Table oferece. O mesmo consiste de uma Tabela Periódica interativa, e que conta com a ferramenta de visualização da distribuição de Pauling. Com isso, no caso, com tal visualização, acreditamos que os educandos possam suprir suas dúvidas e aprender de modo significativo.

Palavras-chave: Periodic Table, Distribuição de Pauling.

10 a 15 de dezembro

XV Semana de Iniciação Científica da URCA

I Encontro de Líderes de Grupos de Pesquisa do Ceará
II Encontro de Pesquisadores de Bioprospecção do Nordeste

CIÊNCIA E SUSTENTABILIDADE: A CONTRIBUIÇÃO DA PESQUISA

EFEITOS DOS MÉTODOS DE CÁLCULO DE CARGAS PARCIAIS NA DOCAGEM MOLECULAR

Cícera Jacielly de Matos Cassiano (Universidade Regional do Cariri-URCA)
Francisco Gildivan Fernandes dos Santos (Universidade Regional do Cariri)
Diniz Maciel de Sena Junior (Universidade Regional do Cariri)

A biorregião do Cariri apresenta uma rica diversidade em sua flora e fauna, sendo a principal fonte de pesquisa do Programa de Mestrado em Bioprospecção Molecular (MBM). Testes microbiológicos e farmacológicos verificam a potencialidade de certas substâncias quanto à sua utilização como medicamento. Uma ação no sentido de minimizar o uso de animais nas pesquisas envolve a realização de simulações computacionais, selecionando um grupo menor de substâncias a serem testadas em efeitos antiinflamatórios ou gastroprotetores, por exemplo. Quando se conhece a estrutura de uma proteína alvo pode-se utilizar a química computacional para avaliar a energia de interação entre esta e um potencial ligante sob uma variedade de posições possíveis, em um processo chamado de docagem molecular. Para o cálculo das interações, deve-se considerar as cargas parciais dos ligantes, e dentre os métodos principais de cálculo das mesmas temos: Gasteiger, Mulliken e Löwdin. Programas de cálculos de estrutura eletrônica, como o G.A.M.E.S.S. (General Atomic and Molecular Structure System), utilizado no Laboratório de Bioinformática Avançada, exibem os resultados dos dois últimos. Já o programa utilizado para realizar a docagem molecular, AutoDockTools, calcula as cargas parciais dos ligantes pelo primeiro método. Para avaliar o potencial antiinflamatório das substâncias, uma docagem inicial, com os parâmetros padrões, entre o ligante e a ciclooxigenase-2 (COX2), cuja estrutura encontra-se disponível no repositório Protein Data Bank, disponível em www.pdb.org, será realizada com moléculas de reconhecida afinidade com a COX2, como o celecoxib, e outras não tão seletivas, como aspirina e ibuprofeno, cujas estruturas cristalinas encontram-se depositadas no supra citado banco de dados. Com o objetivo principal de observar a qualidade dos cálculos de docagem molecular quando diferentes métodos de cálculo de cargas parciais para o ligante são usados, utilizaremos uma metodologia em que as moléculas terão suas geometrias otimizadas no nível de teoria MP2 com a base 6-31G(d, p), e uma tabela com as coordenadas moleculares e as cargas parciais de Mulliken e Löwdin será elaborada. Estas cargas substituirão as cargas de Gasteiger geradas pelo AutoDockTools, para então ser realizada uma nova docagem, com os demais parâmetros inalterados, a fim de se identificar as diferenças nas energias de interação e posição de encaixe. Espera-se com essa pesquisa promover o uso da química computacional para complementar e dar suporte aos trabalhos experimentais de bioprospecção molecular, além de formar recursos humanos em química computacional, enriquecendo a interdisciplinaridade das pesquisas na universidade.

Palavras-chave: Cargas parciais, Gasteiger, Mulliken, Löwdin, Docagem molecular.



INVESTIGAÇÃO *In Silico* DO POTENCIAL ANTIINFLAMATÓRIO DO METIL EUGENOL

Cícera Jacielly de Matos Cassiano (Universidade Regional do Cariri-URCA)
Diniz Maciel de Sena Júnior (Universidade Regional do Cariri)

Com o desenvolvimento das ciências naturais, os produtos de origem vegetal, que sempre tiveram grande importância, dadas suas propriedades terapêuticas ou tóxicas, tornaram-se objetos de análise científica. A busca por agentes farmacologicamente ativos tem levado ao avanço nas pesquisas. *Vanillosmopsis arborea* (Asteraceae) é uma árvoreta endêmica da biorregião do Araripe que mede cerca de 4 m e possui em seu caule um óleo essencial com elevado valor econômico por causa do alto teor de um de seus constituintes químicos, o α -bisabolol, muito utilizado dermatologicamente pela sua atividade antimicrobiana e anti-inflamatória, além da baixa toxicidade. Dentre outros constituintes do seu óleo essencial, foi escolhido o metil eugenol como ligante para participar das simulações de docagem molecular, tendo a ciclooxigenase-2 (COX2) como receptor. A ciclooxigenase-2 está envolvida nos processos inflamatórios, bem como a ciclooxigenase-1 (COX1), entretanto busca-se uma maior seletividade com a primeira, a fim de minimizar os efeitos adversos dos antiinflamatórios não seletivos, que ligam-se também à COX1 causando problemas gastrointestinais. As estruturas da COX2 com antiinflamatórios conhecidos (especificamente: diclofenaco, celecoxib, naproxeno, flurbiprofeno, e SC-558), além daquela com seu substrato natural, ácido araquidônico, foram obtidas no repositório Protein Data Bank. Os arquivos foram tratados utilizando o programa Chimera, a fim de salvar separadamente os dados da proteína e do respectivo ligante. Em seguida, utilizando a suíte de programas AutoDockTools, os parâmetros da docagem foram preparados, com atenção especial ao posicionamento do sítio ativo onde encontrava-se cada ligante. Um cálculo de docagem foi realizado com estes parâmetros utilizando o programa Autodock4, e as energias de ligação para cada ligante foram anotadas em uma tabela. Então, os cálculos foram novamente repetidos com os mesmos parâmetros, à exceção do ligante, onde desta vez foi usada a estrutura do metil eugenol, ou seja, fazendo com que este ocupasse o sítio ora ocupado pelos antiinflamatórios anteriores. As energias de ligação foram acrescentadas à tabela para comparação. Percebeu-se que o metil eugenol apresentou energias de ligação bem acima daquelas obtidas com os antiinflamatórios reconhecidos. As maiores diferenças surgiram quando comparado ao celecoxib e SC-558, enquanto as menores foram observadas em comparação com o naproxeno e flurbiprofeno. Conclui-se deste estudo que, de acordo com as simulações realizadas, o metil eugenol não apresenta potencial antiinflamatório significativo.

Palavras-chave: Óleo essencial, metil eugenol, docagem molecular, COX-2, anti-inflamatório.



O ESTUDO DA SOLUBILIDADE E SAIS COM A AJUDA DO PhET

Maria Luisa Farias Grangeiro (E. E. E. P. Otília Correia Saraiva)
Débora Ayeska de oliveira santos(Escola Estadual de Educação Profissional Otília
Correia Saraiva)
Andrevaldo Glaudson Pereira Tavares(Escola Estadual de Educação Profissional Otília
Correia Saraiva)
Francisco Augusto Silva Nobre(Universidade Regional do Cariri – URCA)

Os educandos passam por uma desmotivação em sala de aula em relação ao estudo das Ciências. Em grande parte dos casos essa desmotivação é pelo fato das ciências serem apenas passada de forma verbal, do educador para o educando, e pelo fato de nem sempre existir um Laboratório de Química, Física e Biologia com laboratorista preparado ou ate mesmo nem ter laboratório na escola. Para mudar a realidade da desmotivação e o pensamento de que é muito difícil aprender Química, o presente trabalho tem como objetivo fazer com que os alunos possam aprender os conteúdos de Química fazendo interdisciplinaridade com a Informática. Com o auxilio do software educacional PhET, mostraremos que as aulas de Química serão mais participativas, e o uso do computador será um incentivo a mais para a participação do educando na aula, chegando-se ao aprendizado esperado. Com o auxilio da simulação “Sais e Solubilidade”, que aborda principalmente a área relacionada a soluções químicas, o aluno poderá conhecer os sais, como são dissolvidos na água, sua solubilidade, os tipos de sais e como estes se formam, além de poder ainda criar seus próprios sais e ver como o mesmo se comporta em uma solução. A partir do trabalho apresentado, concluímos que a participação do educando nas aulas é de extrema importância, e que existem materiais alternativos que podem ser utilizados para se obter tal participação, sendo o PhET, um auxiliador nas aulas de Química.

Palavras-chave: PhET, Solubilidade, Sais, Química

10 a 15 de dezembro

XV Semana de Iniciação Científica da URCA

I Encontro de Líderes de Grupos de Pesquisa do Ceará
II Encontro de Pesquisadores de Bioprospecção do Nordeste

CIÊNCIA E SUSTENTABILIDADE: A CONTRIBUIÇÃO DA PESQUISA

PREVENÇÃO DA NEFROPATIA EM PACIENTES HIPERTENSOS E DISLIPIDÊMICOS: IMPORTÂNCIA DO CONTROLE GLICÊMICO

Adriana Andrade Arraes (Faculdade de Ciências Aplicada Dr. Leão Sampaio)

José Geraldo de Alencar Santos Júnior (Faculdade de Ciências Aplicada Dr. Leão Sampaio)

José Júnior dos Santos Aguiar (Faculdade de Ciências Aplicada Dr. Leão Sampaio)

Helenicy Nogueira Holanda Veras (Faculdade de Ciências Aplicada Dr. Leão Sampaio)

A desordem renal caracteriza-se por proteinúria, hipoalbuminemia, hiperlipidemia e edema generalizado. Os não efeitos funcionais da parede capilar glomerular podem advir de etiologias variadas. A nefropatia é uma complicação crônica, afeta cerca de um terço dos pacientes hipertensos e diabéticos, a detecção precoce possibilita a atuação nos fatores de risco modificáveis, intervindo favoravelmente no curso da doença. Objetivou-se analisar a estima da prevenção das nefropatias em pacientes hipertensos e dislipidêmicos e a importância do controle glicêmico. Trata-se de uma revisão de literatura extraída de artigos disponíveis no Pubmed, SciELO utilizando com descritores: insuficiência renal, diabetes mellitus, dislipidemia, nefropatia, nefrosclerose, publicados no período de 2005 a 2012. A hipertensão arterial, hiperglicemia e a dislipidemia apresentam-se relevante como componentes da síndrome metabólica. A hiperglicemia promove uma maior susceptibilidade à nefropatia e doença cardiovascular. O controle glicêmico reduz os riscos de desenvolvimento e progressão das complicações crônicas. A proliferação celular mesangial e a produção excessiva de matriz extracelular decorrem do aumento da taxa glicose. A glicose aumenta o fluxo da via dos polióis, nessa via a glicose é reduzida a sorbitol sob a ação da aldose redutase, o acúmulo do sorbitol ocasiona estresse hiperosmótico para as células, diminuição do mioinositol intracelular e da atividade da ATPases e Na^+/K^+ . O aumento dos produtos da glicação não enzimática, proteínas glicadas e lipoproteína são reconhecidos por macrófagos, podendo formar placas ateroscleróticas. Ativa fosfolipases intracelular, promove a formação de ácido araquidônico, que pode ser metabolizado em prostaglandina pela ciclooxigenase. A ativação da via da PKC estimula a síntese proteica e via das hexosaminas estimula a síntese de citocinas, TGF- β e endotelinas. O aumento angiotensina II nas células mesangiais pelo aumento intracelular de renina eleva a pressão sanguínea. A hipertensão e as dislipidemias aceleram o desenvolvimento da aterosclerose diminuindo o lúmen do vaso sanguíneo ocasionando isquemia, o aumento da pressão intraglomerular também pode levar a glomerulonefrose. O tratamento da hipertensão arterial pode modificar o perfil lipídico e a aterosclerose induzida pela hiperlipidemia, atenuando a disfunção endotelial e diminuir o dano renal. Portadores de diabetes mellitus estão susceptíveis a alterações microvasculares causadas por lesões nos capilares renais, por alterar a permeabilidade vascular na microcirculação através de reações bioquímicas, favorecendo a passagem de macromoléculas nos glomérulos. O uso de IECA pode reduzir os níveis de excreção de albumina em pacientes diabéticos e hipertensos, uma dieta com restrição proteica pode retardar a progressão da nefropatia. A incidência da doença renal crônica tem aumentado a cada ano no nosso país, tornando-a um problema de saúde pública, tendo com principal fator doenças crônicas degenerativas como, hipertensão arterial e o diabetes mellitus não controlados, sendo fundamental o diagnóstico precoce através do controle dos níveis glicêmicos, lipídicos, sumário de urina, dosagem e depuração de creatinina e microalbuminúria.

Palavras-chave: Dislipidemia, Hipertensão, *Diabetes mellitus*, Síndrome metabólica, Nefropatia.

10 a 15 de dezembro

XV Semana de Iniciação Científica da URCA

I Encontro de Líderes de Grupos de Pesquisa do Ceará
II Encontro de Pesquisadores de Bioprospecção do Nordeste

CIÊNCIA E SUSTENTABILIDADE: A CONTRIBUIÇÃO DA PESQUISA

CONFECCÃO DE DESTILADOR A VÁCUO COM MATERIAIS DESCARTADOS

Ana Carolina de Oliveira Nobre (EEEP Santa Rita)

Ana Carolina de Oliveira Nobre (Escola Estadual de Educação Profissional Santa Rita)

Luiz Carlos Nunes da Silva (Escola Estadual de Educação Profissional Santa Rita)

Antônio Marcelo Vieira Batista (Escola Estadual de Educação Profissional Santa Rita)

A crescente busca pelo enquadramento do Brasil nos parâmetros de desenvolvimento sustentável e química verde representa um interesse industrial e econômico das grandes empresas da atualidade. O desenvolvimento de novos materiais é uma vertente que está agregada à inovação tecnológica, proporcionando a instalação de uma bioeconomia favorável ao crescimento do país (MELO, 2010). Com o aproveitamento correto de resíduos domésticos, pode-se incluir um novo ramo para os instrumentos laboratoriais indispensáveis, o que auxilia no aparato de laboratórios escolares. Dessa forma, o presente projeto teve como objetivo a construção de destilador a vácuo a partir de materiais reutilizáveis, os quais foram conectados a um destilador simples, presente no Laboratório de Ciências da escola E.E.E.P. Santa Rita. Na construção deste aparelho, foram utilizados: destilador simples, mangueira de borracha, condensador, dois suportes universais com garra, balão de fundo chato, adaptador, tubo de ensaio com saída lateral. Após a confecção foi observado a redução da pressão interna e do tempo de destilação de duas soluções: hexano-óleo e água-etanol. A pressão interna foi alterada de 780mmHg para 546mmHg e 750mmHg para 528mmHg, respectivamente. O tempo de duração do processo teve um intervalo de redução de 8 minutos, para ambas as misturas. A construção do destilador a vácuo obteve êxito no resultado final, por promover a diminuição no tempo de processos de separação de misturas. Paralelamente, este trabalho permitiu o incentivo dos alunos a projetos de pesquisas científicas, bem como à preservação ambiental.

Palavras-chave: Robótica, Inovação, Sustentabilidade, Tecnologia, Engenharia Química.