

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

19 de dezembro - Prof. Ruth Rufino do Nascimento, IQB, UFAL

Semioquímicos da moscas-das-frutas, *Anastrepha fraterculus* (Diptera: Tephritidae)

12 de dezembro - Prof. Claudete Fernandes Pereira, UFRPE

Uso da Espectroscopia no Infravermelho Próximo (NIR) na Análise de Combustíveis

O seminário descreverá métodos analíticos baseados na espectroscopia no infravermelho próximo (NIR) desenvolvidos pelo grupo de pesquisa da palestrante para análise de combustíveis (diesel, biodiesel e gasolinas). Para tanto, serão consideradas as ferramentas quimiométricas utilizadas para construção dos modelos de calibração multivariada, bem como ferramentas para seleção de variáveis espectrais e transferência de modelos de calibração.

28 de novembro - Prof. Thereza Soares, DQF-UFPE

Simulações da Membrana Externa de Bacterias Gram-Negativas

21 de novembro - Prof. Jefferson Princival, DQF-UFPE

Aplicação da Biocatálise na Síntese de Substâncias Bioativas

Nas últimas décadas as áreas de química orgânica, química farmacêutica e química biológica, evidenciaram um crescente interesse por substâncias quirais, enantiomericamente puras. O grande interesse nessas áreas vem da necessidade de se produzir substâncias com alto excesso enantiomérico, e de se testar as diferentes respostas do comportamento que essas exercem em organismos vivos. Esse comportamento diferenciado de substâncias quirais, produzidos por cada substância, é o que se chama de atividade biológica. Neste seminário serão apresentadas algumas propostas de síntese de substâncias que apresentam atividade biológica, em sua forma enantiomericamente pura ou enriquecida, e a aplicação da Biocatálise como etapa chave de desracemização.

14 de novembro - Prof. Mozart Neves, DQF-UFPE, Movimento Educação para Todos, ex-Reitor da UFPE

Tendências e Desafios da Educação no Brasil

09 de Novembro - Colóquio Especial

10:00 - 10:45 hrs. Prof. Madeleine Ramstedt, Umeå University, Suécia: Preventing bacterial attachment and biofilm formation onto surfaces

10:45 - 11:30 hrs. Prof. Julien Gautrot, Queen Mary University of London, Inglaterra: Polymer brushes for biomedical applications: multi-scale control of biointerfaces

07 de Novembro - Prof. James P. Rihel, Swenson College of Science and Engineering, University of Minnesota

The Origins and Consequences of Mirror-Image Asymmetry

Molecules or other objects for which the mirror-image structure is not superimposable on the original object are said to be “chiral”. This talk will be concerned with the importance of chirality from the molecular world of L-amino acids, and D-sugars, to larger bio-macromolecules, to the macroscopic world of living organisms, and the consequences of chirality in our everyday life. We will briefly present current theories concerning the origin of chirality on earth, and the various methods that chemists use to determine absolute chiral structures. Other topics such as the importance of chirality in insect communication, the pharmaceutical industry, and the senses of taste and smell will also be presented. At the end of the talk we will speculate on the connection between molecular chirality and the right-handedness of *Homo sapiens*, and the ways that chirality has influenced the structures and activities of modern society.

31 de outubro - Prof. Hercílio Melo, Escola Politécnica - USP

Estudo do Comportamento Eletroquímico de Revestimentos Híbridos para a Proteção contra a Corrosão de Ligas de Alumínio Ligas de alumínio de elevada resistência mecânica, principalmente aquelas pertencentes às séries 2XXX e 7XXX, são amplamente utilizadas na estrutura de aeronaves. Para uso industrial, estes materiais são sempre protegidos por um complexo sistema de pintura que inclui a aplicação de um pré-tratamento, um primer e um top-coat. Durante décadas o pré-tratamento empregado para as ligas de Al de elevada resistência mecânica tem sido realizado em soluções contendo íons Cr(VI). Apesar de baratos e muito eficientes tanto no que concerne às propriedades de adesão como no auxílio à resistência à corrosão, íons Cr(VI) são classificados como poluentes e cancerígenos e seu

uso industrial tem sido banido ou bastante restringido em diversos segmentos da indústria de tratamento de superfície. Nos últimos anos revestimentos híbridos orgânico-inorgânico obtidos pela técnica sol-gel têm sido investigados como potenciais substitutos aos pré-tratamentos à base de íons cromato. Estes revestimentos são obtidos a partir da hidrólise de precursores orgânicos e inorgânicos de alcóxidos de silício que são aplicados sobre a superfície do metal a ser protegido. Após procedimento de cura, é formada uma densa rede reticulada que serve como barreira contra o ataque de espécies agressivas, se constituindo em uma alternativa viável e ambientalmente amigável aos pré-tratamentos à base de cromatos. Nestes sistemas, a presença de grupos funcionais na estrutura reticulada os torna compatíveis com revestimentos orgânicos que são aplicados para a proteção contra a corrosão. Neste seminário será apresentado o estudo do comportamento anticorrosivo de um revestimento híbrido orgânico-inorgânico formado a partir dos precursores TEOS (tetraetilortosilicato) e GPTMS (3-glicidóxi-propiltrimetóxisilano), aplicado sobre a liga 2024-T3. Foram utilizadas as técnicas eletroquímicas espectroscopia de impedância eletroquímica (EIS) e curvas de polarização anódica e catódica. A microestrutura dos revestimentos foi caracterizada por MEV-EDS e por Microscopia de Força Atômica. Também foi investigado o efeito da adição de íons Ce(III) ou Ce(IV) sobre as propriedades anticorrosivas do revestimento produzido.

24 de outubro - Prof. Marcelo Zaldini, DCF-UFPE

Desenvolvimento e aplicações de abordagens *in silico*

O Laboratório de Química Teórica Medicinal (LQTM), localizado no Depto. de Ciências Farmacêuticas da UFPE, têm desenvolvido e aplicado diversas abordagens *in silico* na Inovação Terapêutica, particularmente nos estudos que envolvem moléculas de interesse biológico ou farmacológico. Nesta apresentação, serão mostrados os resultados mais recentes de aplicação de métodos de computação distribuída nesta área, além dos resultados obtidos em problemas químicos dentro deste contexto.

17 de outubro - Prof. Mauro Copelli, DF-UFPE

Física e Neurociência: Universalidade na dinâmica cerebral de ratos

A última década testemunhou o crescimento rápido das aplicações de conceitos e métodos de

Física Estatística a problemas de fronteira em Neurociência. O ano de 2003 foi particularmente importante nesta história, porque revelou o trabalho experimental de Beggs & Plenz demonstrando a existência de "avalanches neuronais" em fatias corticais de ratos. Estes eventos de duração rápida são notáveis por não terem um tamanho característico: assim como incêndios florestais, avalanches em pilhas de arroz e explosões solares, sua distribuição de tamanhos é invariante por escala (isto é, segue uma lei de potência). Estes resultados levaram a um grande número de trabalhos que buscam relacionar o funcionamento do cérebro a fenômenos críticos, retomando uma tradição de modelos de criticalidade auto-organizada que foi efervescente em Física nos anos 90. Uma breve revisão desta área emergente da Neurociência mostra que os sistemas experimentais estudados têm sido geralmente "reduzidos", como preparações in vitro ou animais anestesiados. Mostraremos que, mesmo em animais não-anestesiados e em plena atividade, é possível detectar assinaturas de fenômenos críticos com propriedades universais.

10 de outubro - Prof. André Luis Souza dos Santos, IMPG-UFRJ

Inibidores de aspártico proteases: fármacos com ação antimicrobiana

05 de outubro - Profa. Verônica Teichreib, CIN-UFPE

Realidade Aumentada: Desenvolvimentos recentes e Tendências de pesquisa

A Realidade Aumentada é praticamente tão antiga como a Realidade Virtual, tendo as primeiras publicações relacionadas sido divulgadas no início dos anos 90. Porém, a Realidade Aumentada apresenta mais dificuldades que a Realidade Virtual para se tornar aplicável, tanto em pesquisa como em aplicações industriais. Uma razão principal para isso é que cenários típicos de Realidade Aumentada herdam todos os desafios da Realidade Virtual, porém maiores: eles necessitam de rastreamento assim como Realidade Virtual, mas em um ambiente potencialmente infinito e com poucas alternativas para instalar uma estrutura de suporte no ambiente; eles requerem simulação e renderização realística de tempo real, mas integrados com streaming de vídeo e executando em uma plataforma móvel com pequeno poder de processamento, entre outros. Um desafio adicional é construir interfaces naturais para sistemas de Realidade Aumentada, seguindo novos paradigmas que respeitam a percepção humana. Os desenvolvimentos recentes em hardware e software trouxeram uma

série de oportunidades significativas. Esta palestra apresentará uma visão geral sobre os desenvolvimentos mais recentes na área de Realidade Aumentada, bem como o uso da Realidade Aumentada em domínios de aplicação multi-disciplinares.

19 de setembro - Prof. Jorge Neves, DQF-UFPE

A Química Biológica e a Biologia Estrutural sob o Ponto de Vista da Ressonância Magnética Nuclear.

12 de setembro - Prof. Arnóbio da Gama, DQF-UFPE e Diretor Científico da FACEPE

Pesquisa e Formação de Recursos Humanos em Pernambuco: O Papel da FACEPE.

Serão apresentados os programas que a FACEPE está operando para apoiar o desenvolvimento da pesquisa científica e tecnológica e a inovação nas empresas em Pernambuco e para formar recursos humanos qualificados para dar suporte a esse desenvolvimento, particularmente a interiorização da pesquisa e da pós-graduação e o atendimento às áreas estratégicas e ao estudo das políticas públicas de impacto social e ambiental.

05 de setembro - Prof. Roberto D. Lins, DQF-UFPE

Modelagem de Sistemas Biológicos Complexos e Interface com Experimento.

29 de agosto - Prof. Grégoire Demets, DQ-FFCLRP-USP

Em busca de Aplicações para as Cucurbiturilas.

A família de compostos denominada cucurbiturilas vem ganhando cada vez mais espaço na literatura científica. Apesar de pouco conhecidos no Brasil, estes compostos revelaram uma química totalmente particular nas áreas de química de inclusão, catálise e arranjos supramoleculares. Apesar disto, ainda são poucas as aplicações práticas na indústria quando as comparamos às ciclodextrinas e outros macrociclos que já ocupam uma posição de destaque na produção industrial. Com isto em mente, procuramos desenvolver novas idéias com potencial prático nas áreas de tecnologia de nanofiltração, fertilizantes, sensores, materiais funcionais e catalisadores. O colóquio há de abordar esta vertente da pesquisa que desenvolvemos aqui no Brasil.

20 de junho - Prof. Paulo Menezes, DQF-UFPE

Aplicação de Reagentes de Boro e Telúrio na Síntese de Compostos Bioativos

15 de junho - Prof. Ingrid Weber, IQ-UnB

Marcadores Luminescentes para Fins Forenses : Uma nova Perspectiva para Identificação

de resíduos de tiro e rastreamento de munições.

13 de junho - Prof. Ingrid Távora Weber, DF-UFPE

Arranjos Magnéticos. Preparação e Propriedades.

Com os avanços tecnológicos tem sido possível a fabricação de diversos sistemas, que levam ao estudo de novos problemas em diversas áreas. Especialmente em materiais magnéticos, os efeitos de superfície e de tamanhos próximos a 10 nm envolvem considerações que permitem o estudo simplificado de arranjos extensos de objetos conformados por materiais ferromagnéticos. Por outra parte objetos tamanho maior a centenas de nanômetros podem ser investigados com técnicas diversas, entre elas o micromagnetismo, que pode ser abordado utilizando as equações de Brown ou equações do movimento de Landau. Neste seminário abordaremos casos simples que levam ao entendimento de algumas propriedades de sistema magnéticos.

06 de junho - Dr. Mateus B. Cardoso, LNLS, Campinas, SP

Desenvolvendo Materiais Nanométricos com Propriedades Bactericidas: da Síntese à Aplicação.

Neste seminário serão discutidas estratégias de síntese de compósitos complexos com possíveis aplicações biomédicas. Serão apresentadas técnicas de aprisionamento de biomoléculas e fármacos bem como estratégias de recobrimento de nanopartículas com o objetivo de obter nanoestruturas com propriedades bactericidas. Devido à organização em múltiplas escalas desses materiais, um arsenal de técnicas de caracterização (por exemplo: microscopia (MEV e MET), espalhamento a baixos ângulos (raios X e nêutrons), adsorção-dessorção de nitrogênio, potencial zeta, infravermelho por transformada de Fourier, etc...) foram utilizadas no entendimento dos sistemas. As nanopartículas tiveram suas propriedades anti-bacterianas testadas contra diferentes bactérias Gram-positivas e Gram-negativas permitindo propor um modelo de interação entre nanopartículas e bactérias.

23 de maio - Profa. Beate Saegesser Santos, Dept. de Ciências Farmacêuticas, UFPE

Mil e um dotes dos Quantum Dots: um panorama atual das suas aplicações na área biomédica

Quantum dots ou pontos quânticos são nanocristais de semicondutores com propriedades ópticas únicas e, há pouco mais de 10 anos, representam uma nova classe de materiais fluorescentes interessantes para diversas aplicações nas ciências biomédicas. Este Colóquio trás novas tendências de aplicações destes materiais tais como seu uso como biosensores, sondas fluorescentes, FRET e terapia fotodinâmica.

16 de Maio - Prof. Ricardo S. Honorato, Perito Criminal, Departamento de Polícia Federal.

Analítica Forense

09 de Maio - Prof. Fernando Buarque, Escola Politécnica de Pernambuco, UPE

Fish School Search (FSS): the need for yet another optimization metaphor

Nature inspired algorithms – especially population based such as swarms and colonies – are metaphors able to deal fairly well with complex optimization problems. Moreover they tackle well large dimensional search spaces of highly non-monotonical nature; hence, they are normally good to search parameters in problems of high cardinality at relative low computational cost. In 2008, Bastos Filho and Lima Neto proposed a new metaheuristic in the fast growing family of swarm intelligence techniques, namely, Fish School Search (FSS) [1]. In FSS, the school collectively “swims”(searches) for “food”(candidate solutions) in the “aquarium” (search space). Similarly to PSO (Particle Swarm Optimization) or GA (Genetic Algorithms), the search guidance in FSS is driven by the merit of individual members of the population and the weight of each fish acts as a factual-memory of its individual success. In contrast with PSO, the weight can obviate the need to keep a log of best positions visited as well as any other topological information. As opposed to GA, the actual location of each fish directly substitutes the need of a chromosome. As for the social reasoning, the barycenter of the whole school can automatically guide expansion and contraction of the school, evocating exploration and exploitation when necessary [2]. In other words, the quality of the search can be inferred from regions where larger ensembles of fish are located (and vice-versa).

In the talk, after a brief review on the rationale of Computational Intelligence, it is planned an overview on the FSS operators and presentation of several simulations results. Our main goal is to make it clear why FSS is well suited to hard optimization tasks and why it affords computational features such as: (i) self-adaptable individual guidance towards sought solutions, (ii) on-the-‘swim’ collective selection between exploration and exploitation, and (iii) non-monotonic & high-dimensional search abilities (that can solve multi-modal optimization problems) [3].

[1] Bastos-Filho et al. A Novel Search Algorithm based on Fish School Behavior. Proceedings of IEEE SMC 2008 (Singapore), pp. 2646-265.

[2] Bastos-Filho et al. Fish School Search: an overview. In: CHIONG, Raymond (Ed.). Nature-Inspired Algorithms for Optimisation. Series: Studies in Computational Intelligence, Vol. 193.. pp. 261-277. Berlin: Springer-Verlag, 2009. {ISBN: 978-3-642-00266-3}.

[3] Madeiro et al. Density as the Segregation Mechanism in Fish School Search for Multimodal Optimization Problems. In ICSI'2011: Second International Conference on Swarm Intelligence. Springer - Lecture Notes in Computer Science, v. 6729, p. 563-572, 2011.

02 de Maio - Profa. Maria \square Fernanda Pimentel, DEQ, UFPE

Quimiometria e Tecnologia Analítica de Processos

Tecnologia Analítica de Processos (PAT) pode ser definida como: “um sistema para planejar, analisar e controlar o processo de manufatura através de medidas ao longo do tempo (isto é, durante o processo) de parâmetros críticos de qualidade e desempenho, de matérias-primas e de produtos intermediários e finais, com o objetivo de assegurar a qualidade do produto final”. É importante ressaltar que o termo PAT é visto de forma ampla para incluir análises químicas, físicas, microbiológicas, matemáticas e de risco, de uma maneira integrada. A metodologia baseia-se em princípios bem estabelecidos em outras áreas científicas (química analítica de processo, quimiometria, controle estatístico multivariado de processos, sistemas de gestão da qualidade, etc), mas utilizados de forma integrada ao longo de ciclo de vida de um produto. Neste seminário será apresentada uma visão geral sobre PAT, ressaltando as ferramentas quimiométricas mais utilizadas, exemplificadas com aplicações na produção de biocombustíveis, fármacos e indústria petroquímica.

18 de Abril - Prof. Elisa Soares Leite, DEQ, UFPE

Uma Trajetória para o Brilho dos Quantum Dots

A ex-aluna do DQF, Elisa Soares Leite, atual Profa. do Depto. de Eng. Química da UFPE,

falará sobre trabalhos científicos orientados pelos Profs. Flamarion Diniz, Ricardo Ferreira, Benício Neto, Ricardo Longo, Marcelo Zandini, Beate Saegesser, Luiz Gomide (UFSCar) e Phil Hunenberger (ETH-Zurich). Abordará temas como cálculos de isotermas de adsorção em sistemas nanoporosos e síntese de nanopartículas quantum dots para marcação biológica. Ao relatar sua trajetória, tentará explicar como esses e outros Profs. como Arnóbio Gama, Oscar Malta, Mozart Ramos, Lothar Bieber, Rajendra Mohan e Fernanda Pimentel a ajudaram a perceber que pesquisa em química pode ser uma atividade divertida.

04 de Abril - Dra. Roberta Dias, UFMG, Minas Gerais

Estratégias Computacionais para Estudos em Catálise

O progresso no estudo de sistemas catalíticos, dificilmente será possível sem o entendimento detalhado das transformações químicas que ocorrem em nível molecular. Informações precisas sobre estrutura, reatividade e energia relativa das espécies envolvidas nas reações são requisitos cruciais para qualquer estudo mecanístico. O desenvolvimento de novos métodos teóricos juntamente com aumento da capacidade de processamento e armazenagem dos computadores tem tornado possível a realização de estudos computacionais de sistemas com complexidades e tamanhos distintos. Apesar desses recentes progressos, muitas vezes, o estudo químico-quântico de sistemas contendo um considerável n° de átomos ainda representa um desafio¹. Uma alternativa tem sido a combinação de métodos de mecânica quântica (MQ) com métodos de mecânica molecular (MM) através de uma metodologia híbrida (MQ/MM) composta por características de ambas. O objetivo deste seminário é apresentar os fundamentos e algumas aplicações do método híbrido ONIOM², em particular no estudo de reações catalíticas.

21 de Março - Prof. Luis Ramon Bravo Sanches, Universidad Central "Marta Abreu" de Las Villas, Cuba

Especiación de Mercurio en Agua de Mar mediante técnicas acopladas con preconcentraciones y detectores espectrométricos.

14 de Março - Prof. José Riveros, Instituto de Química, USP, São Paulo

Reatividade Química: do nível molecular ao nível macroscópico

Diversas técnicas experimentais podem ser utilizadas atualmente para caracterizar a reatividade de substâncias químicas simples ao nível microscópico. Isto se aplica principalmente ao estudo de reações que envolvem íons devido à facilidade de controlar o movimento de íons através de campos elétricos e magnéticos e a facilidade e alta sensibilidade para detectar íons por técnicas de espectrometria de massas. Neste seminário pretendemos ilustrar alguns problemas fundamentais de reatividade, tais como substituições nucleofílicas e as reações iniciais de processos sol-gel, para ilustrar as diferenças de comportamento de reações na ausência de solvente (alto vácuo) e como estas observações podem ser eventualmente transferidas para a reatividade em solução. Da mesma maneira que técnicas experimentais são valiosas para estas observações, há um sinergismo importante entre cálculos teóricos e experimento aqui incluído cálculos da energia potencial ao longo do caminho de reação como cálculos de dinâmica de reações.