

Colóquios 2019

Os Colóquios do Programa de Pós-Graduação em Química acontecem todas as quarta-feiras às 16:00 hs. no Auditório Prof. Benício de Barros Neto no Dept. de Química Fundamental. Contactar a Profa. [Thereza Soares](#) para sugestões, agendamento e divulgação de apresentações ao longo do semestre de 2019.1 e 2019.2.

13 de março - Engenharia de Antígenos Virais. Dr. Danilo Coelho, Pesquisador, CPqAM, FIOCRUZ-PE

20 de março - Cromatografia Líquida de Alta Performance Acoplada a Espectrometria de Massa Para Estudos Estratégicos nas Áreas de Biodiversidade Ambiental, Saúde e Controle de Qualidade na Região Amazônica. Prof. Vagner Bezerra dos Santos, DQF, UFPE.

Colóquio Especial 21 de março as 17h00 no Auditório Prof. Benício Barros - DQF, CCEN

Exibição e Debate sobre o Filme The Conquest of the Cold. Colóquio do PET-Química.

27 de março - Quimiometria na Resolução de Interferência em Dados Cromatográficos: Quando a Separação Física não é Alcançada. Prof. José Licarion Pinto, DQF, UFPE.

Resumo: O desenvolvimento de uma metodologia cromatográfica validada demanda o investimento de tempo, reagentes e mão de obra qualificada e pode ser invalidada por uma amostra com uma composição distinta das usadas na etapa de validação. Além de ser susceptível a interferências, eluições longas geralmente são usadas para separar fisicamente todos os constituintes na coluna, em especial aqueles com estruturas semelhantes. A quimiometria pode simplificar o desenvolvimento de uma metodologia de análise cromatográfica desde o preparo da amostra até a eluição, ao resolver matematicamente interferências com a vantagem de segunda ordem. A vantagem de segunda ordem vem sendo usada para realizar quantificações exatas, mesmo na presença de interferências possibilitando aplicar o método desenvolvido a vários produtos (metodologias multiproduto). Usar abordagens quimiométricas para separar interferências matematicamente em substituição a separação físico-química na coluna ou por etapas de preparo de amostra, possibilita incluir muitas vantagens experimentais na metodologia desenvolvida. O intuito dessa palestra é apresentar alguns fundamentos e estudos de casos que tornem claro as vantagens da modelagem multivariada para o desenvolvimento de metodologias de análise cromatográfica. Os estudos de casos que serão apresentados buscam resolver interferências em dados cromatográficos de segunda e terceira ordem onde há coeluição de muitos constituintes e em caso de interferência de constituintes com espectros idênticos

Colóquio Especial 11 de abril as 14h00 no Auditório Prof. Ricardo Ferreira - CCEN

Mulheres na Ciência: Mudando o Mundo. Professoras da UFPE: Nathalia Lima, Adriana Fontes e Audrey Cisneiros.

Colóquio Especial 12 de abril as 10h00 no Auditório Prof. Benício Barros - DQF, CCEN

Born-Oppenheimer molecular dynamics and electronic properties of liquids and molecular solutions. Benedito J. C. Cabral, BioISI-Biosystems and Integrative Sciences Institute and Departamento de Química e Bioquímica, Universidade de Lisboa

Resumo: The dynamics and electronic properties of systems in liquid phase are of fundamental interest for understanding chemical reactivity in solution. In this presentation we discuss a combined approach where electronic structure methods are coupled, in a QM/MM spirit, to configurations generated by Born-Oppenheimer molecular dynamics. Emphasis is placed on the electronic and magnetic properties of hydrogen bonding systems. Specifically, the applications discuss: (1) a recently discovered correlation between the nuclear magnetic shielding constant of the ^{17}O atom and the gap between the $\text{O}1\text{S}$ (core) and $\text{O}2\text{S}$ (inner valence) orbitals in liquid water [1]; (2) the Kohn-Sham density of states of liquid HCN [2]; (3) the electron binding energies of H_2O_2 in water [3].

[1] Magnetic properties and core electron binding energies of liquid water, Galamba, N; Cabral BJC, J. Chem. Phys. 148 (2018) 044510.

[2] The Kohn-Sham electronic density of states of liquid HCN: Tuning a long-range corrected exchange-correlation function for predicting electron binding energies, Cabral, BJC, Chem. Phys. Lett. 724 (2019) 96-10.

[3] Dynamics, magnetic properties, and electron binding energies of H_2O_2 in water, Cabral, BJC J. Chem. Phys. 146 (2017) 234502.

17 de abril - Semiconductors for Enhanced Photocatalytic Solar Fuels Production. Prof. Abdou Lachgar, Associate Director of the Center for Energy, Environment and Sustainability, Wake Forest University, USA

Abstract: Semiconductor-based photocatalysis has received tremendous attention in the last few decades because of its potential for solving current energy and environmental problems. In a semiconductor photocatalytic system, photo-induced electron-hole pairs are produced when a photocatalyst is irradiated by light with frequencies larger than that of its band gap ($h\nu \geq E_g$). The photo-generated charge carriers can either recombine, or migrate to the surface of the semiconductor, where they can be involved in electrochemical processes. High recombination rate of charge carriers and limited efficiency under visible light irradiation are two limiting factors in the development of efficient semiconductor-based photocatalysts. To overcome these drawbacks, the design and preparation of semiconductor heterojunctions using two or more semiconductors is a promising approach. Recently studied examples of these semiconductor heterojunctions will be presented to demonstrate that well designed heterojunctions can extend light absorption range and enhance the lifetime of photogenerated charge-carriers resulting in

enhanced photocatalytic activity compared to their individual components. Plausible mechanism (Figure 1) for the observed enhanced photocatalytic activity of the heterojunctions is proposed, and supported by photoluminescence and electrochemical impedance spectroscopy.

Colóquio Especial - 08 de Maio 14h30 no Auditório do CTG

08 de maio - Ameaças a Autonomia Universitária. Debate sob coordenação do Prof. Amaro Lins (Ex-Reitor da UFPE) com vários dirigentes de Instituições de Ensino Superior Públicas de Pernambuco.

24 de abril - Estratégias para Detecção, Neutralização e Mapeamento Soroepidemiológico Local do Vírus ZIKA. Prof. Roberto D. Lins, Centro de Pesquisas Aggeu Magalhães, FIOCRUZ-PE.

Colóquios Especiais de 21-24 de maio durante o V Congresso Regional da Sociedade Brasileira de Biofísica (UFPE e UFRPE).

Palestras do evento serão contabilizadas como apresentações da Disciplina de Colóquios do PPG-Química para os alunos que assinarem lista de presença.

- **21 de maio - V Congresso Regional SBBf: Simpósio Simulações em Biofísica. Salão Nobre da UFRPE.**

14h00-15h30:

AULA 1 - Simulações Computacionais de Membrana: Teoria e Aplicações. Prof. Thereza A. Soares, UFPE, PE

16h00-17h30:

AULA 2 - Engenharia de Proteínas: Interface Teoria e Experimento. Prof. Roberto D. Lins, FIOCRUZ-PE

- **22 de maio - V Congresso Regional SBBf: Simpósio Simulações em Biofísica. Salão Nobre da UFRPE. 14h00-16h00**

Palestra 1 - Engenharia de Proteínas Imunoreativas. Prof. Roberto D. Lins, FIOCRUZ-PE

Palestra 2 - Interação Molecular de Pequenos Ligantes com Proteínas de Membrana em Dois Estados. Prof. Werner Treptow, UnB, DF

Palestra 3 - Desenvolvimento de Aplicações do Campo de Força ELBA. Prof. Luis Gustavo Dias, USP- Ribeirão Preto, SP

Palestra 4 - Desenvolvimento de Ferramentas para Modelagem de Biomoléculas por Métodos de Química Quântica. Prof. Ger Rocha, UFPB, PB.

- **23 de maio - V Congresso Regional SBBf: Simpósio Nanotecnologia e Biofotônica. Auditório Prof. Ricardo de Carvalho Ferreira, CCEN, UFPE. 10h50-12h50**

Palestra 1 - Tomografia por Coerência Óptica e suas Aplicações em Saúde. Prof. Anderson Zanardini, IPEN, SP

Palestra 2 - Ln-MOFs: Da Síntese e Impressos Luminescentes ao Estudo da Liberação de Fármacos e Obtenção de Híbridos Bio-Inspirados. Prof. Severino Alves, UFPE, PE

Palestra 3 - Pontos Quânticos: Uma Ferramenta Biofotônica para o Estudo do Câncer. Prof. Paulo Euzébio Cabral Filho, UFPE, PE

Palestra 4 - Terapia Fotodinâmica Antimicrobiana Assistida por Nanopartículas. Prof. Martha Simões Ribeiro, IPEN, SP

- **23 de maio - V Congresso Regional SBBf: Simpósio Métodos em Biofísica Molecular. Auditório Prof. Ricardo de Carvalho Ferreira, CCEN, UFPE. 16h50-18h50**

Palestra 1 - Usando Técnicas de Espalhamento e Microscopia Ótica para Estudar o Efeito da Oxidação Lipídica. Prof. Rosiângela Itri, USP, SP

Palestra 2 - Usando Ressonância Paramagnética Eletrônica como Ferramenta para o Estudo de Dinâmica de Proteínas e Sistemas Biomiméticos de Membrana. Prof. Antônio José da Costa, USP-Ribeirão Preto, SP.

Palestra 3 - Nanoporo Protéico da Alfatoxina como Ferramenta de Biossensoriamento Molecular. Prof. Cláudio Rodrigues, UFPE, PE

Palestra 4 - Caracterização de Proteínas e Atividades de membranas por Microscopia de Força Atômica. Prof. Luciana Magalhães Rebelo Alencar, UFMA, MA

Colóquio Especial 3 de junho as 16h00 no Auditório Prof. Ricardo de Carvalho Ferreira.

Escola de Instrumentação Eronides Felisberto da Silva Júnior (EI-Eron). Prof. Petrus Santa Cruz, DQF, UFPE

A Escola de Instrumentação EI-Eron é uma iniciativa da Unidade UFPE do Programa University Chapters da Brazilian Materials Research Society (SBPMat). A abertura da Escola será feita pela Presidente do UC-UFPE, Karolyne, destacando seu formato contínuo dividido em módulos, enfatizando as técnicas de caracterização de materiais de acordo com a necessidade dos estudantes, com destaque para os quatro primeiros Módulos. Em seguida, como tutor do UC-UFPE farei uma breve explanação sobre o nome da Escola, em homenagem a Eronides,

05 de Junho - The Myrosinase Glucosinolates System for Bioconjugation. Prof. Arnaud Tatibouët, Institute of Organic and Analytical Chemistry, Université D'Orléans, France.

12 de Junho - CINE PET: Em Busca da Super-Bateria. Moderação do Proff. Flamarion Borges, DQF, UFPE