

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

COLÓQUIO ESPECIAL - 16:00 hrs

05 de Dezembro - Prof. Osvaldo Serra, DQ, USP-Ribeirão Preto

A situação atual das TR no BR e resto do mundo

COLÓQUIO ESPECIAL - 10:00 hrs

04 de Dezembro - Dr. Dave DOLak, Malvern Instruments, USA

Zetasizer Instrument Overview

COLÓQUIO ESPECIAL - 16:00 hrs

18 de Novembro - Prof. Wilfred van Gunsteren, Swiss Federal Institute of Technology, Suíça

Is the quest for quality or performance measures or indices destroying academic values and obstructing scientific progress?

COLÓQUIO ESPECIAL - 16:00 hrs

19 de Novembro - Prof. Wilfred van Gunsteren, Swiss Federal Institute of Technology, Suíça

Methodological advances and applications in the computation of free energy differences in bimolecular systems.

COLÓQUIO ESPECIAL - 16:00 hrs

14 de Novembro - Prof. Marisa Kozlowki, University of Pennsylvania, USA

Adventures in Oxidative Bond Forming Reactions: Development and Applications in Natural

Product Synthesis.

13 de Novembro - **Prof Jaroslaw Chojnacki, Gdansk University of Technology, Poland**

Subperiodic groups. How to describe symmetry of 1D or 2D substructures.

30 de Outubro - Dr. José Lúcio Bezerra Júnior, DQF, UFPE (CANCELADO)

Modelos de Testes de Toxicidade em Peixes : Análise da Toxicidade dos Nanotubos de Carbono em Peixes de Espécies Nanoestruturadas.

23 de Outubro - Prof. Ricardo Oliveira da Silva, DQF, UFPE

Metabonômica aplicada ao diagnóstico clínico e à análise de alimentos.

16 de Outubro - Prof. Ricardo Freire, DQ, UFS

Desenvolvimento e Aplicação de Modelos e Softwares para o Estudo de Sistemas Luminescentes.

A estreita relação entre grupos teóricos e experimentais quando o tema de interesse é o estudo de sistemas luminescentes a base de íons lantanídeos não é recente no DQF. A cooperação entre pesquisadores do BSTR (Laboratório de Terras Raras) e do Lab. Pople de Química Computacional/UFS surgiu ainda no DQF e tem se mantido até os dias atuais. Em 2013, com a publicação do vigésimo quinto artigo científico esta cooperação completa 10 anos. Assim, abordaremos neste colóquio o desenvolvimento de modelos e softwares que vem possibilitando e fortalecendo esta cooperação, bem como apresentaremos alguns dos recentes resultados de aplicação dessas ferramentas teóricas.

09 de Outubro - Prof. Rodrigo Queiroz de Albuquerque, IQSC, USP

Sistemas supramoleculares formados por zeólita L: aspectos gerais e aplicações

Sistemas supramoleculares do tipo hóspede-hospedeiro formados pela automontagem envolvendo cristais de zeólita L e moléculas corante apresentam uma variedade de propriedades físico-químicas interessantes. Os sistemas luminescentes formados podem apresentar emissão altamente anisotrópica e favorecer a fosforescência à temperatura ambiente. Neste colóquio serão discutidos aspectos gerais destas supramoléculas, efeitos de confinamento oriundos da encapsulação das moléculas corante e finalmente algumas aplicações destes sistemas.

02 de Outubro - Dr. Artur Campos Dália Maia, DQF, UFPE

Besouros? Para quê besouros? Da graviola ao biodiesel: uma breve estória dos besouros polinizadores.

18 de Setembro - Prof. Oscar Malta, DQF, UFPE

Efeitos da Covalência nas Intensidades Espectrais 4f-4f. Uma nova visão.

COLÓQUIO ESPECIAL - 10:00 hrs

09 de Setembro - Prof. Valderi L. Dressler, DQ, UFSM

A técnica de ablação a laser acoplada ao espectrômetro de massas com plasma acoplado indutivamente (LA-ICP-MS): princípios e aplicações

COLÓQUIO ESPECIAL - 14:00 hrs

22 de Agosto - Dr. Mateus Cardoso, LNLS

Strategies for Synthesizing Complex Composites with Potential Biomedical/Bactericidal Applications

The ever-increasing antibiotic resistance levels in pathogenic and non-pathogenic bacteria have boosted the search for effective controlling methods of bacterial infections. In this context, we prepared different types of nanoparticles in order to evaluate the interaction between these structures and bacteria. Along this talk, we will discuss different strategies for synthesizing complex composites with potential biomedical applications. We will present techniques for trapping biomolecules and drugs as well as strategies to coat nanoparticles in order to obtain nanostructures with enhanced bactericidal properties. Due to the multiple scales organization of such materials, an arsenal of characterization techniques, such as electron microscopies (SEM and TEM), nitrogen adsorption-desorption, zeta potential, Fourier transform infrared and, mainly, small-angle scattering techniques have been used to understand these systems. The nanoparticles had their anti-bacterial properties tested against various Gram-positive and Gram-negative bacteria allowing propose a model for interaction between nanoparticles and bacteria.

24 de Julho - 65a Reunião Anual da Sociedade Brasileira para o Progresso da Ciência

17 de Julho - Prof. Maria da Conceição de Branco da Silva, Faculdade de Farmácia, Universidade do Porto, Portugal

Sensores químicos e sua utilização no controle de produtos farmacêuticos.

10 de Julho - Prof. Thereza A. Soares, DQF, UFPE

Computational Simulations of a Pediocin-Plantaricin Hybrid Peptide in Pure and Mixed POPG-POPC bilayers: Structure, Effect of Concentration and Mechanism of Action

03 de Julho - Prof. Thereza A. Soares, DQF, UFPE (Adiado devido ao cancelamento de aulas na UFPE)

Computational Simulations of a Pediocin-Plantaricin Hybrid Peptide in Pure and Mixed POPG-POPC bilayers: Structure, Effect of Concentration and Mechanism of Action

26 de Junho - Estudantes da PPG-Química

Nathália Bezerra de Lima - doutoranda em Química, DQF, UFPE

Orientadora: Prof. Simone Maria da Cruz Gonçalves

Co-Orientador: Prof. Alfredo Mayall Simas

Comprovação da existência de ligações de hidrogênio entre ligantes orgânicos e ácidos carboxílicos por fortes e inesperados efeitos em RMN de ^1H

Etelino Feijo De Melo - doutorando em Química, DQF, UFPE

Orientador: Prof. Severino Alves Jr. Simone Maria da Cruz Gonçalves

Estudo da Transferência de Energia por Ressonância de Förster entre o Nanocompósito de Au/Polianilina e um Polifluoreno

19 de Junho - Doutorando Ayyaz Mahmood, DQF, UFPE

Quantum Chemical Investigation of Mechanism of CH₃I + RNO₂- Reactions and Direct Dynamics by SRP - CANCELADO PONTO FACULTATIVO

12 de Junho - Prof. Adriane Todeschini, Instituto de Biofísica Carlos Chagas Filho, UFRJ

O Lado Doce do Mal: Biossíntese de Glicoconjugados como uma Nova Abordagem na Prospecção de Alvos para o Diagnóstico e a Terapia do Câncer

05 de Junho - Dr. Antônio Mauro Rezende, Centro de Pesquisas Aggeu Magalhães, FIOCRUZ

Predição Computacional de Interações de Proteína-Proteína em Proteomas Preditos de

Leishmania.

Os parasitos Tripanosomatídeos *Leishmania braziliensis*, *Leishmania infantum* e *Leishmania major* são importantes patógenos humanos. Apesar de anos de estudo e da disponibilidade de seus genomas, nenhuma vacina eficaz foi desenvolvida até o presente momento, e os tratamentos disponíveis em geral são altamente tóxicos. Portanto, está claro que apenas estudos integrados com uma abordagem interdisciplinar terão sucesso na tentativa de buscar novos alvos para desenvolvimento de drogas e vacinas. Uma parte essencial deste racional está relacionada ao estudo de redes de interações de proteínas as quais podem fornecer um melhor entendimento de interações proteicas complexas em sistemas biológicos. Assim, no presente trabalho, modelamos redes de interações de proteínas para as três espécies de *Leishmania* citadas acima através do método computacional que utiliza comparação de sequência (Interolog Mapping), e desenvolvemos um sistema de pontuação combinado para avaliar a robustez das predições. A avaliação de desempenho da abordagem de predição de redes foi realizada utilizando o conjunto de dados de interação de proteínas de *Escherichia coli* como padrão ouro positivo e negativo, e o valor de AUC obtido foi 0,94. Como resultado, 39.420, 45.325 e 43.531 interações foram preditas para *L. braziliensis*, *L. Infantum* e *L. major*, respectivamente. Para cada rede predita, as 20 proteínas melhor ranqueadas pelo índice topológico MCC (“Maximal Centrality Clique”) foram selecionadas. Além disso, informações relacionadas ao grau de conservação da sequência proteica entre os ortólogos, grau de identidade comparado às proteínas de hospedeiros potenciais, e potencial imunológico foi integrado. Aqui vale a pena ressaltar que os algoritmos utilizados para predição de epítomos foram previamente avaliados em relação ao seus desempenhos. A avaliação ocorreu utilizando dados da base IEDB como padrão ouro. Deste modo, os programas com melhor desempenho foram então empregados. Portanto, esta integração fornece um melhor entendimento e usabilidade das redes preditas o que pode ser valioso para seleção de novos alvos biológicos potenciais para desenvolvimento de drogas e vacinas. Outro ponto que mereceu atenção neste estudo está vinculado à modularidade das redes, em especial os módulos conservados, característica chave quando se está interessado em desestabilizar a rede de interação de proteína com propósitos de droga e vacina. Estas análises revelaram um padrão associado com renovação do repertório proteico. Além disso, aproximadamente 50% das proteínas descritas como hipotéticas presentes nas redes de interação receberam algum grau de anotação funcional, o que representa uma contribuição importante uma vez que aproximadamente 60% do proteoma predito das espécies do gênero *Leishmania* não possui nenhuma predição de função.

29 de maio - Prof. Anderson Gomes, DF, UFPE e Governo do Estado de Pernambuco

Introduzindo Ferramentas Tecnológicas na Rede de Educação Estadual de Pernambuco

15 de maio - Prof. Brenno Neto, IQ, UnB

Catalisadores ionicamente marcados em meios ionofílicos: planejamento, síntese e aplicações.

O seminário abordará o planejamento, síntese e aplicação de catalisadores ionicamente marcados em reações de oxidação, redução e multicomponentes realizadas em líquidos iônicos. Será dada uma ênfase na compreensão mecanística das transformações e no efeito do líquido iônico atuante sobre as mesmas.

08 de maio - Dra. Julieta Rangel de Oliveira, DQF, UFPE

Hidrólise enzimática de nitrilas pelo fungo de origem marinha *Aspergillus sydowii* CBMAI 934

Nitrilas são importantes intermediários em síntese orgânica bem como na indústria química para a produção de amidas, ácidos carboxílicos, entre outros compostos. Há um grande interesse na utilização de biocatalisadores para a conversão de nitrilas aos seus correspondentes ácidos carboxílicos e/ou amidas. A hidrólise enzimática de nitrilas aos seus

correspondentes ácidos carboxílicos procede por dois caminhos: por nitrilases e/ou nitrila hidratases, seguida de amidases.

No presente estudo, uma triagem foi realizada com 12 fungos marinhos para avaliar o potencial enzimático destes micro-organismos frente à fenilacetoneitrila. Estes micro-organismos foram isolados de esponjas e alga coletadas do litoral norte do estado de São Paulo. A triagem foi realizada em meio mineral sólido e líquido suplementado com glicose e fenilacetoneitrila como única fonte de nitrogênio. Experimentos realizados na ausência de fenilacetoneitrila, tanto em meio sólido, quanto em meio líquido, não promoveram o crescimento microbiano, evidenciando que as enzimas capazes de hidrolisarem nitrilas presente no sistema catalítico são induzidas (constitutivas). A fenilacetoneitrila foi biotransformada ao ácido 2-(2-hidroxifenil)acético por todos os fungos adaptados. Devido ao bom crescimento do fungo *A. sydowii*

CBMAI 934 em meio mineral sólido e líquido na presença de fenilacetoneitrila, este fungo foi selecionado para promover reações de hidrólise frente a diferentes organonitrilas; arilacetoneitrilas, alifática e hetero-aromática aos seus correspondentes ácidos e amidas.

24 de abril - Prof. João Bosco Paraíso da Silva, DQF, UFPE

Síntese de Adenina no Meio Interestelar

17 de abril - Dr. Renaldo Tenório de Moura Jr., DQF, UFPE

Propriedades da Região de Recobrimento da Ligação Química – Aplicações em Moléculas e Métodos de Embedding do Estado Sólido

As propriedades da região de recobrimento da ligação química (introduzidas em 2002), tais como a polarizabilidade e plásmom têm mostrado relações estreitas com propriedades já estabelecidas de ligações químicas, tal como a covalência. Recentemente foram desenvolvidas novas metodologias (utilizando orbitais localizados e a Teoria da Ligação de

Valência) que permitem a aplicação dos modelos da região de recobrimento para sistemas diatômicos, poliatômicos e no estado sólido. Em especial, os sistemas poliatômicos englobam moléculas de dímeros e heterodímeros, em que as ligações de hidrogênio puderam ser avaliadas quanto ao seu grau de covalência. Além disso, com o intuito de mimetizar os efeitos do ambiente cristalino em materiais do estado sólido, foi desenvolvido e implementado computacionalmente um método de embedding que trata os efeitos do ambiente cristalino de maneira efetiva. Tal método utiliza a teoria do funcional da densidade e projeta a densidade eletrônica de um aglomerado de átomos obtida a partir de um cálculo periódico em um conjunto de funções de Hermite-Gauss auxiliar. Espera-se, dessa forma, descrever a estrutura eletrônica volumar e superficial de sólidos usando orbitais de Kohn-Sham. Serão apresentados os modelos e metodologias desenvolvidos e alguns resultados e problemas encontrados.

10 de abril - Prof. Fernando Luis Barroso, Dept. de Física e Química, Universidade de São Paulo, Ribeirão Preto

Some peculiarities of the electrostatic interactions and multiscale modeling of proteins complexation for biotechnology, food and pharmaceutical science applications

The phase behavior of mixed biopolymer systems is of importance in food technology, for pharmaceutical formulations and for bio(process) technology in general. One particular interesting class of system is the non-specific protein-polyelectrolyte complex. These complexes find applications in encapsulating active ingredients, as stabilizers in food technology, in bioseparations, and many other fields. Moreover, protein-polyelectrolyte interactions also play important roles in living cells. The most important driving forces for such complexation are often electrostatic in nature, as indicated by strong dependencies of complex formation on salt and pH. Although Coulomb's Law is known since 1785, when applied to (bio)colloidal systems, a rich diversity of peculiar molecular mechanisms comes into play. The complex interaction between the characteristics of (bio) colloids (especially size and charge), pH and salt results in a collection of mesoscopic (attractive) forces of importance to the organization and function of biological systems and all material molecular matter. Through Monte Carlo (MC) simulations and semi-quantitative theoretical analysis, we present mechanisms responsible for the purely electrostatic attraction of macromolecules of biological and technology interest. We also present a new proton titration scheme for studying acid-base equilibria in Metropolis MC simulations where salt is treated at the Debye-Hückel level. The protein data reported here are mainly for albumin, the goat and bovine alpha-lactalbumin, beta-lactoglobulin, lactoferrin, caseins and lysozyme. Mutational effects will also be presented.

22 de março - Profa. Tania Maria Cassol, Escola de Química de Alimentos, UFRN

Desenvolvimento ecologicamente correto de novos materiais funcionais e bio-sensores luminescentes usando terras raras e líquidos iônicos

20 de março - Prof. Yadira Vega, IPICYT, México, Prof. Visitante (Rede Nanobiotec-Brasil/Capes)

Chemical Modification of Carbon Nanotubes: Toward New Nanostructured Materials

20 de março - Prof. Fernando Rodriguez-Macias, División de Materiales Avanzados, IPICYT, México, Prof. Visitante (Rede Nanobiotec-Brasil/Capes)

Nanotubes, Polymers and Semiconductors: Nanostructures and Composites

27 de fevereiro - Dr. Aline Dantas, University of Queensland, Austrália

Recent applications of selenium chemistry

In the search for more potent and selective drugs, many medicinal chemists became interested in peptides as drug candidates instead of the conventional small molecule therapeutics. Several potential peptide-based drug leads are natural products that contain cysteines connected by disulfide bonds, including hormones, GPCR's ligands, toxins and cyclotides. However, many disulfide bonds are labile to endogenous reducing agents, leading to inactivation of the peptide through loss of secondary structure. Furthermore, the presence of multiple disulfide bridges imposes a synthetic challenge for the preparation of some of these disulfide rich-peptides.

In this presentation I will outline the use of selenocysteine, the 21st coded amino acid, to direct native folding and produce peptides with improved biophysical properties. By replacing the native cysteine pairs with isosteric selenocysteine pairs or generating isosteric selenoether mimetics, we were able to chemically control the shape, stability and functionality of small peptides. Particularly, I will demonstrate the application of the new methodology to some biologically relevant peptides: conotoxins with promising analgesic and insecticidal properties and the neuropeptide oxytocin, the famous "hormone of love".

22 de janeiro - Prof. Cristina Raposo, DE, UFPE

Avaliação do MEC para universidades e cursos

A partir do ano 2007 o MEC definiu um "novo" método de avaliação das Instituições de ensino superior e de seus respectivos cursos. O resultado desta avaliação é apresentado em forma de um indicador global para cada instituição, o IGC-índice Geral de Cursos, e para cada curso o seu cpc-conceito preliminar de curso. Esses indicadores são usados no processo de regulação da educação superior especialmente dentro dos processos de reconhecimento e de renovação de reconhecimento de cursos. Serão apresentados os métodos de cálculo bem como os resultados obtidos pela UFPE nas últimas avaliações.

21 de janeiro - Prof. Gary A. Molander, University of Pennsylvania

Novel Organoboron Reagents and Reactivities