



UNIVALI



23º SEMINÁRIO de INICIAÇÃO CIENTÍFICA

12ª MOSTRA CIENTÍFICA de INTEGRAÇÃO PÓS-GRADUAÇÃO e GRADUAÇÃO

7ª JORNADA de TECNOLOGIA e INOVAÇÃO



ISSN 1983-117X



SÍNTESE E CARACTERIZAÇÃO DE ANÁLOGOS CLORADOS DERIVADOS DA APIGENINA

Amanda Luize Silva de Souza, Valdir Cechinel Filho, Fátima de Campos Buzzi

Química - Química Orgânica

A apigenina é um flavonoide bioativo com um amplo espectro de atividades biológicas, o que a torna uma molécula de grande interesse para a pesquisa farmacológica, incluindo propriedades antioxidantes, anti-inflamatórias e antineoplásicas. Sua estrutura química contém hidroxilas fenólicas que permitem diversas possibilidades para modificações estruturais facilitando a exploração da relação estrutura-atividade de compostos bioativos para o desenvolvimento de novos fármacos. A introdução de substituintes como o cloro é uma estratégia para potencializar suas propriedades farmacológicas, pois o átomo de cloro pode aumentar a permeabilidade de membranas, melhorar a estabilidade metabólica prolongar o tempo de meia vida, e devido a sua maior eletronegatividade pode tornar a molécula mais seletiva ao alvo. Neste estudo, foram realizadas reações de bromação para sintetizar derivados clorados da apigenina. As moléculas sintetizadas foram posteriormente purificadas e caracterizadas quimicamente por ressonância magnética nuclear de próton e carbono. Ambas as moléculas planejadas foram avaliadas *in silico* quanto à predição de absorção e permeabilidade de acordo com os parâmetros estipulados na Regra de Lipinski, além da absorção intestinal (HIA), permeação da barreira hematoencefálica (BHE), predição toxicológica e triagem virtual. Para a síntese com brometo de 4-clorobenzila foi adicionado 2,22 mmol de reagente para 0,74 mmol de apigenina em dimetilformamida em agitação magnética a temperatura ambiente e utilizando carbonato de potássio como catalizador. O término da reação foi após 12 horas monitorada por CCD. Na sequência, a reação foi vertida em gelo para a precipitação do produto, filtrada a vácuo e mantida em dessecador. Após a obtenção do produto ele foi submetido a cromatografia flash automatizada para purificar o produto da reação com o brometo de 4-clorobenzila, permitindo a obtenção dos compostos mono e dissustituídos. De forma similar foi realizada a reação com brometo de 3,4-diclorobenzila utilizando 1,48 mmol do reagente, e os produtos foram purificados por cromatografia de coluna. As sínteses resultaram nos compostos 7-[(4-clorofenil)metoxi]-5-hidroxi-2-(4-hidroxifenil)-4H-1-benzopira-4-ona e 7-[(3,4-diclorofenil)metoxi]-5-hidroxi-2-fenil-4H-1-benzopira-4-ona, além de seus compostos dissustituídos ao utilizar brometo de 4-clorobenzila e 3,4-diclorobenzila, respectivamente. Na avaliação *in silico*, os resultados sugerem alta lipofilicidade, indicando que modificações moleculares adicionais podem ser necessárias para melhorar os parâmetros farmacocinéticos. A inclusão de grupos clorados na estrutura da apigenina demonstram potencial para melhorar suas propriedades farmacológicas como permeabilidade e seletividade. Estudos adicionais estão em andamento para avaliação biológica dos derivados sintetizados.

Palavras-chave: Apigenina; Química-medicinal; Flavonóide; Síntese.

Apoio: Programa de Bolsas de Iniciação Científica (ProBIC) - UNIVALI



UNIVALI



23º SEMINÁRIO de INICIAÇÃO CIENTÍFICA

12ª MOSTRA CIENTÍFICA de INTEGRAÇÃO PÓS-GRADUAÇÃO e GRADUAÇÃO

7ª JORNADA de TECNOLOGIA e INOVAÇÃO



ISSN 1983-117X



DESENVOLVIMENTO DE UMA ESTRATÉGIA COMPUTACIONAL PARA A IDENTIFICAÇÃO DE SUBSTÂNCIAS INDÓLICAS MULTIFUNCIONAIS EM ALVOS RELACIONADOS À DOENÇA DE ALZHEIMER

Brendha Monique Mendes de Almeida, Luiz Carlos Klein Junior

Química - Química Orgânica

Apesar dos avanços na pesquisa sobre a Doença de Alzheimer (DA) e mais de 400 ensaios clínicos, apenas dois medicamentos, Aducanumab e Lecanemab, foram aprovados recentemente, ambos enfrentando desafios de eficácia e regulatórios. A maioria das pesquisas foca em alvos ou mecanismos específicos, enquanto abordagens multifuncionais, que podem oferecer soluções integradas, são pouco exploradas. O núcleo indólico, com atividade em diversos alvos relacionados à DA, apresenta uma oportunidade promissora ainda não amplamente investigada. Neste estudo, realizou-se uma análise de compostos indólicos com o objetivo de identificar aqueles com potencial multifuncional e avaliar sua atividade em relação a enzimas relevantes para a DA: a β - secretase (BACE), monoamina oxidase (MAO) e a quinase 1A regulada por tirosina- fosforilação de dupla especificidade (Dyrk 1A). Estas enzimas foram selecionadas por estarem envolvidas na gênese da doença. A pesquisa começou com uma revisão extensiva da literatura publicada entre 2000 e 2023, a partir da qual foram selecionadas moléculas capazes de inibir os alvos selecionados com IC50 inferiores a 20 μ M. As estruturas dessas moléculas foram desenhadas usando o software ChemDraw 12.0, e o HyperChem 7.5 foi empregado para a adição de átomos de hidrogênio, essencial para o cálculo de descritores moleculares. Ao todo, 86 moléculas foram identificadas como capazes de modular a BACE, 288 a MAO e 139 a Dyrk1A. Para avaliar a capacidade das moléculas de permear a barreira hematoencefálica (BHE), foram calculados os seguintes descritores: área de superfície polar (PSA), número de grupos doadores de hidrogênio (HBD), logP e massa molecular (MM). Foram definidos limites para a predição da permeação da BHE com base nos seguintes valores: $PSA < 90 \text{ \AA}^2$, $HBD < 3$, logP entre 2 e 5, e $MM < 450$. Estes parâmetros foram calculados utilizando o Dragon 7 e organizados em uma planilha no Excel. Após a aplicação do filtro, 23 indóis permaneceram para o alvo BACE, 234 para o alvo MAO e 80 para o alvo Dyrk. Após aplicar filtros para selecionar as moléculas que atendiam aos critérios estabelecidos na literatura, realizou-se uma triagem adicional para identificar *Pan Assay Interference Compounds* (PAINs) com base na base de dados disponível em <https://www.cbligand.org/PAINS/>. As moléculas foram convertidas e agrupadas de formato mol para sdf utilizando o Knime 4.1.2, e os compostos classificados como PAINs foram excluídos das análises subsequentes. Para as moléculas que passaram ambos os filtros (23 BACE, 200 MAO e 79 Dyrk1A), descritores moleculares foram calculados no Dragon 7, com a eliminação daqueles que apresentavam valores constantes ou quase constantes. Para reduzir a redundância dos dados, foi realizada uma análise de correlação para detectar a colinearidade entre pares de descritores ($R > 0,9$). Apenas os descritores mais informativos foram mantidos. Foram calculados exclusivamente descritores bidimensionais, incluindo índices constitucionais, descritores de anéis, contagem de grupos funcionais, fragmentos átomo-centrados e propriedades moleculares. Após a exclusão de 159 descritores redundantes, 152 foram selecionados para análise posterior. Os dados foram normalizados no software Matlab R2022a, e analisados com auxílio de Análise de Componentes Principais de Kernel (KPCA). A KPCA revelou que os três primeiros componentes principais explicaram 34,2% da variação total dos dados. A visualização tridimensional dos dados destacou uma área de multifuncionalidade entre compostos direcionados a MAO e BACE, evidenciando padrões e agrupamentos significativos. Cada composto foi representado por gráficos coloridos de acordo com suas categorias e rotulado com identificadores numéricos para facilitar a interpretação. A análise com KPCA revelou a multifuncionalidade dos compostos e suas interações com os alvos estudados, sugerindo novas oportunidades para desenvolver substâncias multifuncionais que podem oferecer abordagens mais eficazes e integradas para tratar a Doença de Alzheimer.



23º **SEMINÁRIO de**
INICIAÇÃO CIENTÍFICA

12ª MOSTRA CIENTÍFICA de
INTEGRAÇÃO PÓS-GRADUAÇÃO
e GRADUAÇÃO

7ª JORNADA de TECNOLOGIA
e INOVAÇÃO



Palavras-chave: Quimiometria; Neurodegeneração; Alcaloide.

Apoio: Programa Institucional de Bolsas de Iniciação Científica – PIBIC/CNPq e UNIVALI



SIMULADOR INTERATIVO PARA PROGRAMAÇÃO EM LINGUAGEM DE MONTAGEM NA ARQUITETURA RISC-V

Julia de Paula Ballmann , Eduardo Michel Deves de Souza, Douglas Rossi de Melo

Ciência da Computação - Sistemas de Computação

Sistemas embarcados integram processadores programáveis para funções específicas e estão cada vez mais presentes no cotidiano, desde eletrodomésticos até automóveis. O processador, elemento central desses sistemas, pode ser encontrado em sua forma discreta ou integrado em dispositivos lógicos programáveis. A arquitetura do processador define o conjunto de operações que ele pode executar, conhecido como ISA (Instruction Set Architecture), que serve como interface entre software e hardware. Entre as abordagens na arquitetura de processadores, destaca-se a RISC (Reduced Instruction Set Computer), que adota um conjunto simplificado de instruções, focando na eficiência e no desempenho. O RISC-V se destaca como uma arquitetura aberta e gratuita, projetada para ser modular e adaptável a diversas aplicações, desde sistemas embarcados de baixo consumo até a computação de alto desempenho. Contudo, a crescente relevância do RISC-V revela um desafio: a escassez de recursos educacionais acessíveis e ferramentas práticas, essenciais para a formação de profissionais e para a adoção mais ampla dessa arquitetura. A falta de materiais de apoio simplificados, combinada à complexidade das ferramentas existentes, dificulta o aprendizado e a familiarização dos iniciantes com a linguagem de montagem RISC-V, criando barreiras para sua implementação em projetos educacionais e industriais. Diante disso, este trabalho apresenta o desenvolvimento de um simulador web interativo para a programação em linguagem de montagem RISC-V, utilizando o conjunto de instruções RV32I. O simulador foi desenvolvido inteiramente no front-end, utilizando TypeScript e o framework Angular, acessível diretamente por navegadores web sem instalação adicional. A ferramenta visa facilitar o ensino e a prática da arquitetura RISC-V, oferecendo funcionalidades como edição de código, montagem, execução passo a passo, visualização de registradores, segmentos de memória e um console para feedback em tempo real. O projeto busca enriquecer o aprendizado da arquitetura RISC-V, aplicável tanto ao contexto educacional quanto para projetistas de sistemas embarcados e profissionais da área. Além de permitir a exploração prática da ISA RV32I, o simulador oferece suporte a pseudo-instruções, expandindo a versatilidade da programação em linguagem de montagem sem comprometer a simplicidade. Espera-se que a ferramenta se torne um recurso para cursos de Arquitetura de Computadores. O simulador será disponibilizado em repositórios públicos, permitindo que a comunidade acompanhe seu desenvolvimento e contribua com melhorias. Dessa forma, o projeto busca contribuir para a ampliação dos recursos educacionais sobre o RISC-V e para o fortalecimento do ecossistema dessa arquitetura, promovendo sua adoção em diversos contextos no futuro.

Palavras-chave: Sistemas Embarcados; Arquitetura de Computadores; RISC-V.

Apoio: Programa de Bolsas de Pesquisa do UNIEDU/Governo de Santa Catarina e UNIVALI



DESENVOLVIMENTO DE NOVAS MOLÉCULAS HETEROCÍCLICAS ANTIPARASITÁRIAS DERIVADAS DE CHALCONAS

Karla Seniuk Alferi, Fátima de Campos Buzzi

Química - Química Orgânica

Compostos heterocíclicos derivados de chalconas são amplamente estudados devido à sua diversidade estrutural e à ampla gama de atividades biológicas, incluindo a atividade antiparasitária. Essas estruturas possuem um núcleo químico versátil que lhes confere a capacidade de interagir com uma variedade de alvos biológicos, tornando-as candidatas promissoras para o desenvolvimento de novos fármacos. Pesquisas anteriores conduzidas pelo grupo de pesquisa em Química Medicinal demonstraram o potencial antiparasitário de uma série de aminopirimidinas, compostos que exibiram atividades biológicas significativas contra parasitas causadores de doenças negligenciadas. Motivados por esses resultados promissores, este estudo busca explorar novas estruturas heterocíclicas derivadas de chalconas, baseadas nas aminopirimidinas mais ativas, com foco no desenvolvimento de pirazolininas. A escolha por pirazolininas se dá pela capacidade dessas moléculas de interagir de forma mais eficaz com os alvos biológicos dos parasitas, potencializando o efeito terapêutico. Este estudo visa planejar e desenvolver novos compostos pirazolinínicos derivados de chalconas biologicamente ativas, avaliando seu potencial farmacológico e aplicabilidade terapêutica. Com base em ensaios anteriores, foram selecionadas duas chalconas, uma contendo um substituinte metila e outra com um grupo N,N-dimetilamino, ambos posicionados na posição 4 do anel B. A partir dessas chalconas, foram planejados derivados pirazolinínicos que posteriormente foram submetidos a uma avaliação *in silico*, utilizando a ferramenta SwissADME para prever a absorção e permeabilidade dos compostos, seguindo os parâmetros estabelecidos pela Regra de Lipinski, além de analisar a absorção intestinal (HIA) e a permeação pela barreira hematoencefálica (BHE). Adicionalmente, o programa Osiris foi empregado para analisar a toxicidade, mutagenicidade e irritabilidade dessas moléculas. Os resultados *in silico* indicaram que as pirazolininas apresentaram um desempenho superior em comparação com as aminopirimidinas, especialmente nos parâmetros relacionados à farmacocinética e farmacodinâmica das moléculas. Essa metodologia *in silico* tem sido amplamente utilizada na identificação de compostos com potencial para se tornarem fármacos viáveis, validando assim a futura síntese e avaliação biológica dessas substâncias promissoras. A partir dos resultados obtidos, as pirazolininas identificadas na triagem virtual serão sintetizadas e submetidas a testes biológicos, visando o desenvolvimento de novos fármacos para o tratamento de doenças parasitárias negligenciadas, com o potencial de contribuir significativamente para a saúde global.

Palavras-chave: Chalcona; Aminopirimidina; Pirazolinina.

Apoio: Programa de Bolsas de Pesquisa do UNIEDU/Governo de Santa Catarina e UNIVALI



REDESIGN DA INTERFACE DE APLICATIVO MÓVEL PARA ACADÊMICOS COM AUTISMO

Gabriela Correa da Silva Lima, Adriana Gomes Alves

Ciência da Computação - Metodologia e Técnicas da Computação

A acessibilidade é um tema cada vez mais importante no desenvolvimento de software, pois trata-se de facilitar o acesso digital para quem necessita de condições especiais para o uso de um software. Em razão disso, a tecnologia avançou no desenvolvimento de sistemas para que soluções possam ser criadas melhorando a qualidade de vida dessas pessoas. O Transtorno do Espectro Autista (TEA) é caracterizado por déficits na comunicação e interação social e é acompanhado por comportamentos, cognições, atividades e interesses repetitivos e restritivos. Visto a importância do uso de tecnologias que facilitem a autonomia e a independência de pessoas com TEA, o presente trabalho teve como objetivo a avaliação heurística de um aplicativo móvel para acadêmicos com autismo. O aplicativo em questão analisado, "Mirodi", é um software que visa auxiliar a organização da vida acadêmica de jovens universitários com TEA. O aplicativo foi avaliado por um especialista na área da psicologia, cuja análise foi direcionada para as funcionalidades previstas no software. Entretanto, o software necessitou de avaliação de acessibilidade, e a primeira etapa, objeto deste estudo, foi a avaliação heurística, para, em futura etapa, ser realizada a avaliação com os usuários. Como ponto de partida para o desenvolvimento da pesquisa, foi realizada uma busca na literatura por diretrizes e estudos que orientassem o desenvolvimento de aplicações acessíveis para pessoas dentro do espectro autista. A partir deste estudo, foram observadas algumas características que são de fundamental importância no processo de criação da interface, notadamente aqueles apresentados pelo COGA (Cognitive and learning disabilities Accessibility task force) e GAIA (Guia de Acessibilidade de Interface Web focados em aspectos do Autismo) (Britto; Pizzolato, 2016). Na etapa seguinte, foi realizada uma avaliação heurística da aplicação para mapear defeitos de acessibilidade baseado nas diretrizes pesquisadas. A avaliação heurística consiste numa inspeção que não envolve diretamente o usuário, mas lida com o potencial e não com a experiência real de uso. Após a realização da avaliação, os resultados apontaram que o aplicativo apresenta uma pontuação um pouco acima da média, atendendo a maioria dos requisitos de acessibilidade. No entanto, foram encontrados problemas em relação ao uso de cores, em especial ao contraste entre texto e botões para facilitar a leitura. Conforme avaliação realizada, conclui-se que o aplicativo ainda tem alguns parâmetros a serem melhorados. O estudo desta forma buscou contribuir para a área de acessibilidade para pessoas dentro do espectro autista, enfatizando a aplicação de recomendações no desenvolvimento de aplicativos acessíveis, ampliando as possibilidades de uso para uma ampla gama de pessoas. Como trabalho futuro, recomenda-se a avaliação empírica com os usuários, para analisar a acessibilidade efetiva da ferramenta.

Palavras-chave: Acessibilidade; Heurística; TEA.

Apoio: Programa de Bolsas de Pesquisa do UNIEDU/Governo de Santa Catarina e UNIVALI



ANÁLISE FÍSICO-QUÍMICA E BIOLÓGICA DA ÁGUA DA BACIA HIDROGRÁFICA DO RIO CAMBORIÚ (SC): CENÁRIO PRÉ-CONSTRUÇÃO DO PARQUE INUNDÁVEL MULTIUSO

Giulia Neubauer, Paulo Ricardo Schwingel

Engenharia Sanitária - Recursos Hídricos

A Bacia Hidrográfica do Rio Camboriú abrange os municípios de Camboriú e Balneário Camboriú (SC), sendo a principal área de drenagem e captação de água para os dois municípios. Esta bacia abrange uma área de aproximadamente 200km², tendo o rio principal cerca de 40 km de extensão. A bacia tem origem no município de Camboriú, cidade que não possui sistema esgotamento sanitário, e tem a foz no município de Balneário Camboriú, o qual apresenta um sistema de saneamento ineficiente, especialmente em períodos de aumento da população flutuante. O objetivo do presente estudo foi analisar as características físico-químicas e biológicas da água na Bacia Hidrográfica do Rio Camboriú, fornecendo um cenário anterior à construção do Parque Inundável Multiuso. Foram realizadas coletas e análises da água superficial da Bacia Hidrográfica do Rio Camboriú em 10 pontos amostrais durante o período de abril de 2023 a março de 2024. Parâmetros físicos (oxigênio dissolvido, turbidez, salinidade, condutividade, pH e temperatura atmosférica e da água superficial), químicos (nitrogênio amoniacal, nitrito, nitrato e fosfato, silício), biológicos (clorofila-a) e microbiológicos (coliformes totais e E. coli) foram avaliados. Os resultados indicam variações na qualidade da água, influenciadas por fatores sazonais e locais. Os parâmetros físico- químicos e biológicos revelaram que as áreas naturais apresentam melhor qualidade de água, enquanto as áreas urbanas mostraram sinais de degradação. As áreas rurais apresentaram mudanças da qualidade da água com a sazonalidade, evidenciando os impactos da atividade agrícola. Níveis altos de coliformes totais e E. coli nas áreas urbanas mostram a contaminação por efluentes. A degradação da qualidade da água da bacia é atribuída principalmente à rápida expansão urbana na região, cuja falta de infraestrutura de saneamento contribui para a alteração dos parâmetros registrados nas regiões ritral e potamal. Levando em consideração os resultados descritos em estudos anteriores desta bacia, há um processo contínuo de degradação da qualidade de água durante as duas últimas décadas. Apesar da importância do projeto do Parque Inundável Multiuso para a disponibilidade hídrica, o presente estudo mostra a necessidade de ações efetivas de planejamento e gestão para mitigar a degradação da qualidade da água na Bacia Hidrográfica do Rio Camboriú.

Palavras-chave: Rio Camboriú; Qualidade de água; Parque Inundável

Apoio: Programa Institucional de Bolsas de Iniciação Científica – PIBIC/CNPq e UNIVALI



ESTIMATIVA DO APORTE DE NUTRIENTES DOS MUNICÍPIOS DO LITORAL CENTRO-NORTE DE SANTA CATARINA

Hurian Gustavo Zanatta, Erica Cavalli Trembulak, Ana Luiza Portezani Brandão, Muriel Deon do Amaral, Jurandir Pereira Filho

Oceanografia - Oceanografia Química

O litoral centro-norte de Santa Catarina, que inclui Balneário Camboriú, Barra Velha, Itajaí, Itapema, Navegantes, Penha e Porto Belo, é uma área turística com 70% da economia baseada em serviços. O aumento da população residente e a chegada de turistas, especialmente durante o verão, representam desafios para o gerenciamento ambiental, particularmente no que diz respeito à eutrofização costeira, intensificada pelo esgoto doméstico. Assim, o trabalho visa estimar o aporte de nutrientes durante o veraneio em municípios do litoral centro-norte de Santa Catarina. A estimativa da população flutuante foi baseada no consumo de energia elétrica, usando dados da CELESC. Foram analisados os dados de consumo de energia de junho de 2018 a 2023 e correlacionados com a população dos municípios, para obter o coeficiente "R". Os municípios avaliados compreendem 90.3% da população do estado. O consumo de energia nos meses de pico (janeiro e fevereiro) foi comparado ao consumo nos outros meses, como também às cidades fora do litoral centro-norte. Tal diferença serve de indicador para o aumento populacional real, convertido em porcentagem para a temporada de verão. A concentração de nitrogênio e fósforo per capita foi estimada usando os coeficientes de Von Sperling, sendo 7,98 mg/dia e 2,5 mg/dia respectivamente. Houve uma alta correlação entre consumo de energia e população ($R = 0,94$). No litoral centro-norte, o aumento da população durante janeiro e fevereiro foi de 27% em média, comparado a 9% nas demais cidades do estado. O aumento populacional médio na região litorânea foi de 18% no verão. Itapema e Balneário Camboriú tiveram os maiores aumentos, de 37,8% e 26,3%, correspondendo a cerca de 35,5 mil e 49 mil turistas, respectivamente. Itajaí e Navegantes apresentaram os menores aumentos, de 6% e 6,8%. Barra Velha, Penha e Porto Belo tiveram aumentos de 12,1%, 19,5% e 17,7%, respectivamente. No total, a região recebeu cerca de 103,9 mil turistas, somando uma população média de 776 mil durante o verão. O aporte diário estimado foi de 6,19 kg de nitrogênio (442,7 mol) e 1,94 kg de fósforo (62,6 mol). Os municípios com mais procura de turistas se expandem no intuito de suportar a demanda, causando a verticalização da cidade, que faz a concentração de pessoas na região aumentar cada vez mais. Se o município não estiver preparado para tratar o esgoto sanitário adicional durante o pico da temporada de verão, proveniente da população flutuante, o que é uma realidade na maior parte das cidades do litoral centro-norte, esse aporte de nutrientes concentrado numa região específica pode causar a eutrofização do local. Além disso, a diminuição da eficiência das estações de tratamento de esgoto durante o veraneio é outro fator a ser considerado. Como resposta, eventos de arribadas se tornam mais frequentes, além da diminuição da balneabilidade das praias ao longo do tempo. Tudo isso contribui para a degradação do ecossistema marinho, impactando de forma negativa a fauna e flora local. Sabendo do acréscimo da população flutuante, e por consequência o aporte diário de nitrogênio e fósforo, é possível avaliar medidas preventivas durante o veraneio, principalmente nas cidades de Itapema e Balneário Camboriú, com foco no tratamento de esgoto. Esses turistas, apesar de importantes para a economia local, podem ser um catalisador no processo de eutrofização, ainda mais numa região sensível. Isso não só tornaria as atrativas praias em locais impróprios para o ser humano, o que já está acontecendo, como também impactaria negativamente o ecossistema costeiro como um todo, demonstrando sinais como as arribadas.

Palavras-chave: Eutrofização; População Flutuante; Balneabilidade.

Apoio: FAPESC; CNPq



23º SEMINÁRIO de INICIAÇÃO CIENTÍFICA

12ª MOSTRA CIENTÍFICA de INTEGRAÇÃO PÓS-GRADUAÇÃO e GRADUAÇÃO

7ª JORNADA de TECNOLOGIA e INOVAÇÃO



ISSN 1983-117X



ANÁLISE DE INFLUÊNCIA DO RIO CAMBORIÚ NOS PROCESSOS DAS ARRIBADAS NA ENSEADA DE BALNEÁRIO CAMBORIÚ, SC, UTILIZANDO MODELOS NUMÉRICOS – RESULTADOS PRELIMINARES

João Victor Fagundes Silveira, Cristina Ono Horita, Mauro Michelena Andrade, Franklin Misael Pacheco Tena

Oceanografia - Oceanografia Física

O processo de Arribadas em Balneário Camboriú é um fenômeno costeiro natural e complexo, caracterizado pelo acúmulo de algas marinhas, que ocorrem o ano todo no ambiente, porém a frequência e a quantidade dessas arribadas alteram devido às condições locais. Nesse contexto, o presente estudo objetivou analisar a influência do rio Camboriú no processo das arribadas a partir da modelagem numérica da qualidade de gerada pela circulação hidrodinâmica no domínio da modelagem. Os modelos numéricos, do sistema de modelagem Delft3D, foram executados para o período de 25 de março a 10 de abril de 2022, período posterior ao engordamento da Praia Central e coincidente com um dos períodos de coleta de parâmetros de qualidade de água ao longo do ciclo de maré. Foram utilizados os módulos FLOW, WAVE e WAQ, responsáveis respectivamente pela modelagem hidrodinâmica gerada por marés, modelagem de ondas de gravidade e modelagem da qualidade da água. O FLOW e o WAVE foram executados acoplados forçados com as constantes harmônicas obtidas do marégrafo da Epagri e casos de ondas obtidas de reanálise do modelo global do CMEMS desde 1993 a 2020. O WAQ modelou parâmetros de qualidade de água, como salinidade, oxigênio dissolvido (OD), demanda bioquímica de oxigênio (DBO), nitrato (NO₃), ortofosfato (PO₄) e o amônio (NH₄), a fim de verificar a área de influência da dispersão do Rio. Nesta modelagem foram considerados os processos de estabilização da matéria orgânica, reaeração, nitrificação e denitrificação. A validação foi realizada, através de comparações quantitativas dos resultados da modelagem hidrodinâmica, e valores obtidos através de dados do marégrafo localizado na Praia de Laranjeiras (cedidos gentilmente pela EPAGRI). Através dessa comparação foram obtidos valores de MAE na ordem de 10⁻² e de RMSE na ordem de 10⁻³ indicando que o modelo reproduz otimamente os níveis d'água medidos no ambiente. Foram executados os três casos mais frequentes de ondas em termos de altura significativa, direção e período de pico em um ponto próximo a área de estudo, cuja direção de onda exerce maior influência na hidrodinâmica. Estes casos obtidos da reanálise do modelo global do CMEMS (Copernicus Marine Service) desde 1993 a 2020 foram: caso 2 (Hs = 1,1m; Dir = 75°; Tp = 5,6s), caso 3 (Hs = 1,0m; Dir = 90°; Tp = 5,4s) e caso 4 (Hs = 1,1m; Dir = 105°; Tp = 5,5s). O WAQ foi executado para a hidrodinâmica gerada pela maré, caso 2 de ondas e a vazão do Rio Camboriú estimada por Silva & Schettini (1997) de 3 m³/s. Foram considerados como fontes de efluentes o ponto mais a montante do rio Camboriú para simular os efluentes provenientes do município de Camboriú e os efluentes da Estação de Tratamento de Esgoto (ETE) de Nova Esperança (dados disponibilizados pela EMASA para o mês de março/2022). O comparativo entre dados medidos e modelados demonstrou que os valores modelados obtidos nos pontos de monitoramento localizados mais ao Sul da enseada se aproximam aos valores medidos. Porém, nos pontos dispostos ao Norte da área de estudo, os valores não se assemelham, ficando bem menores dos valores medidos. Apesar das diferenças, os resultados preliminares indicam que o modelo é capaz de representar a dinâmica de dispersão e concentração desses parâmetros na área de estudo. Além disso, o módulo WAQ envolve diversos parâmetros que necessitam de calibração, que será realizada na próxima etapa do projeto. Os resultados indicam haver influência do Rio Camboriú no processo de arribadas que ocorre na enseada da Praia Central de Balneário Camboriú, SC, haja visto, que a dispersão dos parâmetros de qualidade de água chega à enseada da região, influenciando nas variáveis da área de estudo, considerando a contribuição do ponto de lançamento da EMASA, empresa responsável pelo tratamento de efluentes da cidade de Balneário Camboriú.

Palavras-chave: Arribadas; Delft3D; Qualidade da água.



23º **SEMINÁRIO** de
INICIAÇÃO CIENTÍFICA

12ª MOSTRA CIENTÍFICA de
INTEGRAÇÃO PÓS-GRADUAÇÃO
e GRADUAÇÃO

7ª JORNADA de TECNOLOGIA
e INOVAÇÃO



Apoio: FAPESC; EPAGRI - A Empresa de Pesquisa Agropecuária e Extensão Rural de Santa Catarina;
Programa de Bolsas de Pesquisa do UNIEDU/Governo de Santa Catarina e Laboratório de Oceanografia
Física da Universidade do Vale do Itajaí - UNIVALI



CANETA ESTABILIZADORA: DESENVOLVIMENTO DE UM PROTÓTIPO COM SUPRESSÃO DE TREMORES USANDO ALGORITMOS ADAPTATIVOS

Jorge Bando, Jessica Cristina Tironi, Anita Maria da Rocha Fernandes, Wemerson Delcio Parreira

Ciência da Computação - Sistemas de Computação

Este estudo apresenta o desenvolvimento de uma caneta eletrônica destinada a indivíduos que sofrem de tremores nas mãos, com o objetivo de mitigar esses tremores durante a escrita. A escrita é uma atividade cotidiana que pode ser significativamente comprometida por tremores, afetando negativamente a qualidade e legibilidade do texto, além de causar desconforto e frustração. Os tremores estão associados a diversas condições médicas, como a doença de Parkinson, que ocorre com uma frequência de 3 a 7 Hz, o Tremor Essencial, com uma frequência de 6 a 12 Hz, entre outras patologias. Adicionalmente, tremores também podem manifestar-se em indivíduos saudáveis, com uma frequência de 8 a 12 Hz. Para o controle dos tremores, foram empregados algoritmos adaptativos, selecionados com base em uma revisão bibliográfica e análises de comportamento estocástico por meio de simulações de Monte Carlo. Esses algoritmos pertencem a uma classe capaz de ajustar e modificar seu comportamento, promovendo o rastreamento da solução ótima com base nos sinais disponíveis. Entre os algoritmos analisados, incluem-se o Filtered Least Mean Squared (Fx-LMS), Filtered Normalized LMS (Fx-NLMS), Híbrido Fx- LMS&NLMS, Recursive Least Squares (RLS), Filtro de Kalman, além das versões baseadas em kernel, tais como, Kernel LMS e Kernel RLS. Também foi conduzido um estudo para a concepção do hardware, incluindo a seleção e integração dos componentes do protótipo, como um acelerômetro para captar as vibrações, um microcontrolador para processar os dados e um motor de vibração para atenuar os tremores. Os componentes foram avaliados utilizando um dataset disponível na literatura, contendo sinais capturados de indivíduos com Parkinson, para avaliar o desempenho dos filtros no microcontrolador. Os resultados indicaram que, na execução do código na plataforma Teensy 4.1, a CPU foi utilizada a uma taxa de 79,6%, uma métrica fundamental para a avaliação da eficiência do sistema e para assegurar a alocação otimizada dos recursos da CPU durante a execução das tarefas. O filtro de Kalman apresentou uma convergência mais rápida no processo de adaptação em comparação ao algoritmo RLS, que, apesar de possuir o menor erro quadrático médio (MSE) em regime permanente, convergiu seis vezes mais lentamente que o Kalman. Os algoritmos kernelizados demonstraram uma convergência levemente mais rápida, porém com maior complexidade, resultando em um tempo de processamento mais elevado. Além disso, esses algoritmos mostraram-se menos suscetíveis a variações de ruído, alcançando uma melhoria de 83% no MSE em comparação com o Filtro de Kalman. Apesar da análise baseada em simulação, considera-se um potencial significativo para inovações futuras na área de dispositivos médicos adaptativos, sendo recomendada sua aplicação em testes futuros para validação dos resultados obtidos nas simulações.

Palavras-chave: Filtros adaptativos; Supressão de tremores; Caneta estabilizadora.

Apoio: Programa Institucional de Bolsas de Iniciação Científica – PIBIC/CNPq e UNIVALI



ESTUDOS COMPLEMENTARES DO PERFIL FITOQUÍMICO DE FRAÇÕES OBTIDAS POR EXTRAÇÃO DIRETA DAS SEMENTES DE *GARCINIA HUMILIS* (CLUSIACEAE)

Julia Fontoura Carvalho Magalhaes dos Santos, Rivaldo Niero

Química - Química Orgânica

A presente pesquisa sobre a *Garcinia humilis*, planta da família *Clusiaceae*, teve como objetivo, extrair, purificar e identificar compostos bioativos presentes em suas sementes, com foco na descoberta de cristais que indicam a presença de novas estruturas químicas potencialmente inéditas. Este estudo utilizou metodologias cromatográficas e espectroscópicas avançadas para explorar o potencial farmacológico da planta, com ênfase na fração de hexano, que apresentou o maior rendimento de extrato. As sementes de *Garcinia humilis* foram coletadas em Camboriú, Santa Catarina, processadas e submetidas a extrações sequenciais utilizando solventes com polaridades crescentes: hexano, diclorometano e acetato de etila. A fração de hexano, devido ao seu maior rendimento (22,75g), foi escolhida para iniciar os métodos de purificação. O objetivo foi isolar compostos apolares, como terpenos e esteroides, que são predominantes nessa fração. A primeira etapa de purificação foi a aplicação da fração de hexano em cromatografia em coluna, resultando na coleta de 150 frações. Durante este processo, foi observada a formação de um cristal branco amorfo na fração 67-69, indicando a presença de um composto de interesse. A análise por cromatografia em camada delgada (CCD) mostrou que este cristal não correspondia aos padrões de compostos conhecidos, como o estigmasterol ou a α e β -amirina, sugerindo uma nova estrutura química. Análises adicionais, realizadas por ressonância magnética nuclear (RMN), sugeriram que o cristal isolado poderia ser uma molécula inédita pelos dados semelhantes a gutiferona A e um outro composto denominado de Plukenetiona F, ambos já conhecidos e isolados de *Garcinia humilis*. No entanto, apresenta características adicionais que remetem a uma estrutura ainda não descrita na literatura. Estes resultados são significativos, pois pode apresentar um grande potencial farmacológico. Além da fração 67-69, outras frações do extrato de hexano também produziram cristais após sucessivos processos de purificação. As frações 41, 49-51 e 18, derivadas de diferentes colunas de hexano, foram isoladas e analisadas. O grau de pureza dessas frações se apresentou como um obstáculo. No entanto, a fração 18 foi submetida a análises detalhadas por RMN, porém confirmando a presença de ácidos graxos, além do composto identificado anteriormente. Na tentativa de melhorar o grau de pureza, foi submetida a cromatografia flash utilizando um sistema Isolera One. Este método permitiu a coleta de várias frações as quais foram submetidas a análises complementares por CCD e algumas foram consideradas suficientemente puras para análise de RMN. Os resultados obtidos até o momento indicaram que *Garcinia humilis* contém uma diversidade química complexa e ainda não totalmente explorada. A descoberta deste composto sugere que a planta pode ser uma fonte rica de novos compostos bioativos. A identificação preliminar desta substância é particularmente promissora, pois sugere a existência de compostos que poderiam ter aplicações terapêuticas inéditas. Com isso, observa-se que a continuidade dos estudos é essencial para a completa elucidação da estrutura e propriedades deste composto, com o objetivo de explorar seu potencial farmacológico. Este trabalho não apenas avança o entendimento científico sobre a *Garcinia humilis*, mas também destaca a importância de investigar produtos naturais como fonte de novos medicamentos.

Palavras-chave: Planta-medicinais; *Garcinia*; Cromatografia.

Apoio: Programa Institucional de Bolsas de Iniciação Científica – PIBIC/CNPq e UNIVALI



PROJETO DE MECANISMO DE AUTOMAÇÃO PICK AND PLACE

Igor Eduardo Machado, Julio Cesar Frantz

Engenharia Mecânica - Projetos de Máquinas

No primeiro semestre de 2024, no curso de Engenharia Mecânica da UNIVALI, desenvolveu-se um projeto no contexto da automação de máquinas e equipamentos, com o objetivo de criar um mecanismo de biela-manivela voltado para pegar e largar peças em processos industriais automatizados. Motivado pela necessidade de integrar teoria e prática, o projeto abordou o problema de realizar todo o ciclo de desenvolvimento, desde a concepção inicial até a análise, modelagem e prototipagem utilizando tecnologias educacionais, como softwares e equipamento de fabricação maker, como a cortadora a laser, e elementos mecânicos como parafusos, arruelas e porcas. O estudo foi concebido para aplicar os conhecimentos adquiridos em sala de aula, simulando os desafios que os profissionais de engenharia enfrentam ao projetar mecanismos complexos que necessitam atender certos movimentos respeitando as dificuldades de restrições dos graus de liberdade. A metodologia adotada incluiu as seguintes etapas, iniciando pela seleção do mecanismo apropriado, seguida pelo desenvolvimento cinemático com o auxílio do software MotionGen, onde foram retiradas as medidas necessárias para modelar o mecanismo, que por assim, permitiu a análise da projeção destes movimentos e restrições do sistema. Posteriormente, o AutoDesk Inventor foi utilizado para a modelagem tridimensional de cada peça utilizada no mecanismo e montagem do mecanismo virtualmente, garantindo precisão nos detalhes e na compatibilidade entre as peças. A fase de prototipagem envolveu a preparação dos desenhos técnicos em 2D para corte a laser, resultando na fabricação de componentes que, quando montados, formaram um protótipo funcional e operacional. Os principais resultados alcançados confirmaram a viabilidade técnica e a eficiência do mecanismo projetado, que atendeu aos requisitos de movimentação e desempenho esperados. O processo de desenvolvimento do mecanismo mostrou-se como uma oportunidade de aprendizado, destacando a importância da combinação entre teoria e prática, bem como o uso de ferramentas de software e técnicas de fabricação. Além disso, a experiência reforçou o valor do trabalho colaborativo e do pensamento inovador no contexto da engenharia, preparando os participantes do projeto para os desafios futuros no mercado de trabalho. Concluiu-se que a abordagem integrada, que une teoria, simulação e prática, é essencial para o sucesso no desenvolvimento de projetos de engenharia.

Apoio: Palavras-chave: Automação; Projeto; Mecanismo.



UNIVALI



23º SEMINÁRIO de
INICIAÇÃO CIENTÍFICA
12ª MOSTRA CIENTÍFICA de
INTEGRAÇÃO PÓS-GRADUAÇÃO
e GRADUAÇÃO
7ª JORNADA de TECNOLOGIA
e INOVAÇÃO



SÍNTESE E AVALIAÇÃO DE NOVA MOLÉCULA BIOATIVA PARA ESCLEROSE LATERAL AMIOTRÓFICA (ELA)

Laís Agottani Raimundo, Fátima de Campos Buzzi

Química - Química Orgânica

A Esclerose Lateral Amiotrófica (ELA) é uma doença neurodegenerativa progressiva que afeta as células nervosas no cérebro e na medula espinhal, causando fraqueza muscular, paralisia e, eventualmente, levando à morte. O desenvolvimento de um novo medicamento para ELA pode melhorar significativamente a qualidade de vida dos pacientes, retardar a progressão da doença e proporcionar esperança para aqueles que sofrem com essa condição. Atualmente, os tratamentos para ELA são limitados e focam principalmente em aliviar sintomas e melhorar a qualidade de vida, sendo o Riluzol e, mais recente o Edaravone, os únicos medicamentos aprovados pela ANVISA. Um fármaco inovador poderia oferecer uma abordagem mais eficaz, direcionado a mais alvos inespecíficos da doença proporcionando melhores resultados clínicos. Além de oferecer esperança, prolongar a vida e melhorar a funcionalidade dos pacientes, um novo fármaco para ELA pode também reduzir o impacto socioeconômico da doença, como custos médicos e cuidados de longo prazo, beneficiando a sociedade como um todo. Este projeto teve como objetivo o desenvolvimento de novas moléculas bioativas por meio de planejamento e síntese. Utilizando fragmentos de fármacos preexistentes, como Edaravone e Riluzol, buscou-se alcançar um perfil farmacológico favorável para a Esclerose Lateral Amiotrófica (ELA). A molécula resultante, 4-{{(Z)-[3-(1,3-benzotiazol-2- il)propilideno]amino}-1,5-dimetil-2-fenilpirazol-3-ona}, foi submetida a estudos *in silico* que indicaram perfis farmacológicos promissores. Esses estudos consideraram parâmetros essenciais, como os critérios de Lipinski, Veber, Ghose e Muegge, que avaliam as propriedades físico-químicas de compostos farmacêuticos. Os resultados mostraram alta permeabilidade gastrointestinal e capacidade de atravessar a barreira hematoencefálica, características cruciais para o desenvolvimento de medicamentos para ELA, cujo alvo é o sistema nervoso central (SNC). Além disso, a molécula planejada apresentou bons resultados toxicológicos, exceto pela mutagenicidade, que deve ser avaliada *in vitro*. Comparativamente, o fármaco de referência Edaravone também exibiu fatores de toxicidade semelhantes *in silico*. A molécula planejada demonstrou ótimos perfis farmacológicos, sem violar nenhum critério estabelecido. Além disso, ela se mostrou favorável como alvo em mais de 99 proteínas, incluindo a Serotonina 6 (5-HT6) e o Receptor canabinóide 2 (CBR2), que podem ter resultados promissores para ELA. A síntese da molécula resultou em um produto puro, pronto para análise por espectrometria. Esses resultados fornecem uma base sólida para futuras investigações *in vitro* e *in vivo*, bem como otimizações de rotas reacionais.

Apoio: Palavras-chave: Moléculas bioativas; Esclerose Lateral Amiotrófica (ELA); Avaliação *in silico*.



HIDRODINÂMICA DA DESEMBOCADURA DO CANAL DO LINGUADO, BALNEÁRIO BARRA DO SUL

Leonardo Ferreira Caminha, Marcio Piazero, Cristina Ono Horita, Mauro Michelena Andrade

Oceanografia - Oceanografia Física

No ano de 1935, a ligação entre o Canal do Linguado e a Baía da Babitonga foi interrompida pela construção de um aterro sem qualquer estudo ambiental prévio. Desde então, a comunidade local e o meio científico discutem a possível reabertura entre esses dois ambientes. O projeto teve como foco avaliar a hidrodinâmica da desembocadura do Canal do Linguado e da área costeira adjacente e as características físicas da água do canal. Durante o período de estudo, foram realizadas 3 saídas de campo, entre os meses de março e junho de 2024, utilizando-se dois equipamentos. O primeiro um “*Conductivity, Temperature, and Depth*” (CTD) e o segundo um Perfilador Acústico de Correntes por Doppler (ADCP), que foi instalado no leito do Canal do Linguado por cerca de 30 dias. Com o CTD, foram coletados dados relativos à variação temporal e espacial dos parâmetros físico-químicos da água, como por exemplo salinidade, temperatura, turbidez, oxigênio dissolvido e clorofila-a, os quais indicaram que no Canal do Linguado o oxigênio dissolvido apresentou média de 3.3 mg.L⁻¹, e um mínimo de 0.025 mg.L⁻¹, enquanto a Baía da Babitonga apresentou média de 3.9 mg.L⁻¹, e um mínimo de 2.4 mg.L⁻¹, além de maior estabilidade nos dados. Com base nos dados registrados pelo ADCP, observou-se que a amplitude da maré teve uma variação média de 0,9 m. A velocidade das correntes na área variou entre 0,1 e 0,2 m/s, seguindo o fluxo das marés. Outro aspecto investigado foi o clima de ondas, conforme os dados coletados, constatou-se que a altura significativa das ondas apresentou picos nos dias 14 de maio e 3 de junho, com valores máximos de 1,58 m e mínimos de 0,28 m. O período de pico, que é o intervalo de tempo entre as cristas das ondas, variou entre 4,26 e 15,41 seg. Apesar da hidrodinâmica ser intensa na desembocadura e área adjacente, foi perceptível a baixa qualidade da água do canal do Linguado, devido as condições de anoxia, em comparação com a da Baía da Babitonga. Esses resultados fazem parte da etapa de coleta de dados de um projeto que visa determinar as consequências da reabertura do canal.

Palavras-chave: Hidrodinâmica; Canal do Linguado; Monitoramento Ambiental.

Apoio: Câmara Técnica do Canal do Linguado do Grupo Pró Babitonga (GPB), por meio dos recursos de ação compensatório intermediados pelo MPF/Jlle; FAPESC Nº 54/2022, projeto intitulado: “Estudo hidrodinâmico para apoio à reconstrução ambiental do Canal do Linguado, Baía da Babitonga, litoral Norte de Santa Catarina”; Programa Institucional de Bolsas de Iniciação Científica – PIBIC/CNPq e UNIVALI



UTILIZAÇÃO DA N-CARBOXIMETILQUITOSANA-Fe NA ADSORÇÃO DE CORANTES ALIMENTÍCIOS PRESENTE EM MEIO AQUOSO

Luana Corrêa Pianezzer, Clovis Antonio Rodrigues

Química - Química Analítica

Por tomarem os alimentos e bebidas mais atraentes e apetitosos, os corantes naturais ou sintéticos são usados na indústria de bebidas, sorvetes e confeitarias. Os corantes alimentícios artificiais, são derivados de compostos orgânicos ou inorgânicos e substituiu os corantes naturais. Eles são usados em uma ampla gama de indústrias de alimentos. Os corantes mais utilizados incluem os do grupo azo (-N=N-), devido à sua alta solubilidade, baixo custo e melhor fixação nos alimentos, como exemplo de corante artificial temos o amarelo de tartrazina (AT), este corante é o mais utilizado na preparação de doces e bebidas de coloração amarela. Entretanto estudos mostraram que a ingestão desse corante, por indivíduos propensos a rinite alérgica, asma brônquica, urticária ou sensibilidade a anti-inflamatórios não esteroides, resultaram na redução significativa no pico de fluxo expiratório e apresentaram angioedema, congestão nasal, coceira na pele e urticária. Aproximadamente 12% dos corantes utilizados na indústria são desperdiçados na forma de efluentes líquidos após o processo de produção dos alimentos. Vários métodos são empregados na remoção desses corantes efluentes, entre eles a adsorção. Neste trabalho do adsorvente N- carboximetilquitosana-Fe (N-QTSFe) foi empregado na remoção do AT presente em meio aquoso. Os experimentos de adsorção foram realizados em sistemas de batelada e os parâmetros avaliados foram pH do meio, tempo de contato, temperatura e concentração da solução de AT. A concentração da solução variou de 50-300 mg/L, o pH de 2-12, a temperatura de 25° e 45 °C, para a cinética de adsorção, o tempo de contato de 15-540 min e concentração de solução 50 mg/L. A quantidade de na-QTS-Fe foi mantida em constante em 25 mg e o volume da solução em 20 mL. Os resultados da cinética mostram que o processo de adsorção segue cinética de pseudo segunda-ordem com $K 7,3 \times 10^{-3}$ g/mg.min e quantidade de AT adsorvida no equilíbrio de 23 mg/g. Os resultados mostraram que a adsorção máxima ocorre em pH=2,0 com adsorção de 53,0 mg/g. Na N-QTSFe os sítios de adsorção são os íons Fe^{3+} portanto, a adsorção é favorecida em pH<2,0, a medida que o pH aumenta, ocorre a competição dos íons OH^- e do corantes aniônico pelos sítios de adsorção tendo como consequência a diminuição da adsorção. A quantidade de AT adsorvida diminuiu com a temperatura mostrando que o processo de adsorção é exotermico, a temperatura prova o acesso do corante à maior número de sítios de adsorção. As capacidades máximas de adsorção, calculada aplicando o modelo matemático de Langmuir-Freudich, foram 107 mg/g e 84 mg/g á 25°C e 45 °C respectivamente. Estes resultados mostraram que QTS-Fe tem uma razoável capacidade de adsorção do AT, especialmente pH ácido, sendo um promissor adsorvente para a remoção deste corante presente em efluentes.

Palavras-chave: Amarelo de tartrazina; Quitosana; Efluentes.

Apoio: Programa de Bolsas de Pesquisa do UNIEDU/Governo de Santa Catarina e UNIVALI



UM ESTUDO SOBRE A LEI DAS ESTRELAS

Lucas Fernandes Nunes, Argus Cezar da Rocha Filho

Astronomia - Astrofísica Estelar

Este projeto tem como objetivo realizar observações sistemáticas dos conceitos de ciência presentes nos trabalhos desenvolvidos pelos estudantes que participam das disciplinas do Novo Ensino Médio realizadas nos Laboratórios de Física em parceria com o Colégio de Aplicação da Univali – CAU. O foco está em evidenciar os conceitos e conhecimentos relacionados a área de Ciência da Natureza que são desenvolvidos pelos estudantes nas disciplinas de astronomia, ofertadas no ensino médio nas disciplinas do Immersive Way. O projeto se caracteriza por promover ao estudante o desafio de compreender as leis estelares. Neste primeiro aspecto é fundamental a compreensão de como a vida se origina e evolui em nosso universo. Essa característica pode fazer da Astronomia uma importante ferramenta em nossa motivação como alunos no estudo das disciplinas de Ciências, Física, Química e Biologia. Associando os elementos da curiosidade e motivação a um processo de ensino realizado por meio de metodologias diferenciadas, levando-se em consideração nosso interesse. A pesquisa seguirá uma abordagem indutiva em que a partir de observações sistemáticas buscaremos identificar regularidades que possam subsidiar teorias acerca dos fenômenos estudados e observados. Como procedimentos metodológicos adotamos a realização de observações exploratórias, tendo como objetivo nos ambientar na pesquisa e também levantar as primeiras hipóteses acerca de como melhor realizar o registro dos conceitos de ciência presentes neste projeto. Com ajuda do orientador será construído um protocolo de observação dos itens específicos que devem ser observados tanto qualitativa quanto quantitativamente pelo aluno pesquisador. Em meio a estes questionamentos, permitiu-se neste período um debate sobre as múltiplas possibilidades deste desenvolvimento e a produção de tabelas, gráficos e textos visando inclusões no relatório final. O ponto chave surge da interação entre professores e alunos em práticas pedagógicas diferentes daquelas utilizadas em aulas expositivas baseadas em um modelo de construção. Os conceitos identificados serão confrontados com as habilidades de ciências referidas na BNCC (base nacional curricular comum), tanto do ensino fundamental quanto do ensino médio, a fim de identificar quantos e quais destas habilidades estão sendo trabalhadas pelos estudantes nestes projetos.

Palavras-chave: Lei das Estrelas; Iniciação Científica; Construtivismo.

Apoio: Programa Institucional de Bolsas de Iniciação Científica para o Ensino Médio – PIBIC-EM/CNPq e UNIVALI



EXTRAÇÃO DE RESVERATROL DAS RAÍZES DE FALLOPIA JAPONICA: MÉTODOS SUSTENTÁVEIS E EFICIENTES PARA OBTENÇÃO DE COMPOSTOS BIOATIVOS

Maria Eduarda Hoffmann Chaves, Alysson Luiz da Silva, Otto Mauricio Santos Gerlach, Gizelle Inacio Almerindo

Química - Química Orgânica

A crescente demanda por compostos bioativos naturais reflete o interesse por produtos que proporcionam benefícios à saúde e a busca por alternativas sustentáveis. Entre esses compostos, o resveratrol se destaca por suas propriedades antioxidantes, anti-inflamatórias e anticancerígenas. No entanto, os métodos tradicionais de extração frequentemente enfrentam desafios relacionados à eficiência e pureza do produto final. Este estudo tem como objetivo aprimorar os métodos de extração de resveratrol a partir das raízes de *Fallopia japonica*, buscando uma produção mais eficaz e sustentável para o mercado de biocosméticos. A pesquisa iniciou com a preparação das raízes de respectiva planta, as quais foram fornecidas pela indústria de Biocosméticos. As partes das raízes foram classificadas em três categorias: partes grossas, ramificações menores e ramificações finas. Em seguida foram cortadas em tamanho padrão sendo realizadas análise de teor de umidade em balança de infravermelho, obtendo-se variações significativas na umidade: raízes grossas entre 18,16% e 59,58%, ramificações menores com 0,99%, e ramificações finas com 58,62%. Visto o alto teor de umidade optou-se por acondicionamento em geladeira (cerca de 11°C). O processamento das raízes envolveu a secagem em estufa de circulação de ar para avaliar o tempo ideal de secagem, assim como, condicionamento em geladeira (cerca de 11°C) de uma porção *in natura* (sem secagem). A secagem foi monitorada até que as amostras atingissem uma massa constante, cujo tempo de secagem foi de 25h a 40°C. Para a extração dinâmica, utilizou-se uma solução de 70% álcool de cereal, 30% água e 30 g de raízes para 1.000 mL, adaptada para a escala laboratorial. As raízes foram agitadas magneticamente por diferentes períodos (30, 60 e 90 minutos) e armazenadas em temperatura ambiente e na geladeira. As análises qualitativas e quantitativas mostraram variações na cor e no odor das amostras, com aquelas armazenadas na geladeira apresentando cor mais clara e odor menos intenso de álcool. O tempo de 90 minutos mostrou-se ideal para a extração conforme cromatografia líquida de alta eficiência (CLAE) cujo método utilizado foi fase móvel A: Acetonitrila, fase móvel B: H₂O acidificada (0,1% ácido fórmico v:v), coluna C18 100x4,6mm 5µm, fluxo 1ml/min e temperatura 35°C (Método Gradiente). Além disso, testou-se a moagem das raízes secas no liquidificador, o que resultou em uma área de detecção de resveratrol significativamente maior em comparação com raízes úmidas. A extração foi realizada por períodos variados (90 minutos e 20 horas), demonstrando que períodos prolongados de contato entre o solvente e o material vegetal aumentam a concentração de resveratrol. Os resultados desta pesquisa destacam a importância da otimização dos métodos de extração para melhorar a eficiência e a pureza do resveratrol. A escolha das raízes de *Fallopia japonica* como fonte de extração mostrou-se vantajosa, oferecendo uma alternativa sustentável e econômica. A secagem controlada e a análise detalhada da umidade foram cruciais para garantir a qualidade do material. Experimentos com períodos prolongados de agitação e moagem das raízes secas resultaram em uma maior concentração de resveratrol, validando a eficácia dos novos métodos de extração.

Palavras-chave: Resveratrol; Extração; Compostos Bioativos.



UNIVALI



23º SEMINÁRIO de INICIAÇÃO CIENTÍFICA

12ª MOSTRA CIENTÍFICA de INTEGRAÇÃO PÓS-GRADUAÇÃO e GRADUAÇÃO

7ª JORNADA de TECNOLOGIA e INOVAÇÃO



ISSN 1983-117X

DESENVOLVIMENTO DE DERIVADOS DA NARINGENINA: AVALIAÇÃO *IN SILICO*, SÍNTESE E CARACTERIZAÇÃO ESTRUTURAL PARA APLICAÇÕES TERAPÊUTICAS

Valdir Cechinel Filho, Fátima de Campos Buzzi, Maria Eduarda Signorini Pereira

Química - Química Orgânica

A naringenina é um flavonoide encontrado em frutas cítricas, conhecido por suas amplas propriedades biológicas. Ela possui notáveis propriedades antioxidantes, e pesquisas recentes destacam sua eficácia potencial no tratamento de patologias do sistema nervoso central, como isquemia cerebral. A naringenina demonstrou a capacidade de inibir de forma reversível a atividade das enzimas acetilcolinesterase (AChE) e butirilcolinesterase (BChE), evidenciando seu potencial terapêutico para diversas doenças. Este flavonoide também promove o aumento dos níveis de adiponectina, uma adipocina com efeito protetor contra a aterosclerose, além de modular a resposta inflamatória endotelial e as funções da parede vascular. Adicionalmente, a naringenina eleva as atividades das enzimas antioxidantes superóxido dismutase (SOD), catalase e glutatona peroxidase. Este trabalho propôs o planejamento de novos derivados da naringenina e a avaliação do potencial terapêutico por meio de técnicas computacionais *in silico*. A metodologia inclui a seleção dos compostos mais promissores, a síntese e a caracterização dos compostos por ressonância magnética nuclear de próton e carbono. Foram avaliadas, por métodos *in silico* dez moléculas, derivadas da naringenina com o uso da ferramenta computacional online SwissADME e para o desenvolvimento das estruturas computacionais ACD/ChemSketch, realizando a predição de absorção e de permeabilidade de acordo com os parâmetros estipulados na Regra de Lipinski, e suas extensões, além da absorção intestinal (HIA) e permeação da barreira hematoencefálica (BHE). Dentre as moléculas avaliadas, a maioria atendeu aos parâmetros de Lipinski, que avalia: o peso molecular que deve ser menor ou igual a 500g/mol, e os resultados encontrados foram entre 362.38 g/mol e 590.28 g/mol; o número de grupos aceptores de ligação hidrogênio, que deve ser menor ou igual a 10, ficaram entre 5 e 7; o número de grupos doadores de ligação hidrogênio alternou entre 1 e 2, devendo ser menor ou igual a 5 e, o consenso de Log P variou entre 3,33 e 7,07, sendo importante ficar abaixo de 5. As moléculas também cumpriram os parâmetros de Veber, pois a área de superfície polar (TPSA) ficou entre 64,99 e 85,22 Å² e o número de ligações rotáveis alternou entre 4 e 9. Ao se avaliar pelo modelo do Boiled-Egg as moléculas mostraram maior probabilidade de serem absorvidas pelo trato gastrointestinal. Para a síntese dos derivados da naringenina, foi adicionada 1,8 mmols da naringenina com 5,48 mmol de brometo de benzila, utilizando como solvente 0,5 ml de dimetilformamida e por último adicionado 1,8 mmols de carbonato de potássio sob o método reacional refluxo por 48h. A reação foi monitorada através de Cromatografia em Camada Delgada, e foi observado a formação de diversos produtos, ao final da reação, o produto de cor amarela foi vertido em gelo e água destilada, em seguida o precipitado foi filtrado a vácuo. Realizou-se a recristalização do produto com etanol e água. A caracterização espectroscópica foi realizada por ressonância magnética nuclear de próton e carbono, confirmando do produtos substituído. Neste estudo, derivados da naringenina foram planejados, avaliados *in silico*, selecionados e sintetizados, utilizando um reagente benzilado sem substituinte como ponto de partida. O trabalho destaca o potencial de modificações estruturais na naringenina para a criação de novos compostos bioativos com melhores perfis farmacocinéticos e farmacodinâmicos, sugerindo a possibilidade de desenvolver novas terapias eficazes baseadas em flavonoides modificados.

Palavras-chave: Naringenina; Flavonoides; Bromação.

Apoio: Universidade do Vale do Itajaí



UNIVALI



23º SEMINÁRIO de
INICIAÇÃO CIENTÍFICA
12ª MOSTRA CIENTÍFICA de
INTEGRAÇÃO PÓS-GRADUAÇÃO
e GRADUAÇÃO
7ª JORNADA de TECNOLOGIA
e INOVAÇÃO



PLANEJAMENTO E SÍNTESE DE MOLÉCULAS COM POTENCIAL TERAPÊUTICO

Merilyn Adrielly Lopes de Paulo, Fátima de Campos Buzzi

Química - Química Orgânica

A apigenina é um flavonoide que tem despertado grande interesse científico devido ao seu potencial para promover a saúde, modulando a inflamação, o estresse oxidativo e outras atividades biológicas. Esta pesquisa propôs o planejamento de novos compostos heterocíclicos, avaliação do potencial terapêutico por meio de técnicas computacionais in silico, a seleção dos compostos mais promissores, a síntese e a caracterização dos compostos por ressonância magnética nuclear de próton e carbono. Após o planejamento foram avaliadas in silico dez moléculas, com o uso da ferramenta computacional online SwissADME e para o desenvolvimento das estruturas computacionais ACD/ChemSketch, realizando a predição de absorção e de permeabilidade de acordo com os parâmetros estipulados na Regra de Lipinski, e suas extensões, além da absorção intestinal (HIA) e permeação da barreira hematoencefálica (BHE). Dentre as moléculas avaliadas, a maioria atendeu aos parâmetros de Lipinski, que avalia: o peso molecular que deve ser menor ou igual a 500g/mol, e os resultados encontrados foram entre 360,36 e 519,37 g/mol; o número de grupos aceptores de ligação hidrogênio, que deve ser menor ou igual a 10, ficaram entre 5 e 7; o número de grupos doadores de ligação hidrogênio alternou entre 1 e 2, devendo ser menor ou igual a 5 e, o consenso de Log P variou entre 3,75 e 7,32, sendo importante ficar abaixo de 5. As moléculas também cumpriram os parâmetros de Veber, pois a área de superfície polar (TPSA) ficou entre 68,9 e 89,13 Å² e o número de ligações rotáveis alternou entre 4 e 9. Ao se avaliar pelo modelo do Boiled-Egg as moléculas mostraram maior probabilidade de serem absorvidas pelo trato gastrointestinal. Para a síntese dos derivados da apigenina, foi adicionada 1,8 mmols da apigenina com 10,8 mmol de brometo de benzila, utilizando como solvente 10 ml de dimetilformamida e por último adicionado o carbonato de potássio sob o método reacional refluxo. A reação foi monitorada através de Cromatografia em Camada Delgada, e foi observado a formação de diversos produtos, ao final da reação, após 8 horas a 120 °C, o produto foi vertido em gelo e água destilada, em seguida o precipitado foi filtrado a vácuo. Utilizou-se o equipamento Isolera e, posteriormente, a cromatografia em coluna para a separação dos produtos obtidos na síntese. Foi realizado a caracterização espectroscopicamente desses produtos por ressonância magnética nuclear de próton e carbono, confirmando a estrutura de cada produto. No presente trabalho foram planejados, avaliados in silico, selecionados e sintetizado dois derivados de apigenina pois nos testes in silico apresentaram os resultados mais promissores aos parâmetros avaliados, apresentando boa absorção pelo TGI, porém como a série se apresentou muito lipofílica, em continuidade, sugere-se realizar modificações moleculares nestas moléculas com outros reagentes para melhorar a solubilidade ou até mesmo incorporar estas moléculas em diferentes formas farmacêuticas. Para assim, verificar se apresentam uma boa absorção e permeação no organismo e se a biodisponibilidade oral é apropriada a um fármaco.

Palavras-chave: Apigenina; Compostos heterocíclicos; Brometo de benzila.



REMOÇÃO DO AMARELO DE TARTRAZINA PRESENTE EM MEIO AQUOSO USANDO A QUITOSANA- Fe COMO ADSORVENTE

Monize Evely Rabelo, Clovis Antonio Rodrigues

Química - Química Analítica

Os corantes são adicionados aos alimentos para dar cor aos alimentos incolores, para realçar as cores já existentes, evitando a perda de cor devido aos fatores ambientais. Eles melhoram as cores já existentes e que são perdidas durante a fabricação ou para aumentar a vida útil. Os corantes alimentícios artificiais, são derivados de compostos orgânicos ou inorgânicos e substituiu os corantes naturais. Eles são usados em uma ampla gama de indústrias de alimentos. São geralmente tem cores mais vibrantes e estáveis do que os corantes naturais, como por exemplo o amarelo de tartrazina (AT). Este corante é extremamente nocivo para pessoas alérgicas sendo o mais frequente quando se trata de eventos alérgicos em crianças. Não existe legislação específica quanto aos limites seguros de para a presença corantes alimentícios em efluentes em corpos hídricos, entretanto a remoção destes corantes deve ocorrer nos sistemas de tratamento de efluentes das indústrias de alimentos. O processo de adsorção é o processo mais simples de remoção de corantes presentes em efluentes líquidos, principalmente quando são empregados adsorventes alternativos. Neste trabalho foi empregado a quitosana-Fe (QTS-Fe) para a remoção do AT presente em soluções aquosas. Os experimentos de adsorção foram realizados em sistemas de batelada e os parâmetros avaliados foram pH do meio, tempo de contato, temperatura e concentração da solução de AT. A concentração da solução variou de 350-600 mg/L, o pH de 2-12, a temperatura de 25° e 45 °C, para a cinética de adsorção, o tempo de contato de 15-120 min e concentração de solução 480 mg/L. A quantidade de na-QTS-Fe foi mantida em constante em 25 mg e o volume da solução em 20 mL. A cinética de adsorção segue cinética de pseudo segunda ordem com $K 3,4 \times 10^{-4}$ g/mg.min e quantidade de AT adsorvida no equilíbrio de 512 mg/g. Os resultados mostraram que a capacidade de adsorção, praticamente, se mantém constante na faixa de entre pH 2-8, a adsorção máxima ocorre em pH=4,0 com adsorção de 599,0 mg/g. Os sítios de adsorção do corante são os grupos $-NH^+$, em pH menor do que 5,3 e os íons Fe^{3+} , portanto a adsorção é favorecida em pH ácidos. A quantidade de AT adsorvida aumentou com a temperatura mostrando que o processo de adsorção é endotérmico, a temperatura prova o acesso do corante à maior número de sítios de adsorção. As capacidades máximas de adsorção, calculada aplicando o modelo matemático de Langmuir-Freudich, foram 472 mg/g e 541 mg/g á 25°C e 45 °C respectivamente. Estes resultados mostraram que QTS-Fe tem uma ótima capacidade de adsorção do AT, em ampla faixa de pH do meio reacional, sendo um promissor adsorvente para a remoção deste corante presente em efluentes, sendo necessário estudos empregando efluentes reais e simulado de indústria de alimento.

Palavras-chave: indústria de alimento; adsorção; corantes de alimentos.

Apoio: Programa de Bolsas de Pesquisa do UNIEDU/Governo de Santa Catarina e UNIVALI



S.I.D.D. - Sistema Inteligente Discernidor de Doenças

Nicolas Branco Meinerz, João Pedro Brinhosa Vieira, Mauricio Cardoso Ludvig

Ciência da Computação - Sistemas de Computação

O projeto "Sistema Inteligente Discernidor de Doenças" (SIDD) é uma iniciativa inovadora que integra medicina e ciência da computação para desenvolver uma ferramenta tecnológica avançada capaz de realizar diagnósticos médicos utilizando Inteligência Artificial (IA). Este projeto foi concebido para enfrentar os desafios enfrentados pelo sistema público de saúde brasileiro, com o objetivo de otimizar o processo de diagnóstico, diminuindo o tempo de espera e a burocracia nas instituições de saúde pública. O principal objetivo do SIDD é agilizar o processo de diagnóstico médico, melhorando a alocação de recursos e reduzindo as filas de espera que frequentemente comprometem a eficiência do sistema de saúde. O sistema utiliza IA para analisar sintomas descritos pelos pacientes e fornecer diagnósticos preliminares, incluindo doenças e condições externas como picadas de insetos e afecções cutâneas. Além disso, almeja-se a implementação futura a integração de um sistema de videochamadas que facilita a interação direta entre pacientes e profissionais de saúde, permitindo que os médicos se concentrem em casos mais complexos e críticos, enquanto o sistema lida com diagnósticos preliminares. O desenvolvimento do SIDD foi primeiramente baseado em um estudo bibliográfico que evidenciou a ausência de ferramentas tecnológicas adequadas no sistema de saúde brasileiro, particularmente para o diagnóstico rápido e eficaz de doenças. O projeto foi estruturado em três frentes principais: a programação da IA, a coleta de dados clínicos e epidemiológicos, e o desenvolvimento de relatórios e documentação técnica. A equipe criou um algoritmo sofisticado para identificar padrões de sintomas a partir de um extenso conjunto de dados, utilizando uma árvore de decisão otimizada para fazer perguntas específicas aos usuários. Esse processo ajuda a reduzir a incerteza diagnóstica e aumenta a precisão das avaliações. A coleta de dados clínicos e epidemiológicos foi crucial para treinar a IA, criando uma base de dados completa de diversas patologias. Utilizou-se a base de dados de sintomas disponível na plataforma Kaggle, bem como o banco de dados de sintomas do New York Presbyterian Hospital, disponível em Disease Symptom Knowledge Base, além do DermNet para os dados de dermatologia voltados ao sistema identificador de picadas. Estes conjuntos de dados forneceram informações valiosas sobre sintomas e doenças, permitindo uma modelagem precisa dos algoritmos de diagnóstico. Para garantir a eficácia e a usabilidade do sistema, uma interface intuitiva foi desenvolvida, permitindo que os usuários descrevessem seus sintomas de maneira clara e precisa. A contribuição de uma nova integrante da equipe, responsável pelo design gráfico, foi fundamental para a criação de uma identidade visual atraente e funcional para o aplicativo. Aspectos éticos e legais foram priorizados desde o início do projeto, assegurando a privacidade e a segurança dos dados dos usuários. Os testes iniciais do SIDD foram realizados em um ambiente controlado com indivíduos saudáveis simulando sintomas de várias doenças. Os resultados indicaram que o sistema conseguiu identificar corretamente aproximadamente 90% dos casos. No entanto, considerando os 10% de diagnósticos incorretos, ainda existe a necessidade de aperfeiçoamento do algoritmo, especialmente para melhorar a identificação de doenças com sintomas mais raros ou ambíguos. Apesar dessas limitações, o SIDD apresenta um potencial significativo para aprimorar a eficiência dos diagnósticos, reduzir filas de espera e otimizar a alocação de recursos médicos no sistema de saúde público. A continuidade do desenvolvimento do sistema é essencial para maximizar seu impacto positivo na qualidade do sistema de saúde público.

Palavras-chave: SIDD; Inteligência Artificial; Saúde.

Apoio: CNPq



PREPARO E CARACTERIZAÇÃO DE CATALISADOR HETEROGÊNEO PARA A SÍNTESE DE CHALCONAS

Isadora Gomes Schmidt, Nicoli Barbieri Alves, Alex Formento, Gizelle Inacio Almerindo

Engenharia Química - Tecnologia Química

A reação de Claisen-Schmidt tem sido o método mais comum de síntese de chalconas, no qual um aldeído aromático e uma metilcetona reagem na presença de um catalisador. Porém, a catálise homogênea, comumente utilizada, apresenta desvantagens, tais como dificuldade de recuperação do catalisador, geração de resíduos, reações colaterais e baixo rendimento. A fim de superar essas limitações, uma alternativa pode ser a síntese verde por meio da catálise heterogênea, que oferece vantagens como a facilidade de separação do produto, recuperação do catalisador e redução de resíduos, rotas de extremo interesse econômico e sustentáveis. A busca por catalisadores heterogêneos de baixo custo e sustentáveis tem motivado pesquisadores a explorar diferentes fontes de biomassa. O bagaço de malte, resíduo agroindustrial gerado pela produção de cerveja, tem sido estudado como precursor de carvão ativado devido às suas propriedades físico-químicas e abundância. Nesse contexto, o presente trabalho preparou e caracterizou um catalisador heterogêneo de carvão ativado com NaOH mediante impregnação úmida de 10 g bagaço de malte e 50 mL uma solução aquosa de NaOH (2,0 mol L⁻¹). Essa mistura foi submetida a agitação por 48 horas a 30 °C, e então filtrado com funil de Buchner e lavado com água até atingir pH 7. Em seguida, as amostras foram secas a 110 °C por 24 horas. O pH do catalisador foi de 9,60 comprovando a impregnação com NaOH visto que o carvão sem ativação apresentou um pH de 4,5. A microscopia eletrônica de transmissão comprovou a estrutura porosa do catalisador obtido. Reações catalíticas homogêneas e heterogêneas foram conduzidas em sistema de refluxo sendo a conversão em chalcona avaliada utilizando-se Cromatografia em Camada Delgada (CCD). Os testes foram realizados utilizando concentrações de 10% do catalisador heterogêneo em relação à acetofenona (m/m) com 2 mmol de acetofenona e 2 mmol de 4-nitrobenzaldeído para 15 mL de etanol. Também se testou os reagentes 4-metoxiacetofenona e 4-benziloxibenzaldeído para a síntese de uma segunda chalcona. As reações foram conduzidas em balões de fundo redondo acoplados a um condensador com tempo reacional de 1, 2 e 3 horas. Após isso, a mistura reacional foi filtrada e o catalisador heterogêneo recuperado. Para a catálise homogênea a presença das chalconas foi confirmada por Cromatografia em Camada Delgada (CCD) com eluente 30:5 (hexano:acetato de etila). Entretanto, para a catálise heterogênea não se obteve conversão dos reagentes. Além disso, o catalisador heterogêneo saiu da esfera de reação devido ação do refluxo sendo necessário avaliar agitação magnética na ausência de refluxo.

Palavras-chave: Catálise; Bagaço de malte; Claisen-Schmidt.

Apoio: Programa Institucional de Bolsas de Iniciação Científica – PIBIC/CNPq e UNIVALI



UNIVALI



23^o SEMINÁRIO de INICIAÇÃO CIENTÍFICA

12^a MOSTRA CIENTÍFICA de INTEGRAÇÃO PÓS-GRADUAÇÃO e GRADUAÇÃO

7^a JORNADA de TECNOLOGIA e INOVAÇÃO



ISSN 1983-117X



4-HIDROXICALCONA: SÍNTESE, PURIFICAÇÃO E APLICAÇÕES POTENCIAIS EM QUÍMICA MEDICINAL

Larissa Munaretto de Oliveira, Pâmella Demarchi, Delano Toazza Chechi, Fátima de Campos Buzzi

Química - Química Orgânica

As chalconas são compostos orgânicos pertencentes à classe dos flavonoides, conhecidos por sua ampla gama de atividades biológicas, incluindo propriedades anti-inflamatórias, antioxidantes, antimicrobianas e anticancerígenas. Dentro dessa classe, a 4-hidroxicalcona tem se destacado devido ao seu duplo papel: é tanto uma precursora de flavonoides mais complexos quanto um agente farmacológico ativo por si só. Sua estrutura química simples, mas versátil, permite uma fácil modificação estrutural, o que a torna um protótipo atraente para a síntese de novos híbridos com propriedades farmacológicas otimizadas. A posição única da 4-hidroxicalcona na química medicinal advém de sua capacidade de sofrer uma variedade de reações químicas que podem ser usadas para criar derivados com propriedades específicas desejadas. Neste estudo, o objetivo foi sintetizar e caracterizar a 4-hidroxicalcona como um modelo de protótipo para a síntese futura de novos híbridos. A síntese da 4-hidroxicalcona foi realizada através de uma reação de condensação de Claisen-Schmidt, um método clássico de formação de chalconas. A síntese foi conduzida adicionando 3,7 mmol de 4-hidroxicetofenona e benzaldeído, em proporção 1:1, usando 7,3 mmol de NaOH como catalisador, com a menor quantidade possível de solvente (etanol), sob agitação magnética à temperatura ambiente por 36 horas. Após a reação, o produto foi vertido em gelo e água destilada, e o precipitado formado foi filtrado a vácuo. O progresso da reação foi monitorado por cromatografia em camada delgada (CCD), utilizando hexano e acetato de etila (60:40) como fase móvel. O composto obtido foi recristalizado em etanol, resultando em um rendimento de 31%. A caracterização foi realizada através de ponto de fusão e ressonância magnética nuclear de hidrogênio (RMN¹H) e carbono-13 (RMN¹³C), utilizando um espectrômetro Bruker AMX-300 Advance no Laboratório de Ressonância Magnética Nuclear do Curso de Farmácia da UNIVALI. Os espectros RMN confirmaram a identidade do composto, mostrando todos os picos correspondentes à molécula de 4-hidroxicalcona e indicando um excelente grau de pureza. A importância da 4-hidroxicalcona como uma molécula protótipo está na sua capacidade de ser funcionalizada em várias posições da estrutura, permitindo o desenvolvimento de análogos com características farmacológicas ajustadas. Por exemplo, a introdução de grupos funcionais como halogênios, metilas, ou diferentes heterociclos pode aumentar a solubilidade em água, melhorar a estabilidade metabólica, ou alterar a afinidade de ligação a um alvo biológico específico. Além disso, a 4-hidroxicalcona pode servir como um bloco de construção para criar híbridos que combinam as propriedades de diferentes classes de compostos bioativos, potencializando sua eficácia terapêutica. A síntese e caracterização da 4-hidroxicalcona neste estudo não apenas fornecem uma base sólida para o desenvolvimento de novos híbridos, mas também destacam a versatilidade dessa molécula na modulação de propriedades farmacológicas. O potencial de modificação estrutural da 4-hidroxicalcona abre caminho para futuras investigações no desenvolvimento de compostos mais ativos, seletivos e com melhor perfil farmacocinético, reforçando seu papel como uma plataforma promissora na química medicinal.

Palavras-chave: Chalconas; Protótipo; Química Medicinal.



UNIVALI



23º SEMINÁRIO de INICIAÇÃO CIENTÍFICA

12ª MOSTRA CIENTÍFICA de INTEGRAÇÃO PÓS-GRADUAÇÃO e GRADUAÇÃO

7ª JORNADA de TECNOLOGIA e INOVAÇÃO



ISSN 1983-117X



EXPLORANDO HABITATS MARINHOS PROFUNDOS E A MEGAFaUNA BENTÔNICA E BENTOPELÁGICA DO PLATÔ DE SÃO PAULO, SUDOESTE ATLÂNTICO

Thayse Sant'Ana Fonseca, Jose Angel Alvarez Perez

Oceanografia - Oceanografia Biológica

O Platô de São Paulo é uma importante feição da paisagem profunda da Margem Continental Brasileira, associada aos principais campos de exploração de hidrocarbonetos. A segunda perna da expedição científica conhecida como "latá-Piúna", em 2013, a bordo de um submersível tripulado, operado pelo Navio Oceanográfico Yokozuka, através de um consórcio bilateral Brasil-Japão, realizou uma série de nove mergulhos sobre o fundo marinho do platô, revelando habitats de substratos consolidados, formados por exsudações naturais de petróleo que se solidificam devido à baixa temperatura e elevada pressão ("asphalt seeps"). Em que pese a importância dos recifes de asfalto descobertos na região de estudo, as imagens do fundo oceânico e amostras biológicas dessa feição demonstraram que esses habitats suportam uma importante diversidade de megafauna bentônica associada, no entanto, a fauna que não estava associada a essas exsudações não foram analisadas. Essas lacunas na descrição dessa feição permaneciam abertas na área explorada e motivaram a realização desse estudo. Os vídeos foram analisados para a caracterização do substrato, classificação das paisagens marinhas e reconhecimento taxonômico da megafauna bentônica e bentopelágica. Estes organismos foram classificados primeiramente em morfotipos, a posteriori, resultando em um catálogo fotográfico dos grandes grupos taxonômicos identificados. Foram calculadas frequências de ocorrência dos principais grupos taxonômicos e de morfotipos por mergulho, paisagem marinha, profundidade e por área, como uma forma descritiva de representar a ocorrência da diversidade, riqueza e abundância relativas da megafauna bentônica nas diferentes porções do platô, que será descrita e discutida como base e hipóteses para estudos ecológicos mais detalhados no futuro. O estudo aqui proposto soma-se a uma sequência prévia de estudos já publicados, derivados das atividades exploratórias da expedição "latá-Piúna" em outras feições profundas do Atlântico Sudoeste, compondo uma linha de base ambiental relevante às iniciativas de uso e conservação do mar profundo dentro e fora da Zona Econômica Exclusiva do Brasil. As atividades desenvolvidas para atingir o primeiro objetivo proposto, resultaram na definição de cinco paisagens e registrados um total de 6063 ocorrências de organismos, divididas ao longo de 66 morfotipos e reconhecidas taxonomicamente, padronizando-as em grandes grupos zoológicos (Filos). Em termos gerais os poríferos formam o grupo zoológico predominante tanto em termos de diversidade (27,3% dos morfotipos – 18 morfotipos), quanto na abundância relativa de organismos visualizados (65,4% das observações – 3064 indivíduos). Equinodermas e peixes (Filo Chordata) também foram relativamente diversos nas imagens (21,2 e 19,7% respectivamente) e equinodermas também relativamente abundantes (23,6% dos indivíduos). Altos valores de abundância e riqueza relativas foram observados no estrato batimétrico Batial 1, com profundidades entre 2284 e 2783 metros, distribuídos ao norte do platô e foram associados a substrato misto nas paisagens marinhas, principalmente variando entre H1, H3 e H4, indicando que essas descontinuidades abruptas entre as paisagens, com variação de profundidades e substratos podem favorecer a biodiversidade local. Em áreas profundas, fauna bentônica e bentopelágica foi geralmente escassa, o que em estudos pretéritos pode ser usado como hipótese para motivar os testes da associação dos estratos batimétricos com as variáveis ambientais disponíveis no local. Os resultados obtidos corroboram também com os alcançados em outros estudos realizados com os dados da mesma expedição na área estudada, bem como serve de complemento para a compreensão mais completa da biodiversidade e para conhecer as comunidades da megafauna bentônica e bentopelágica nessa região do Platô de São Paulo. Considerando a importância de que algumas espécies figuram os critérios que definem comunidades criticamente vulneráveis aos impactos provocados pelas atividades antrópicas, o presente estudo contribui como forma de embasamento científico para decisões ambientais e econômicas importantes a



23º **SEMINÁRIO de**
INICIAÇÃO CIENTÍFICA

12ª MOSTRA CIENTÍFICA de
INTEGRAÇÃO PÓS-GRADUAÇÃO
e GRADUAÇÃO

7ª JORNADA de TECNOLOGIA
e INOVAÇÃO



respeito do aquecimento global, além de servirem subsídio para pesca sustentável e a proteção da propriedade costeira.

Palavras-chave: Platô de São Paulo; mar profundo; biodiversidade marinha

Apoio: Programa de Bolsas de Pesquisa do UNIEDU/Governo de Santa Catarina e UNIVALI