



16°

Simpósio Brasileiro de Educação Química

SIMPEQUI

6 a 8 agosto 2018

Submissão de Trabalhos 15 março a 28 junho 2018

Centro de Eventos

Hotel

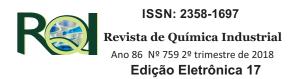
Novo Mundo

Flamengo

Rio de Janeiro

www.abq.org.br/simpequi

Sumário



Pioneiros da Química Alberto Luiz Galvão Coimbra Sumário Manuel Mateus Ventura **Expediente 20.1** Caderno de Química Verde **Editorial** Capa A contecendoPolítica Mineral do Brasil 16º SIMPEOUI: Um adolescente a enfrentar desafios. **Regionais** da ABQ Piauí, Goiás e São Paulo conteceu na RQI ... divulgando a Química no Brasil Aconteceu Agenda_{Eventos} 255th ACS National Meeting & Exposition

Artigos Técnicos

- Equilíbrio ácido-base: ácidos fracos na presença de ácidos e bases fortes Acid-base equilibrium: weak acids in the presence of strong acids and bases
- Simulação numérica de trocador de calor casco-tubo: influência das chicanas sobre a dinâmica do fluido

Numerical simulation of heat exchanger hull-tube: influence of baffles on the dynamics of fluid

- Avaliação da qualidade do biodiesel a partir de diferentes técnicas de lavagem e purificação

 Evaluation of biodiesel quality from different washing and purification techniques
- **73** Síntese da 2-amino-1,4-naftoquinona pela reação de staudinger Synthesis of 2-amino-1,4-naphthoquinone by staudinger reaction
- **78** Electroflocculation as a tool for teaching design of experiments Eletrofoculação como ferramenta para o ensino de delineamentos experimentais

RQI - 2º trimestre 2018 01

Expediente

RQI – Revista de Química Industrial

(www.abq.org.br/rqi)

Órgão oficial da Associação Brasileira de Química para divulgar os eventos que promove; publicar matérias relevantes na área de química, como entrevistas com eminentes personalidades da ciência e tecnologia em geral, artigos técnicos, técnico-científicos e científicos relacionados à área industrial, P&D (inclusive em escala de laboratório) e desenvolvimento de técnicas analíticas, bem como resenhas de livros e outras publicações. A convite do Editor, a RQI publica artigos de opinião de pessoas convidadas.

Indexada no Chemical Abstracts. Classificada no WebQualis da CAPES nas áreas de Ciências Agrárias (B5), Ciências Ambientais (B5), Direito (B4), Engenharias I (B4), Engenharias II (B4), Engenharias III (B5), Interdisciplinar (B4) e Química (B5).

Para fins de citação, a abreviatura da revista a ser usada é Rev. Quim. Ind.

Fundador

Jayme da Nóbrega Santa Rosa (1903-1998)

Editor

Julio Carlos Afonso (UFRI) e-mail: editordarqi@abq.org.br

Editor Associado

Airton Marques da Silva (UECE)

Conselho Editorial

Alvaro Chrispino (CEFET-RJ) Cláudio José de Araújo Mota (UFRJ) David Tabak (FIOCRUZ) Eduardo Falabella Sousa-Aguiar (CENPES e UFRJ) Geraldo André Fontoura (Bayer e UFF) Gil Anderi da Silva (USP) Magda Beretta (UFBA) Maria de Fátima Vitória de Moura (UFRN) Newton Mario Battastini (SINDIQUIM - RS) Peter Rudolf Seidl (UFRJ) Sergio Roberto Bulcão Bringel (INPA e CRQ-XIV) Silvana Carvalho de Souza Calado (UFPE)

Capa, arte e diagramação

Adriana Lopes - asl.eventos@globo.com

Viridiana Santana Ferreira-Leitão (INT)

© É permitida a reprodução dos artigos e reportagens desde que citada a fonte. Os textos assinados são de responsabilidade de seus autores. Normas para envio de artigos: ver na 3ª capa e no portal www.abq.org.br/rqi.



Associação Brasileira de Química Utilidade Pública Federal Decreto 33.254 de 08/07/1953 Mantida Decreto de 27/05/1992 (DOU Seção I - 28/05/1992)

Sede Própria: Avenida Presidente Vargas, 633 - Sala 2208

20071-004 - Rio de Janeiro - RJ Tel / Fax: +55 21 2224-4480 e-mail: secretaria@abq.org.br

www.abq.org.br

Missão: Promover e apoiar, junto à sociedade em geral, discussões e ações estratégicas para a difusão da Química e áreas afins, nos campos da ciência, da educação, da tecnologia e da inovação, por meio de visão sistêmica e integrada ao meio ambiente e ao desenvolvimento sustentável, visando à melhoria da qualidade

Visão: Ser uma entidade reconhecida em âmbito nacional e internacional, destacando-se no cenário científico e tecnológico, fundamentada na ética e na excelência de suas práticas.

Diretoria (mandato dezembro 2017 a novembro de 2019)

Presidente Maria de Fátima V. de Moura

presidencia@abq.org.br

Silvana Carvalho de S. Calado Vice-Presidente silcalado@yahoo.com.br

Diretor Administrativo Henrique Eduardo B. da Silva

hebsquim@globo.com

Diretor Financeiro Luis Carlos Abreu Gomes

luisabq.gomes@gmail.com

Diretor de Ass. Internacionais Agnaldo Arroio

agnaldoarroio@yahoo.com

Diretor de Ass. Olimpíadas Sergio Maia Melo obquimica@gmail.com

Diretor de Educação

Jorge Cardoso Messeder

jorge.messeder@gmail.com

Diretor de Eventos Airton Marques da Silva

airton.marques@uece.br

Diretor de Relac. Interno Jean Carlo Antunes Catapreta

jcac889@hotmail.com **Diretor Técnico-Científico**

Robério Fernandes A. de Oliveira

roberio@skydome.net

Diretores Regionais (mandato dezembro 2017 a novembro de 2019)

Centro-Oeste Renato Candido da Silva

renatocandido 1@hotmail.com

Marciano Henrique de L. Neto Nordeste

marcianohln@gmail.com

Ana Carolina Duarte

ana.carolina@crq14.org.br Sudeste

Frederico Anderson P. Schoene

fapschoene@gmail.com

Sul Elsa Lesaria Nhuch

enhuch@gmail.com

Coordenação, Gerencia e Secretaria

Coordenadora de Cursos Adriana dos Santos Lopes

cursos@aba.org.br

Gerente de Eventos Celso Augusto Fernandes

abgeventos@abg.org.br

Secretaria Geral Fabrício Antonio Costa

secretaria@abq.org.br





Julio Carlos Afonso

Bem-vindo a mais uma edição da Revista de Química Industrial. Este número contempla um espaço dedicado ao trabalho que a Associação Brasileira de Química faz em prol desta ciência pelo Brasil, através do trabalho de três de suas regionais - São Paulo, Goiás e Piauí. Além disso, relata-se a participação da ABQ no 255th ACS National Meeting & Exposition, ocorrido em Nova Orleans em março deste ano e, por fim, passamos em revista a estruturação da periodicidade dos eventos em nível nacional organizados pela ABQ: SIMPEQI e CBQ permanecem anuais (além do Simpósio Nordestino de Química - SINEQUI), enquanto que BIOCOM, ENTEQUI e o novo evento, Encontro Nacional de Hidrotecnologia (ENHTEC), terão periodicidades bianuais.

O lado histórico que permeia a RQI tem neste número um capítulo especial: as trajetórias de dois dos ilustres pioneiros da Química - os Prof. Manuel Mateus Ventura e Alberto Luiz Galvão Coimbra (este recentemente falecido), são reveladas, mostrando a importante contribuição de ambos à química brasileira. Enquanto isso, a seção "Aconteceu na RQI" indica a importância de um país investir em pesquisa e desenvolvimento na construção de sua soberania por meio de matérias publicadas ao longo de toda a sua trajetória. Esse aspecto você também perceberá ao ler o Caderno de Química Verde com mais uma edição rica de conteúdo para seus leitores.

Já que falamos de P & D, a matéria de capa resgata um dos assuntos mais abordados na RQI em seus primeiros 30 anos de existência: o conhecimento e a exploração de nosso patrimônio mineral. Assim, para que os leitores tenham uma visão atual desse tema, convidamos Humberto Gracher Riella, Professor Titular do Departamento de Engenharia Química e Engenharia de Alimentos da Universidade Federal de Santa Catarina, para comentar e trazer dados a respeito da política mineral do Brasil, resultando em um texto rico e muito informativo para os que se interessam e militam na área.

O presente número contém cinco trabalhos, os quais são acessados gratuitamente pelo portal da Revista. Esta vem sendo procurada como uma opção para publicação de pesquisas dos mais variados campos da química e mesmo áreas correlatas, atestado pelo aumento significativo no número de trabalhos publicados nos últimos dois anos. Já constatamos que, embora não esteja ainda indexada em base de dados, a RQI é citada como referência por vários trabalhos publicados segundo a SCOPUS (Elsevier), o que é, sem dúvida, um poderoso estímulo na luta para que esta Revista chegue a esse patamar. As normas de submissão de artigos se encontram no endereço http://www.abq.org.br/rqi/RQI-Normas-para-Submissao-de-Artigos.pdf. O primeiro dos cinco trabalhos deste número evoca o equilíbrio ácido-base, de grande emprego nas áreas de ensino, pesquisa, extensão e desenvolvimento com uma abordagem um pouco distinta daquela normalmente vista em artigos e livros didáticos.

A RQI é uma revista em contínua e permanente evolução. Eis um veículo, ao mesmo tempo tradicional e moderno, uma porta de entrada para o maravilhoso mundo da Química.

RQI: a memória, o presente e o futuro da química aplicada no Brasil passam por aqui!

16° SIMPEQUI:

Um "adolescente" a enfrentar desafios

Jorge Cardoso Messeder

Diretor de Educação da ABQ

Neste ano de 2018, o Simpósio Brasileiro de Educação Química (SIMPEQUI) encontra-se em sua 16ª edição. Ao longo desses quinze anos o SIMPEQUI tem sido o evento que contempla plenamente um dos objetivos estatutários da Associação Brasileira de Química (ABQ), que é "promover e realizar atividades de ensino na área da Química" (disponível em: http://www.abq.org.br/estatuto.html).

Mas para um evento que busca discutir a temática "Educação Química no Século XXI: o que e como ensinar frente às mudanças", muitos são os percalços a serem superados. Para os mais céticos, a questão central deveria vir na forma de pergunta, já que seria impossível contemplarmos a questão central com respostas obtidas apenas no espaço do 16º SIMPEQUI. Além disso, muitas outras indagações poderiam advir com a temática, como: o que estamos querendo alcançar? Como podemos

DO: John Marie Company of the Compan

Alice Lopes numa conferência na Universidade Francisco José de Caldas (Bogotá, Colômbia, 2015)

discutir a Educação em Química diante do cenário atual brasileiro? Estamos preparados para responder?

Daí, o motivo do título desta matéria, ao humanizar o SIMPEQUI, comparando-o a um adolescente. São muitas respostas para que um jovem, de apenas 15 anos, possa dar, diante às inquietudes daqueles que frequentam eventos da área de ensino. No evento o que se busca é discutir, dialogar, procurar um caminho menos tortuoso para nosso caminhar na educação, de um modo geral. Esse é o objetivo do nosso jovem SIMPEQUI...

Não queremos responder, dar soluções, mas aproximar e socializar questionamentos e argumentações sobre temas que estão sendo discutidos em diversas instituições brasileiras na área de ensino de química. Tais discussões serão mediadas durante as palestras, minicursos, interlocuções com autores de livros

da área da educação e do ensino das ciências, divulgação de pesquisas por meio de comunicações orais, e assim, demonstrar o potencial e produção acadêmicos das outras instituições superiores participantes do evento.

Dentre as inúmeras atividades que ocorrerão no 16º SIMPEQUI cabe destacar aqui as palestras que serão proferidas ao longo dos dias 6, 7 e 8 de agosto próximo.

Para a palestra de abertura teremos a expertise da professora Alice Ribeiro Casemiro Lopes, pesquisadora da UERJ, que discutirá os riscos da centralidade no ensino e a interconexão entre permanência e inovações. Cabe destacar que vivemos em total transformação com o desafio

da implementação da Base Nacional Comum Curricular (BNCC). Afinal, esse documento é a grande novidade do ano de 2018, uma vez que norteará a elaboração de currículos de todas as escolas públicas e privadas do país (BRASIL, 2018)*.

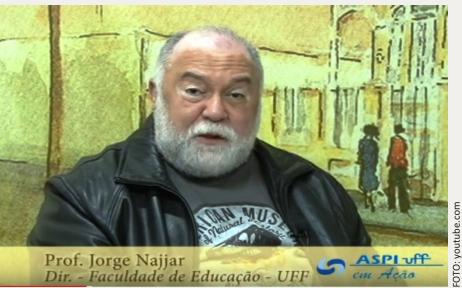
O evento contará com o professor Jorge Nassim Vieira Najjar, diretor da Faculdade de Educação da UFF, um pesquisador experiente que indicará em sua palestra a importância da gestão para a consolidação de uma escola cidadã, democrática que tem no compromisso com

a qualidade social um dos seus principais desafios.

Pensando em diálogos que possam garantir discussões sobre relações étnico-raciais, foi convidado para o 16º SIMPEQUI o professor e pesquisador Leonardo Maciel Moreira, da UFRJ-Macaé. O objetivo da interlocução será a autopercepção do professor perante a realidade multicultural, a permanência dos estudantes das diferentes etnias na licenciatura em química e a necessidade de difusão de um currículo de química intercultural.

Promover a discussão sobre a formação inicial dos professores de química tem sido um dos objetivos dos SIMPEQUIs anteriores. E para esta edição, de 2018, tal discussão não poderia ficar de fora. Diante do cenário de mudanças que abarcam a formação inicial dos professores, podemos destacar as alterações do programa de fomento à educação básica da Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior (CAPES), o Programa Institucional de Bolsa de Iniciação à Docência (Pibid), e a criação do Programa de Residência Pedagógica.

Para discutir, em palestra, a "Parceria escola universidade na construção de práticas educativas



Jorge Najjar em apresentação no Programa ASPI-UFF Em Ação



Entrevista com Leonardo Moreira

no ensino de Química", foi convidada a professora Maura Ventura Chinelli (UFF), que proporá a reflexão e o debate sobre o Pibid como política pública que instituiu um modo bem-sucedido para a formação inicial e continuada de professores, em especial de professores de química, com a produção de inovações educacionais capazes de trazer efetividade e qualidade para a educação básica.

Como o ensino de química na educação básica vem sendo objeto de reflexões tanto da comunidade de pesquisa em Ensino de Ciências, quanto dos professores em exercício, a organização científica do evento convidou

RQI - 2° trimestre 2018 5

^{*} BRASIL. Ministério da Educação. *Base Nacional Comum Curricular*. Brasília, DF: MEC, 2018. Disponível em: http://basenacionalcomum.mec.gov.br/wp-content/uploads/2018/04/BNCC_EnsinoMedio_embaixa_site.pdf. Acesso em: 08 mai. 2018.

o professor José Guilherme da Silva Lopes (UFJF). A palestra do prof. José Guilherme, dará continuidade sobre as discussões em formação dos professores, uma vez que discutirá as perspectivas atuais para o ensino de química nos níveis médio e fundamental, com destaque para os impactos e demandas da formação acadêmico-profissional e continuada de professores de Química.

No 16º SIMPEQUI haverá um espaço para que as contribuições, desafios e perspectivas dos programas de pós-graduação profissionais da área de ensino de química/ciências possam ser discutidos. O pesquisador do IFRJ, professor Marcus Vinicius Pereira trará, em sua palestra "Mestrados profissionais em ensino de ciências como propostas para desenvolvimento profissional docente", como ocorre a relação entre avaliação dos programas de pós-graduação junto à CAPES e o conhecimento produzido na academia e na escola básica.

O 16º SIMPEQUI apresenta uma novidade em relação aos eventos anteriores: a realização da *Exposição de Produtos para o Ensino de Química – EXPEQ*. Este espaço foi idealizado para ser uma atividade vinculada ao SIMPEQUI, cujo objetivo é a divulgação dos mais variados materiais didáticos destinados ao Ensino de Química. A EXPEQ foi criada para que professores e pesquisadores divulguem e socializem suas produções, permitindo que não sejam utilizadas apenas nos espaços das salas de aula, ou se materializem apenas para cumprimentos protocolares dos mestrados profissionais na área de



ensino, on de a el aboração de produtos educacionais é uma exigência (as normas podem ser lidas no link trabalhos no endereço eletrônico do evento). E como uma forma de incentivo, neste ano de 2018, os autores do material avaliado como melhor produto

didático receberão também um prêmio em dinheiro (R\$ 1.000,00).

Por fim, mas não menos importante, cabe destacar que os participantes do 16º SIMPEQUI poderão optar pela inscrição em dois minicursos. Um deles, Dispositivos Móveis no Ensino de Química, sob a responsabilidade da professora Maria das Graças Cleophas (UNILA), possibilitará interlocuções sobre a polêmica de se utilizar, ou não, tais tecnologias no contexto da sala de aula, além das possíveis integrações metodológicas no ensino das ciências, em particular da química. O segundo minicurso, Metodologia da Pesquisa no Ensino de Química, a ser ministrado pela professora Gisele Capaci Rodrigues (UNIGRANRIO), tem por objetivo abordar os principais assuntos referentes à construção de textos acadêmicos, que sempre deixam dúvidas, tanto para os iniciantes, como para os veteranos na área de ensino de química.

A realização do 16º SIMPEQUI possibilitará a que ABQ cumpra sua missão no que diz respeito a apoiar, junto à sociedade em geral, discussões e ações estratégicas para a difusão da Química e áreas afins, nos campos da ciência, da educação, da tecnologia e da inovação.

Será possível a interação e troca de experiências para os graduandos, professores e pesquisadores que atuam no ensino de química, e áreas afins, conhecer e aprofundar as discussões acerca do tema central do evento e outros correlatos.

Como foi dito, é muita responsabilidade para um jovem de apenas 15 anos... Mas esperamos que nosso SIMPEQUI, com o passar dos anos, atinja sua maturidade, e que nesse seu 16º aniversário oportunize, mais uma vez, um espaço para diálogos, como uma excelente oportunidade para a consolidação de seus muitos compromissos, com as inovações educacionais no Brasil.

O simpósio será realizado no Centro de Eventos do Hotel Novo Mundo, localizado na Praia do Flamengo, zona sul do Rio de Janeiro. Maiores informações podem ser acessadas no endereço eletrônico http://www.abq.org.br/simpequi/.



Associação Brasileira de Química

Regionais da ABQ divulgando a Química no Brasil

ABQ PIAUÍ

I Encontro Piauiense de Química e Inovação

ABQ GOIÁS

10° Encontro Nacional de Tecnologia Química

ABQ SÃO PAULO

Olimpíada de Química do Estado de São Paulo (OQSP)

Eventos 2018



Agosto - Rio de Janeiro, RJ

16°
Simpósio Brasileiro
de Educação Química
SIMPEQUI
www.abq.org.br/simpequi





Aconteceu no Piauí



Durcilene Alves da Silva^{1,2}, Josy Anteveli Osajima^{1,3}, Edson Cavalcanti da Silva Filho^{1,4}
¹ Professor da Universidade Federal do Piauí, ² Presidente do IEPQUIN, ³ Tesoureira da ABQ-PI, ⁴ Presidente da ABQ-PI

A Associação Brasileira de Química, Regional Piauí, organizou e promoveu o I Encontro Piauiense de Química e Inovação, na Cidade de Parnaíba-PI, no período de 23 a 25 de maio de 2018, contando com a participação da UFPI (Universidade Federal do Piauí), IFPI (Instituto Federal do Piauí), IFCE (Instituto Federal do Ceará), UESPI (Universidade Estadual do Piauí), UNIVASF (Universidade Federal do Vale do São Francisco), UFMA (Universidade Federal do Maranhão), UNINASSAU (Universidade Mauricio de Nassau), UFC (Universidade Federal do Ceará), UNIARA (Universidade de Araraquara) e apoio dos Programas de Pós-Graduação em Química (Teresina-PI), Biotecnologia (Parnaíba-PI) e Ciência e Engenharia dos Materiais (Teresina-PI).

Para o primeiro Encontro Piauiense de Química e Inovação foi escolhida a cidade de Parnaíba, por não ser a Capital do Estado, com o objetivo de difundir as ciências e integrar os diversos cursos de química existentes no Piauí, e ainda pelo fato de possuir um curso presencial de química.

Além do curso situado na cidade de Parnaíba, há ainda cursos em Teresina, Picos, Paulistana, Cocal e São Raimundo Nonato, além de diversos polos através do EAD (Ensino a distância).

O evento além da química agregou-se à inovação, pois não há como se falar em química e desenvolvimento sem estar vinculado a inovação, e esta ainda é uma área carente e que precisa avançar dentro desta ciência.



Universidade Federal do Piauí Campus de Parnaíba

No dia 23 de maio, durante o pré-evento foram oferecidos 7 (sete) diferentes minicursos, de 4 (quatro) horas cada, com os seguintes temas e ministrantes: Minicurso 1: Técnica de cromatografia gasosa e aplicações (Prof. Dr. João Sammy Nery de Souza - UFPI); Minicurso 2: Técnica de docking molecular e aplicações (Prof. Dr. Bartholomeu Araújo Barros Filho - IFPI e Profa. Dra. Buana Almeida Carvalho - IFPI); Minicurso 3: Técnica instrumentais de caracterização (Profa. Dra. Márcia Valéria Silva Lima - IFPI); Minicurso 4: Quimiometria e suas aplicações (Prof. Dr. Francisco Artur e Silva Filho -UESPI); Minicurso 5: Pesquisa qualitativa em educação aplicada ao ensino de química (Profa. Dra. Clara Virginia Vieira Carvalho Oliveira Marques – UFMA); Minicurso 6: Técnica de cromatografia líquida e aplicações (Profa. Dra. Leiz Veras – UNINASSAU); Minicurso 7: Química aplicada a alimentos (Prof. Dr. Pedro Sanches dos Reis – UFPI), com um total de 140 participantes.

Nos dias 24 e 25 ocorreram as palestras e apresentação dos trabalhos.

No dia 24, às 8:30 horas ocorreu a abertura oficial do evento, estando presente à mesa (foto abaixo da esquerda para a direita), o Diretor do Campus do IFPI-Campus Parnaíba, Prof. Dr. Luis Fernando dos Santos Souza, a Presidente do evento e professora da UFPI-Campus Parnaíba, Profa. Dra. Durcilene Alves da Silva, e o Presidente da ABQ-PI e professor da UFPI-Campus Teresina, Prof. Dr. Edson Cavalcanti da Silva Filho.





Minicurso Técnica de docking molecular e aplicações

A palestra de abertura foi proferida pela Profa. Dra. Tecia Vieira Carvalho, do Núcleo de Estudos e Pesquisa do Norte e Nordeste (NEPEN), intitulada **Inovação a Serviço do Desenvolvimento do Estado**. Além desta, ocorreram mais 10 palestras e uma mesa redonda.

As outras palestras foram:

- → **Uso de polissacarídeos em alimentos**, proferida pela Profa. Dra. Daniele Maria Alves Teixeira, do Instituto Federal do Ceará, Campus de Sobral;
- → Química de produtos naturais de micro e macro



Tecia Vieira Carvalho na palestra de abertura

RQI - 2º trimestre 2018 9

organismos, proferida pelo Prof. Dr. Everton Leandro de França, da Universidade Federal do Vale do São Francisco, Campus de São Raimundo Nonato;

- → Materiais híbridos nanoestruturados a base de biopolímeros e sólidos inorgânicos, proferida pela Profa. Dra. Ana Clécia de Santos Alcântara, da Universidade Federal do Maranhão, Campus São Luiz;
- → Pesquisa em ensino de química: características e tendências, proferida pela Profa. Dra. Luciana Nobre de Abreu Ferreira, da Universidade Federal do Piauí, Campus Teresina;
- → Desenvolvimento de nanossistemas para encapsulamento de fármacos a partir de derivados de polissacarídeos, proferida pela Profa. Dra. Regina Célia Monteiro de Paula, da Universidade Federal do Ceará, Campus Fortaleza;
- → Nova lei da biodiversidade brasileira e o Sisgen (Sistema Nacional de Gestão do Patrimônio Genético e do conhecimento Tradicional Associado), proferida pela Profa. Dra. Ivanilza Andrade, da Universidade Federal do Piauí, Campus Parnaíba;
- → Desenvolvimento de nanomaterias híbridos aplicados à nanomedicina, proferida pelo Prof. Dr. Welter Catanhede da Silva, da Universidade Federal do Piauí, Campus Teresina;
- → Química analítica e análise química como ferramenta de desenvolvimento e inovação, proferida pelo Prof. Dr. Edvan Carvalho Vieira, da Universidade Federal do Piauí, Campus Teresina:
- → Fadex como parceira na pesquisa ensino extensão e inovação, proferida pelo Prof. Dr. Livio Cesar Cunha Nunes, da Universidade Federal do Piauí, Campus Teresina;
- → Pesquisa extensão e inovação em biotecnologia, proferida pelo Prof. Dr. Hernane da Silva Barud, da Universidade de Araraguara, Campus Araraguara.

E a mesa redonda:

→ O ensino de química e inovação no Estado do Piauí, com a participação dos professores: Dr. Jerino Queiroz Ferreira da Universidade Federal do Piauí, Campus Teresina; Dra. Carla Virginia Vieira Carvalho Oliveira Marques, da Universidade Federal do Maranhão, Campus



São Luiz; e Dra. Fátima Cardoso Soares, do Instituto Federal do Piauí, Campus Parnaíba (foto acima, da esquerda para a direita).

Além das palestras, minicursos e mesa redonda, o evento contou ainda com a apresentação de 65 trabalhos apresentados nas formas de banner (50) e oral (15), e contou com a participação de mais de 120 participantes.

Há algum tempo já vinha sendo discutido nas reuniões da Associação Brasileira de Química, Regional Piauí, a necessidade de um evento estadual como forma de interação entre os diversos grupos, vinculados aos diferentes cursos de química existentes no estado do Piauí, e o presidente da ABQ-PI deixou isso claro durante a abertura do evento, e que toda a comissão do evento estava de parabéns pelo sucesso do evento mostrado pelos números, e que o evento já iniciava com um excelente público atingido.

Na solenidade de encerramento ocorreu a premiação dos melhores trabalhos apresentados na forma oral e na forma de banner, como um incentivo aos discentes a continuarem participando deste e de outros eventos da Associação Brasileira de Química da Regional Piauí, assim como dos eventos da ABQ em nível nacional.

Os trabalhos premiados na forma de banner foram:

→ 1º LUGAR: AVALIAÇÃO DO POTENCIAL CITOTÓXICO DE FRAÇÕES ALCOÓLICAS E HEXÂNICAS DE MONTRICHARDIA LINIFERA (ARRUDA) SCHOTT

(ARACEAE) E ANÁLISE FÍSICO-QUÍMICA E MICROBIOLÓGICA DA ÁGUA DOS PONTOS DE COLETA DO DELTA DO PARNAÍBA de autoria de Juliana Isis Araújo Pereira, Fernanda Íris Araújo Pereira, Ayslan Batista Barros, José Delano B. Marinho Filho, Leiz Maria Costa Véras, Emanuel Carvalho Silva Júnior, Ana Jérsia Araújo.

→ 2º LUGAR: SELEÇÃO DE MARCADORES MOLECULARES INTER SIMPLE SEQUENCE REPEAT(ISSR) PARA ANÁLISE DE VARIABILIDADE GENÉTICA EM CULTIVARES DE Malpighia emarginata DC. de autoria de Abrahão Lincoln Alves Cunha; Juelina Oliveira dos Santos; Cleiton Barroso Bittencourt; Renata Brito Reis; Maria Vicentina Santos; Ivanilza Moreira de Andrade.

→ 3º LUGAR: FILME A BASE DE POLÍMEROS NATURAL: INCORPORAÇÃO DE AGENTE ANTIMICROBIANO de autoria de Francisco Edmar Moreira de Lima Neto, Manoel da Paixão Brito, Eryka Oliveira de Andrades, João Marcos Antônio Rodrigues da Costa, Nara Calaça Ribeiro, Durcilene Alves da Silva.

Os trabalhos premiados na forma oral foram:

→ 1º LUGAR: SÍNTESE VERDE DE NANOPARTÍCULAS DE PRATA COM EXTRATO AQUOSO DE TERMINALIA FAGIFOLIA MART. E AVALIAÇÃO DA ATIVIDADE ANTIBACTERIANA de autoria de Alyne Rodrigues de Araújo, Ayslan Batista Barros, Kerolayne de Melo Nogueira, Taiane Maria de Oliveira; Paulo Humberto M. Nunes, Carla Eiras, Durcilene Alves da Silva, Peter Eaton, José Roberto de Souza de Almeida Leite.

→ 2º LUGAR: UTILIZAÇÃO DA PALIGORSKYTA COM PROPRIEDADES FOTOCATALITICAS E BACTERICIDAS COMO ADITIVO PARA A CONSTRUÇÃO CIVIL de autoria de Thalena Lima, Maxwell Sousa Rodrigues, Rodrigo Prado Feitosa, Lívia Anteveli Osajima, Maria Lara Cristina Santos de Macedo, Livio Cesar Cunha Nunes, Marcelo

Barbosa Furtini.

→ 3º LUGAR: POTENCIAL DA CELULOSE FUNCIONALIZADA COM ÁCIDO CARBOXÍLICO COMO ADSORVENTE ALTERNATIVO PARA A REMOÇÃO DO CORANTE AZUL DE METILENO EM SOLUÇÃO AQUOSA de autoria de Lucinaldo S. Silva, Cássio C. Lima, Roosevelt D. S. Bezerra, Francisco J. L. Ferreira, Mateus S. Silva, Josy A. Osajima, Edson C. Silva Filho.

Os participantes foram convidados a participarem dos demais eventos da Associação, destacando-se o próximo CBQ que ocorrerá em São Luiz, em novembro de 2018, e o ENTEQUI, que ocorrerá em Teresina, em abril de 2019.

Ocorreu ainda durante o encerramento do evento o agradecimento aos apoios recebidos para o I EPQUIN: CAPES (Coordenação de Apoio ao Pessoal Docente de Ensino Superior); FAPEPI (Fundação de Amparo da Pesquisa do Estado do Piauí), UFPI (Universidade Federal do Piauí); IFPI (Instituto Federal do Piauí); ABQ-PI (Associação Brasileira de Química – Regional Piauí), Programas de Pós-Graduação em Biotecnologia, em Química e em Ciência e Engenharia dos Materiais, todos da UFPI, e a toda equipe de apoio do IEPQUIN.

A comissão organizadora do evento foi formada pelos professores: Durcilene Alves da Silva (UFPI-Parnaíba), Edson Cavalcanti da Silva Filho (UFPI e ABQ-PI), Bartholomeu Araújo Barros Filho (IFPI-Parnaíba) e Marcia Valéria Silva Lima (IFPI-Paraníba), e a comissão científica formada pelos professores: Alessandra Braga Ribeiro (UFPI-Teresina), Carla Eiras (UFPI-Teresina); Jean Carlos Antunes Catapreta (UFPI-Teresina e ABQ), Josy Anteveli Osajima (UFPI-Teresina e ABQ-PI) e Haroldo Luís Sousa Neres (IFPI-Parnaíba).



Encerramento do evento

Aconteceu em Goiás

Marcos dos Reis Vargas e Sérgio Botelho de Oliveira Instituto Federal de Goiás e Diretores da ABQ - Regional Goiás

Entre os dias 4 e 6 de setembro de 2017 ocorreu o 10º Encontro Nacional de Tecnologia Química (10º ENTEQUI) sob a realização da Associação Brasileira de Química e sua Regional Goiás, com o patrocínio da CAPES, FAPEG e PUC-Goiás. O evento foi realizado no Auditório 3 da Pontifícia Universidade Católica de Goiás, Setor Universitário, Goiânia, Goiás. As comissões organizadora e científica contaram com profissionais representantes da Associação Brasileira de Química (ABQ), da Associação Brasileira de Química Seção Regional Goiás (ABQ-GO), do Instituto Federal de Goiás (IFG), da Universidade Estadual de Goiás (UEG), da Universidade Federal de Goiás (UFG), da Universidade de Brasília (UnB), da Universidade Federal do Rio de Janeiro (UFRJ), do Instituto Federal Goiano (IFGoiano), da Pontifícia Universidade Católica de Goiás (PUC-Goiás) e da Universidade Estadual do Ceará (UECE).

O início do Encontro ocorreu no dia 4 com o minicurso pré-evento: "Química de Produtos Naturais", ministrado pelo Prof. Dr. Paulo Sérgio Pereira (IFGoiano - Campus Rio Verde).

A abertura oficial do evento ocorreu à noite,

sendo a mesa solene composta (na foto ao lado, da esquerda para direita) pelo palestrante da noite, Sr. Jefferson Dias de Araújo, da Laticínios Bela Vista (Piracanjuba); o presidente da ABQ-GO, Prof. Dr. Marcos dos Reis Vargas; o presidente nacional da ABQ, Eng. Químico Robério

Fernandes Alves de Oliveira; a Diretora da Escola de Ciências Exatas e da Computação (ECEC) da PUC-Goiás, Mírian Sandra Rosa Gusmão; o presidente do evento, Prof. Dr. Estevão Freire, da EQ-UFRJ. Na palestra de abertura, o Sr. Jefferson Dias de Araújo (foto abaixo), gestor da área de meio ambiente da Piracanjuba, abordou em sua palestra o tema do evento: "*Tecnologia Química e Recursos Naturais*".







Ambiental", que contou com a participação do Sr. Cesar Fonseca, da IGMetro; do Prof. Dr. Marcos Roberto Teixeira Halasz, da FAACS-ES e do Eng. Químico Robério Fernandes Alves de Oliveira, da ABQ, sob a moderação do Prof. Dr. Sérgio Botelho de Oliveira, do IFG.

Durante os dia 5 e 6 também foram apresentadas duas sessões de pôsteres com 36 trabalhos (um trabalho na foto ao lado). Estes foram apresentados no formato de pôsteres durante o 10º ENTEQUI, e duas sessões de comunicações orais com 8 trabalhos apresentados no total. Além disso, o evento contou 116 participantes de várias regiões do Brasil.

Nos dias 5 e 6 de setembro, pela manhã e tarde, foram realizadas cinco palestras:

- "Pesquisa e Desenvolvimento Tecnológico", ministrada pelo Dr. Wagner da Silva Lima, da Votorantim;
- "Desenvolvimento de Tecnologias Visando a Sustentabilidade" ministrada pela Profa. Dra. Sarah Silva Brum, da UnB;
- "Recursos Naturais no Contexto da Bioeconomia", ministrada pelo Prof. Dr. Estevão Freire, da EQ-UFRJ;
- "Desenvolvimento Instrumental para Aplicações Bioanalíticas em Microssistemas", ministrada pelo Prof. Dr. Wendell Karlos Tomazelli Coltro, da UFG;
- "Reaproveitamento de Resíduos Agroindustriais para Produção de Materiais Poliméricos e Biocombustíveis", ministrada pelo Prof. Dr. Daniel Pasquini, da UFU.

Nos mesmos dias, também foram realizadas duas mesas redondas:

- ➤ "Como Explorar os Recursos Naturais de Forma Sustentável", que contou com a participação do Esp. Celso Flávio da Silva, da empresa Vitalife; Prof. Dr. Estevão Freire, da EQ-UFRJ, e Prof. Dr. Wilson Mozena Leandro, da UFG, sob a moderação do Eng. Químico Robério Fernandes Alves de Oliveira, da ABQ;
- "Gestão de Qualidade e a Sustentabilidade

* * *

Por fim, durante o ano de 2017, sob a organização do Prof. Me. Renato Cândido da Silva (UFG) em parceria com a Associação Brasileira de Química - Regional Goiás, foram realizadas diversas atividades da Olimpíada de Química:

- ➤ Organização e Aplicação da Seletiva em Goiás da International Chemistry Olympiad, IChO, realizada na Tailândia;
- ➤ Realização, elaboração e aplicação da Prova da Olimpíada Brasileira de Química Regional Goiás;
- ➤ Realização e aplicação da Olimpíada Brasileira de Química Ensino Médio Fase Nacional;
- Participação na comissão de revisão da Olimpíada Brasileira de Química 2017 e Olimpíada Norte - Nordeste 2017;
- Organização e aplicação da prova da Olimpíada Brasileira de Química Júnior;
- Organização e aplicação da prova da Olimpíada
 Nacional de Ciências no estado de Goiás;
- ➤ Participação na elaboração da prova da Maratona de Química, evento do Congresso Brasileiro de Química 2017.

Atividades da ABQ-SP

Diretoria da Regional São Paulo

A Diretoria da ABQ-SP prosseguiu priorizando a realização da Olimpíada de Química do Estado de São Paulo (OQSP) para o ensino médio nos anos de 2017 e 2018, mas também desenvolveu outras atividades, incluídas no resumo que se segue.

Olimpíadas de Química SP-2017

A ABQ-SP desenvolveu, em 2017, a OQSP-2017, lançada em setembro de 2016 com o tema: "Química nas Olimpíadas" (http://allchemy.iq.usp.br/oqsp/oqsp-2017.html) enviando perto de 10 mil cartazes e igual número de folders a três mil escolas públicas e privadas, paralelamente à divulgação por e-mail e internet. A Comissão Julgadora das Redações, composta por cerca 60 professores doutores de universidades paulistas, trabalhou durante o recesso letivo do início do ano de 2017 selecionando as 100 melhores redações e a ABQ-SP convocou uma centena de autores para a Fase Final da OQSP. Também foram convocados os 40 "treineiros" do vestibular da FUVEST 2017 em Ciências Exatas e Ciências Biológicas, 8 alunos de escolas paulistas que obtiverem melhor classificação no Torneio Virtual de Química (TVQ), realizado na Universidade Estadual de Campinas (UNICAMP) e 4 alunos melhor classificados na Olimpíada Regional de Química, realizada no campus de Ribeirão Preto da USP.

Na Fase Final, realizada no dia 10/06/2017, os finalistas realizaram a prova escrita após assistirem à demonstração de experimentos que subsidiaram o conteúdo das questões. A correção das provas se deu imediatamente, enquanto os alunos e acompanhantes participavam de almoço, visitavam laboratórios e assistiam ao Show teatral "Química em Ação" apresentado pelo Grupo de estudantes de graduação do IQ-USP.



A Cerimônia de Encerramento e Premiação da OQSP-2017 (http://allchemy.iq.usp.br/oqsp/oqsp-2017vencedores.html) deu-se ao final do dia e contou com a participação de representantes de algumas das Empresas copatrocinadoras, ABICLOR, BASF, ASSOCIQUIM/SINCOQUIM, CLARIANT, DOW BRASIL, CONSELHO REGIONAL DE QUÍMICA-IV REGIÃO, UNIVERSIDADE PRESBITERIANA MACKENZIE, e das instituições apoiadoras, INSTITUTO DE QUÍMICA-USP, FUVEST e ACADEMIA DE CIÊNCIAS DO ESTADO DE SÃO PAULO. Os 6 alunos que mais se destacaram na OQSP-2017 foram agraciados com os prêmios, com destaque para o prêmio Prof. Geraldo Vicentini, conferido pelo IQ-USP, no valor de R\$ 1.000,00 (mil reais), para o vencedor da segunda série, Vinícius Figueira Armelin, e o Prêmio Talentos, para o vencedor de terceira série, Matheus Takayasu, no valor de R\$ 3.000,00 (três mil reais). Os 50 melhores alunos classificados na OQSP-2017 foram inscritos na Olimpíada Brasileira de Química, na qual alguns deles se destacaram, conquistando medalhas. Uma das participantes inscritas por São Paulo alcançou medalha de prata na IChO e ouro na OIAQ. Aliás, os estudantes paulistas selecionados pela OQSP obtêm

bons resultados todos os anos na Olimpíada Brasileira de Química e, a partir de 2009 passaram a conquistar quase todos os anos medalhas nas olimpíadas internacionais de química. Assim, na Olimpíada Internacional de Química (IChO) receberam medalhas de prata em 2012, 2015 e duas em 2016, receberam também medalhas de bronze sendo duas em 2010 e 2014 e uma em 2011. Na Olimpíada Ibero-americana de Química (OIAQ) foram recebidas duas medalhas de ouro em 2010, uma em 2011, 2012 e 2015, e uma medalha de prata em 2011 e duas em 2014 além de uma medalha de bronze em 2009.

Olympiads — 20 Years of the São Paulo Model where Authors of the Best Thematic Essays Qualify for a Final Examination Based on Live Chemistry Demonstrations" dos autores Ivano G. R. Gutz, Omar A. El Seoud, Mauro Bertotti, Lúcio Angnes, Márcia L. A. Temperini, Fernando S. Lopes and Jairo J. Pedrotti, que foi apresentado oralmente por Ivano Gutz, coordenador da OQSP. A Coordenação da OQSP conseguiu duas inscrições gratuitas para dois medalhistas de ouro da OQSP participararem do Congresso completo e estes frequentaram o evento.

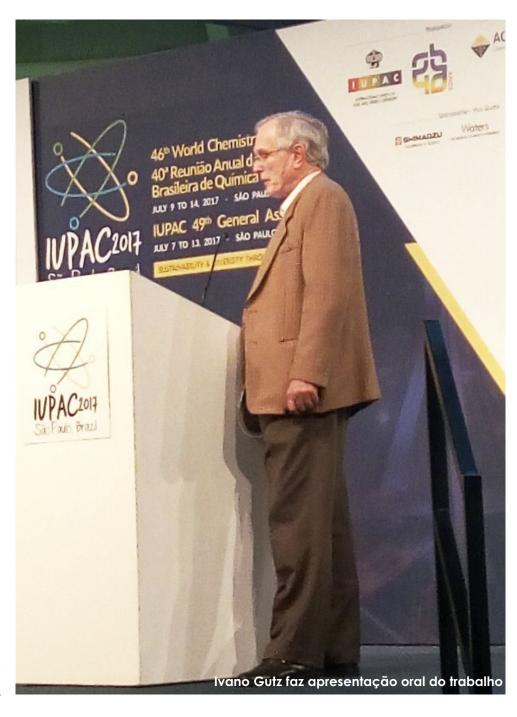
Escola Olímpica de Química (EOQ)

A ABQ-SP apoiou, pelo sexto ano consecutivo, a Escola Olímpica de Química (EOQ), um curso intensivo de preparação para a OBQ, organizado por antigos participantes de olimpíadas de química, com duração de 6 dias, realizado no IQ-USP na primeira semana d e iulho (http://www.eoquimica.com/p/gal eria/). Em 2017, Amanda Farhat, aluna do Instituto de Química-USP, assumiu a coordenação, com supervisão dos coordenadores de anos anteriores. O objetivo do curso é aprofundar os conhecimentos em química dos vencedores da OQSP e outros alunos de ensino médio.

São abordados temas e matérias consideradas importantes pelo programa Nacional e Internacional das Olimpíadas de Ouímica.

Participação no Congresso da IUPAC

Em julho de 2017 a ABQ-SP participou do 46th World Chemistry Congress com o trabalho "Chemistry



Entrega de Medalhas das Olimpíadas no ENAIQ

A exemplo do que ocorre desde 2004, os estudantes que mais se destacaram nas olimpíadas de química, especialmente nas internacionais, foram homenageados pela ABIQUIM (Associação Brasileira das Indústrias Químicas) durante o Encontro Nacional da Indústria Química (ENAIQ), realizado em dezembro de 2017 na cidade de São Paulo.

O Presidente da República e alguns ministros de estado entregaram medalhas aos vencedores das Olimpíadas de Química durante o evento.

Olimpíadas de Química SP-2018

A ABQ-SP lançou setembro de 2017 a Olimpíada de Química OQSP 2018, com o tema: "BIORREFINARIAS: Conversão de Biomassa em Produtos Químicos". Foram enviados perto de 10 mil cartazes e igual número de folders a 3 mil escolas públicas e privadas, paralelamente à divulgação por e-mail e internet.

A Comissão Julgadora das Redações, composta por cerca 60 professores doutores de universidades paulistas, trabalhou durante o recesso letivo do início do ano de 2018 selecionando as 100 melhores redações e a



ABQ-SP convocou uma centena de autores para a Fase Final da OQSP, que acontecerá no dia 09/06/2018, no Instituto de Química-USP. Também foram convocados os 40 "treineiros" do vestibular da FUVEST 2018 em Ciências Exatas e Ciências Biológicas, 8 alunos de escolas paulistas que obtiverem melhor classificação no Torneio Virtual de Química (TVQ), realizado na Universidade Estadual de Campinas (UNICAMP) e 4 alunos melhor classificados na Olimpíada Regional de Química, realizada no campus de Ribeirão Preto da USP.

Todas as informações e a lista dos alunos convocados para a Fase Final estão na AllChemy: http://allchemy.iq.usp.br/oqsp/oqsp-2018.html.



255th ACS National Meeting & Exposition

Luis Carlos de Abreu Gomes

Professor do CPII e Diretor Financeiro da ABQ

Entre os dias 18 e 22 de março, no Centro de Convenções da cidade de Nova Orleans, Louisiana, Estados Unidos da América, ocorreu o 255th ACS National Meeting & Exposition.

No evento estavam presentes representantes de diversos países, como França, Alemanha, Japão, China, Índia, Argentina, Portugal, Espanha, Coreia do Sul, Itália e México. Também estiveram presentes representantes de diversos estados americanos e no caso do Brasil haviam representantes da USP, da UNICAMP e da UFRJ, entre outras instituições.

O congresso debateu sobre alimentos, energia e água. Foram exposições, palestras, cursos, mesas redondas, para se debater e elaborar metas visando as gerações futuras.

A Associação Brasileira de Química (ABQ), se fez presente no evento, representada por seu Diretor Financeiro, Prof. MSc. Luis Carlos de Abreu Gomes. Também participou do evento sua filha Caroline Moreira Gomes. Durante os anos de 2016 e 2017, ela estagiou na Escola Brasileira de Química Verde (EBQV), sob orientação da Dra. Rafaela Nascimento e do Prof. Dr. Peter Rudolf Seidl, *Advisor* do *Student Chapter* da ACS na UFRJ. O *Student Chapter* da UFRJ visa aproximar a temática da Química Verde das instituições de ensino médio e superior, além das indústrias químicas do Estado do Rio de Janeiro, bem como proporcionar aos estudantes de graduação e pós-graduação, a participação em eventos da ACS e a promoção de eventos na UFRJ.

O Prof. Peter foi o grande responsável pela criação do *Student Chapter* da UFRJ. Ao longo do segundo semestre de 2017 fez diversos contatos com a ACS, para a criação do mesmo na UFRJ, através da EBQV. O *Student Chapter* é um núcleo da ACS, que no caso da UFRJ, cuida dos eventos de Química Verde e já existe em vários países do mundo. No Brasil, o primeiro *Chapter* criado foi na

UNICAMP. O *Student Chapter* da UFRJ, foi criado oficialmente em 2018, e a ABQ é representada entre seus membros, além do Prof. Peter, pelo Diretor Regional Sudeste, Prof. MSc. Frederico Anderson Passos Schoene, e pelo Prof. Dr. Estevão Freire, hoje *Co-Advisor* do *Student Chapter* da UFRJ.

A ida da jovem Caroline e do Prof. Luis Carlos, seu responsável, no evento da ACS em Nova Orleans, se deu através do *Student Chapter* da UFRJ, e tinha como objetivo a participação nas exposições, principalmente, do estande de Química Verde da ACS, para fazer contatos com outros Chapters e coletar material de divulgação. O salão de exposições do evento, além de diversos estandes da ACS, tinha também estandes de divulgação de material de laboratório, material didático, bibliografia e tecnologia de ponta para instituições de ensino e empresas que utilizam a química.

O evento contou com a participação de mais de mil pessoas que durante 5 dias debateram sobre a preocupação na produção de alimentos e a utilização de energia e água, visando as gerações futuras, refletindo sobre a preservação do meio ambiente e a qualidade de vida. Ao final foi elaborado um relatório sobre a participação pela ACS.



1 (0)

Alberto Luiz Galvão Coimbra



Alberto Luiz Galvão Coimbra nasceu em Botafogo, bairro da zona sul do Rio de Janeiro, em 30 de agosto de 1923. Foi o primeiro filho de Deodato Galvão Coimbra, comerciante, e de Zahra Braga. Desde cedo foi estimulado pela mãe a estudar, aprender inglês, e exercitar a curiosidade intelectual. Cursou o primário no colégio Pitangas, o ginásio no Anglo Americano e o científico nos Colégios Universitário e Andrews. Em 1943, ingressou no curso de Química Industrial da Escola Nacional de Química da Universidade do Brasil (ENQ/UB, atual Escola de Química da Universidade Federal do Rio de Janeiro – EQ/UFRJ), localizada na Praia Vermelha (bairro da zona sul da cidade). Afora as atividades normais de um aluno, Coimbra tinha forte relação com o Diretório Acadêmico da ENQ, da qual foi presidente em 1946. Nesse mesmo ano, aos 23 anos, graduou-se. Trabalhou na Comissão Executiva dos Produtos da Mandioca, onde desenvolveu uma pesquisa de dosagem de álcool produzido a partir da mesma.

Antes de se formar, Coimbra descobrira que queria ser mesmo engenheiro químico. Sonhava projetar reatores e desenvolver processos. Só que o primeiro curso de engenharia química só viria a ser criado na própria ENQ em 1952... Foi seu amigo, Prof. Athos da

Silveira Ramos (1906-2002), que fora professor de Coimbra no curso científico, que propôs a solução: enviálo aos Estados Unidos para fazer pós-graduação, isso em 1947. O grau de Mestre em Engenharia Química pela Universidade de Vanderbilt lhe seria outorgado em 1949. Ao voltar ao Rio de Janeiro, obteve o título de Doutor pela Universidade do Brasil (1953). Coimbra defendia um modelo de ensino baseado em horário integral, com dedicação exclusiva. Isso em uma época em que ser professor universitário no Brasil era tido como uma atividade complementar. As escolas de Engenharia então existentes no país se preocupavam, basicamente, em formar profissionais para o mercado. Contudo, ele gueria investir em pesquisa.

Coimbra fez uma viagem aos Estados Unidos em dezembro de 1960 a convite de seu orientador, professor Frank Tiller (1917-2006), para conhecer diversas universidades americanas. Mais exatamente, Coimbra fazia parte de uma comissão credenciada pela congregação da ENQ/UB. As visitas realizadas às Universidades de Houston, Rice, Califórnia (Los Angeles e Berkeley), Stanford, California Institute of Technology, Minnesota, Michigan e Massachussetes Institute of Technology (MIT) mostraram a Coimbra a importância dos cursos de pós-graduação na capacitação de pesquisadores, professores e profissionais da engenharia, e também o efeito positivo desses cursos na esfera da graduação, atualizando-os.

A disputa entre os Estados Unidos e a então União Soviética pela primazia nos avanços tecnológicos provocara uma reformulação nos cursos de Engenharia norte-americanos. Havia uma nova ênfase na pesquisa científica, uma valorização dos fundamentos da física e da matemática. Esse entendimento influenciou a ideia visionária de Coimbra de estabelecer um curso de pós-



Turma da COPPE 1963. Coimbra assinalado

graduação no Brasil, em uma época em que era rara tal continuidade nos estudos. Era o que faltava ao Brasil, achava Coimbra, já tomado pelo sonho de ver brotar tecnologia na terra do café.

Esta visão foi apresentada no seminário "Reforma Universitária e o Ensino de Engenharia", ocorrido em dezembro de 1961, no Clube de Engenharia do Rio de Janeiro. Em agosto de 1961 vieram ao Rio de Janeiro, sob o patrocínio da Organização dos Estados Americanos (OEA), os diretores das Escolas de Química das Universidades de Houston e Texas. Esses dois diretores, juntamente com professores das Escolas Nacionais de Química e de Engenharia, estabeleceram um plano para um curso conjunto de pós-graduação em engenharia química e mecânica, que foi apresentado ao coordenador brasileiro do Ponto IV, em outubro de 1961. Era evidente que, dentro do quadro de realidade nacional (em particular, a franca expansão do setor industrial) havia a necessidade de suprir a demanda de profissionais qualificados para desenvolver novas técnicas, processos, metodologias e aparelhagens.

A partir de 1962 Coimbra ocupou duas salas do prédio da ENQ/UB para acomodar os primeiros alunos do curso de mestrado em Engenharia Química. Com o aval do Prof. Athos da Silveira Ramos, diretor do recém-fundado Instituto de Química da Universidade do Brasil (IQ/UB, atual Instituto de Química da Universidade Federal do Rio de Janeiro - IQ/UFRJ), dedicado inicialmente à pósgraduação na área da Química, esse mestrado em Engenharia Química se constituiu numa das divisões

desse Instituto. Ela iniciou as suas atividades com cursos intensivos e de curta duração, ministrados em julho e agosto de 1962, versando sobre diversos aspectos da engenharia: camada limite e turbulência, escoamento através de leitos porosos e programação para computadores digitais. As aulas foram ministradas por professores oriundos da Universidade de Houston (dentre eles Frank Tiller), com o apoio da OEA e do CNPq, além do IQ/UB e da Universidade de Houston. Esses cursos serviram como uma espécie de chamada para o início em curto prazo das atividades do curso de pósgraduação. A 4 de março de 1963, tiveram início as atividades formais da pós-graduação em Engenharia Química. Em julho daquele ano, nove alunos em tempo integral e dois em tempo parcial se achavam inscritos. Com poucos recursos, buscava convênios para trazer professores estrangeiros, fossem americanos ou russos, em pleno regime militar.

Em junho de 1965, o projeto de criação da COPPE (Coordenação dos Programas de Pós-Graduação em Engenharia) saía do papel. Já havia sido criada a pósgraduação em Engenharia Mecânica. A Divisão de Engenharia Química do IQ/UB foi, assim, o embrião da própria COPPE. Baseada em três pilares - excelência acadêmica, dedicação exclusiva de professores e alunos e aproximação com a sociedade -, a pós-graduação criada por Coimbra serviu de modelo para outros cursos de pósgraduação criados posteriormente no Brasil, mudando os rumos do sistema universitário no país.

Por conta de sua atuação em prol de uma ciência independente foi convocado pelos militares para depor na Polícia Federal, e foi fichado, com direito a humilhação. Teve seu rosto coberto por capuz e conduzido, coercitivamente ao Quartel do 1º Batalhão da Polícia do Exército, onde funcionava o DOI-Codi. Em 1973, o Conselho Universitário da UFRJ decidiu que Alberto Luiz Galvão Coimbra seria proibido de exercer postos de chefia. Deixou então a Universidade e foi acolhido pelo amigo José Pelúcio Ferreira, então na direção da FINEP (Financiadora de Estudos e Projetos), empresa pública financiadora de ciência e tecnologia. Lá passou dez anos a fastado da vida universitária, período

que considerou "o pior de sua vida". Sua reabilitação aconteceu em 1981, ainda durante o regime militar, quando recebeu o Prêmio Anísio Teixeira, do Ministério da Educação.

De volta à COPPE em 1983, Coimbra assumiu a coordenação do Programa de Engenharia Química, o primeiro da COPPE, no qual permaneceu como pesquisador até se aposentar, em 1993, com as merecidas honrarias, tornando-se Professor Emérito da UFRJ. Em 2015, foi nomeado Pesquisador Emérito do CNPq.

Em 1995, a instituição que Coimbra construiu deu-lhe um dos maiores reconhecimentos que se pode receber em vida: passou a se chamar Instituto Alberto Luiz Galvão Coimbra de Pós-Graduação e Pesquisa de Engenharia. Manteve-se, porém, a sigla que ele escolhera 30 anos antes: COPPE. É hoje o maior centro de ensino e pesquisa da América Latina na área.

Após aposentar-se, residiu durante anos em Teresópolis, em cuja fachada tremulava a bandeira do Botafogo, com sua esposa Marlene, com quem permaneceu casado por 40 anos. Entre os atrasos do Brasil, um dos que mais lamentava era que o ensino em tempo integral implantado na COPPE, que se estendeu para a graduação, não tenha chegado aos ensinos médio e fundamental. "Se pagarem bem à professorinha e colocarem o aluno na escola das 9 às 15 horas, o Brasil dá um salto", garantia. O idealismo não pede aposentadoria.

Coimbra faleceu no Rio de Janeiro, no último dia 16 de maio, aos 94 anos. Em nota oficial, o Reitor da UFRJ, Roberto Leher, lamentou a sua morte: "Lamentamos com profundo pesar a morte do professor Alberto Luiz Galvão Coimbra, um dos intelectuais formadores da Universidade Federal do Rio de Janeiro. Sua visão ampla e estratégica sobre a sociedade e a universidade construiu alicerces importantíssimos para a trajetória de milhares de profissionais. Em quase seis décadas atuando de forma dedicada na COPPE e na UFRJ, Coimbra contribuiu para o desenvolvimento econômico e social do país e iluminou o caminho não apenas de engenheiros, mas também da instituição universitária brasileira".



Foto de recente em homenagem prestada pela UFRJ

REFERÊNCIAS

COSTA, Terezinha. **Memórias do Programa de Pós-Graduação em Engenharia Química da COPPE – Tradição e Vanguarda**. Rio de Janeiro-RJ: *e*-papers, 2004, 170 p.

AFONSO, Júlio Carlos; DOS SANTOS, Nadja Paraense. Instituto de Química da UFRJ – 50 Anos. Rio de Janeiro-RJ: Instituto de Química da UFRJ, 2009, 320 p.

https://www.colegioweb.com.br/biografia-letra-a/alberto-luiz-galvao-coimbra.html, acessado em junho de 2018.

http://www.coppe.ufrj.br/sites/default/files/entrevista_prof_Coimbra.pdf, acessado em junho de 2018.

Notas do Editor

- → Uma entrevista concedida pelo Prof. Alberto Coimbra e m 1 9 8 8 p o d e s e r a c e s s a d a e m http://www.canalciencia.ibict.br/notaveis/livros/alberto _luiz_galvao_coimbra_41.html.
- → No Youtube, existem algumas entrevistas gravadas:
- → https://www.youtube.com/watch?v=kfAHJ3i0VIQ
- → https://www.youtube.com/watch?v=mQDpkqd5VtA
- → https://www.youtube.com/watch?v=DokAuh3KBcc

CADERNO DE QUÍMICA VERDE

Ano 3 - Nº 9 - 2º trimestre de 2018

Neste Caderno

20-3



Depoimento de José Carlos Pinto sobre o Polo de Tecnologia da UFRJ, comercialização de inovações do meio acadêmico e oportunidades para alunos empreendedores.

20-6



VIII Encontro a Escola Brasileira de Química Verde: Valorização de resíduos de processamento de biomassa. 20-2

Editorial

20-8

Startups na Europa, dicas de uma consultora

20-10

Economia circular e desenvolvimento sustentável

20-14

Biocombustíveis, petróleo e transições energéticas

20-16
QUÍMICA VERDE

nas Empresas

Embalagens biodegradáveis Couro de folhas de abacaxi

20-16
QUÍMICA VERDE

Cápsulas

Fibras de carbono verdes Minhocas que degradam plásticos Hidrazina por reações sob fluxo contínuo

RQI - 2° trimestre 2018 20-1

Editorial

Fontes renováveis de energia chegaram para ficar. De solução para o aquecimento global e poluição, a produção em massa de materiais para converter energia solar e eólica e o desenvolvimento de dispositivos para seu controle e distribuição estão gerando novos desafios para empresas de setores tradicionais que pretendem adotar estratégias que lhes garantam um mínimo de competitividade. A indústria automobilística, por exemplo, já descobriu que motores de combustão interna estão com os dias contados e fatores como mobilidade e conectividade, deslocamentos sem condutor, autonomia e capacidade de armazenamento/conversão de eletricidade determinarão as escolhas dos seus futuros consumidores. Como consequência, os principais "players" estão se adaptando aos novos tempos e reinventando seus modelos de negócios.

O que espera os fabricantes que utilizam fontes renováveis de matérias primas? Vale a pena investir em processos químicos para transformar a biomassa em materiais que não são recicláveis ou biodegradáveis? Em produtos gerados por cadeias produtivas que contém substâncias proibidas pelos grandes redes que fornecem bens e serviços ao consumidor? Como se pode assegurar que um processo atenda todos os requisitos de uma sociedade exigente e bem informada?

"A química verde abrange a mesma criatividade e inovação que sempre foram centrais à química tradicional. Sua aplicação é baseada no poder do químico sobre a molécula que é criada e sua trajetória, desde sua síntese, durante seu uso, na sua destruição, e ainda vai além... o além decorre do fato de que não só é possível desenhar uma molécula que possui certas características por determinado tempo, mas também o que vai acontecer (ou como ela se decompõe) após a sua vida útil". Estas palavras, traduzidas do prefácio do livro Green Chemistry, de P.T. Anastas e J.C. Warner publicado em 1998 são, perfeitamente atuais vinte anos depois e asseguram o melhor compromisso entre as exigências econômicas, sociais e ambientais de um processo químico.

Conceitos como processos sustentáveis, produção limpa, economia circular ou "chemical leasing" tem uma superposição com a química verde. Os princípios e métricas da economia circular, por exemplo, introduzem um maior rigor nas especificações dos critérios de análise dos ciclos de vida enquanto as metas do "Leasing" visam aumentar a eficiência no emprego de sustâncias químicas reduzindo os seus riscos e protegendo a saúde humana. Portanto, a exemplo de processos e produtos "limpos" e "sustentáveis", todos estes requisitos são complementares e não conflitantes.

Os objetivos de otimisar a agregação de valor a matérias primas, produtos e resíduos, minimizar o consumo de água e energia e evitar a emissão de poluentes partem da identificação dos obstáculos para uma transição para práticas mais sustentáveis. Estes podem estar sob a forma de barreiras técnicas para a conversão, a presença de certas substâncias ou a geração de impurezas cuja remoção é problemática (particularmente no caso bioprocessos). Mesmo contando com a inteligência artificial, que já demonstrou a sua capacidade de analisar alternativas e propor rotas para as sequências de reações que transformam as moléculas extraídas em produtos comerciais, estas dificuldades são muito difíceis de prever *a priori* e não há como substituir experimentos para validá-las. Ao contrário da informática, inovações em processos químicos dependem de uma infraestrutura de laboratórios e equipamentos e a execução dos trabalhos requer diferentes níveis de formação e experiência. Neste sentido a química verde proporciona uma oportunidade para jovens exercerem a criatividade e demonstrarem sua capacidade de resolver problemas. É digno de nota que, mesmo no atual quadro de dificuldades que o país atravessa, está aumentando o número de pessoas com idades entre 18 e 34 anos no total de empreendedores em fase inicial no país e o grupo de jovens interessados em abrir seu próprio negócio não para de crescer.

As principais empresas do setor químico estão investindo em pesquisas orientadas para o futuro (conhecidas em certos círculos como "blue skies") e monitorando inovações que afetarão radicalmente suas estratégias empresariais. Oferecem uma relativa abertura de seus planos e colaboram com outras empresas, universidades e centros de pesquisa ou mesmo indivíduos que detém as informações ou habilidades que lhe interessam para gerar conhecimentos e compartilhar riscos. Estão começando a explorar novas abordagens e já descobriram o valor de parcerias com parques tecnológicos, espaços de inovação, incubadoras e startups.

A presente edição do Caderno traz o depoimento do Secretário Executivo do Parque de Tecnologia da UFRJ, que analisa a interação entre universidades e empresas e aponta fatores de sucesso para a comercialização de inovações geradas no meio acadêmico. Artigos técnicos abordam: a programação do VIII Encontro da Escola Brasileira de Química Verde, cujo tema central é a recuperação de resíduos da transformação de biomassa em produtos de maior valor agregado e obstáculos à sua inclusão em cadeias produtivas, a situação dos biocombustíveis, o sucesso dos startups e a economia circular. As Cápsulas apresentam novidades em químioterápticos a partir da hidrazina, fibras de carbono mais verdes e as contribuições de minhocas para a degradação de plásticos, enquanto notícias sobre novas aplicações comerciais para rejeitos de fécula de mandioca e de folhas de abacaxi são encontradas em Empresas.

Peter Seidl Editor



Caderno – O que distingue a tecnologia da ciência?

José Carlos – A ciência tem por objetivo a geração de conhecimentos enquanto a tecnologia é dedicada à sua aplicação.

Caderno – Até recentemente se afirmava que a ciência no Brasil tem avançado bastante em relação ao resto do mundo mas que este não era o caso da tecnologia. Ainda é assim?

José Carlos – Infelizmente a resposta é um retumbante sim! Mais do que nunca há uma completa inversão na cadeia de transmissão de conhecimentos. Em lugar de buscar abordagens e soluções para problemas locais procuram-se aplicações para pesquisas de interesse do executor, de difícil adequação aos requisitos de suas aplicações práticas. As recentes medidas governamentais para fortalecer a inovação introduziram novos

entraves de natureza burocrática que em nada estimulam a criatividade e disposição de correr riscos inerentes ao desenvolvimento de tecnologia.

Caderno – Como um professor universitário envolvido em atividades acadêmicas de alto nível se interessou por tecnologia?

José Carlos – Sempre trabalhei em temas próximos aos interesses de empresas. Não vejo como um engenheiro possa desconhecer as preocupações do parque industrial. Elas deveriam estar presentes em todos os programas de engenharia no Brasil e se afastar das mesmas seria a própria negação de sua vocação.

Caderno – Qual é a principal diferença entre o Parque Tecnológico e os laboratórios ou institutos nacionais?

RQI - 2° trimestre 2018 20-3

CADERNO DE QUÍMICA VERDE № 9

José Carlos – O Parque não faz pesquisas. Seu objetivo é promover a inovação criando um ambiente para interações entre o meio acadêmico e empresas (tanto as grandes como a L'Oreal, GE e Ambev ou pequenas e médias como a PAM Membranas e Manserv, quanto startups) que estão dispostas a transformar conhecimentos em novos produtos e serviços. Inclui também laboratórios especializados e uma incubadora de empresas. Suas atividades compreendem: divulgação e marketing, networking, capacitação em desenvolvimento de negócios e a criação de espaços para a convergência de atividades inovadoras.

Caderno – Quais são as principais qualidades que você procura nas empresas que se candidatam ao Parque? Nos projetos que são submetidos à incubadora?

José Carlos – O Parque é da UFRJ sendo essencial que a empresa interaja com a Universidade. O tema é importante mas, se não houver uma disposição para trocar ideias e tomar parte numa cooperação, as negociações não avançam. O segundo critério é o caráter inovador. A trajetória da empresa é analisada para verificar se está disposta a enfrentar desafios ou se está apenas interessada na compra de serviços.

Caderno - Você estimularia um estudante de



engenharia química a se envolver numa startup em lugar de se preparar para um concurso?

José Carlos — Estimularia fortemente! Há um déficit de empreendedorismo em nosso país, especialmente em segmentos como os baseados em processos químicos, nos quais haja necessidade de investimentos em infraestrutura para a realização de provas de conceito. Por outro lado nossos estudantes vibram quando encontram um ambiente inovador que lhes proporciona uma oportunidade de crescimento. Hoje em dia empresas como a Shell e Vallourec estimulam iniciativas semelhantes ao Crowd-Rio que buscam ideias inovadoras para a Telefônica.

Caderno – O acesso à biodiversidade brasileira é um importante fator de competitividade. Existem barreiras significativas no seu aproveitamento? Quais são as medidas que poderão melhorar este quadro?

José Carlos – A nossa biodiversidade é, sem a menor dúvida, um fator da maior importância para a competitividade, especialmente em segmentos como cosméticos, farmacêutica e nutrição.

Entretanto aqui também existem barreiras burocráticas e aspectos pendentes que geram insegurança jurídica nos negócios. É importante buscar a cooperação entre os interessados e dar continuidade às discussões sobre marcos legais.

Caderno – A Escola Brasileira de Química Verde tem incentivado a criação de startups entre universidades e empresas para explorar as oportunidades que surgem em decorrência da necessidade de desenvolver processos químicos sustentáveis. Como o Parque Tecnológico atua neste sentido? Você pode dar alguns exemplos bem sucedidos?

José Carlos - A sustentabilidade é uma questão central para o Parque. O nosso planejamento estratégico é baseado em relatórios de sustentabilidade e as atividades de incubação e pósincubação incutem nas empresas a percepção de que suas estratégias devem ser de longo prazo e visar um mercado global e não apenas tendências



locais ou de momento. Um bom exemplo é a PAM MEMBRANAS Seletivas, a primeira empresa dedicada à fabricação de membranas da América Latina que nasceu como um "spin off" do Laboratório de Processos de Separação por Membranas da COPPE/UFRJ e hoje fabrica membranas para microfiltração. Sua utilização em biorreatores elimina a necessidade de sedimentadores e reduz o tamanho dos digestores. Elimina assim uma das operações e reduz o volume de água e o consumo de energia do processo usando fibras-ocas ou capilares fabricados a partir de polímero de engenharia. Os trabalhos em química verde serão reforçados pela implantação do Instituto SENAI de Inovação em Biossintéticos que oferece soluções em bioquímica e química para produção e processos sustentáveis. Seus segmentos estratégicos são as indústrias de especialidade e bases químicas, biocombustíveis, agroquímica, indústria de bens de consumo, home & personal care, papel e celulose, óleo e gás. O portfólio de serviços do instituto prevê: Biologia sintética, Engenharia de

processos, Transformação química. O instituto está instalado no Centro de Tecnologia da Indústria Química e Têxtil (SENAI CETIQT) e sua mudança está prevista para o próximo ano.

Localizado numa de suas ilhas, o Parque não pode virar as costas para a Baía de Guanabara. Uma das incubadas, a Biotecam, conta com o nosso apoio para uma tarefa ambiciosa, desenvolver tecnologias para recuperar a própria Baía. A empresa desenvolveu um equipamento capaz de introduzir grandes proporções de oxigênio em água rapidamente e de maneira controlada que foi utilizada seletivamente no tratamento de efluentes. Os micro-organismos presentes dependem de oxigênio e, controlando o seu fluxo, o crescimento de certos tipos pode ser promovida em detrimento de outros que são indesejáveis. Imagine se pudermos aproveitar aqueles capazes de degradar o boa parte do lixo depositado na Baía. Vamos poder dispor de processos limpos, eficientes e baratos para tratar: derivados de petróleo, metais pesados e toda sorte de resíduos urbanos e industriais.

RQI - 2° trimestre 2018 20-5

VIII Encontro da Escola Brasileira de Química Verde Valorização de Correntes de Resíduos

O VIII Encontro da Escola Brasileira de Química

Verde reunirá especialistas ao nível da fronteira do conhecimento mundial em segurança, integridade do meio ambiente e sustentabilidade econômica e social de processos químicos. O evento promoverá também a discussão do aproveitamento de resíduos de conversão química e bioquímica de biomassa utilizada em unidades localizadas no país e as oportunidades proporcionadas a empreendedores.

Empresas (inclusive startups) são incentivadas a expor seus planos para novos projetos enquanto profissionais e alunos são convidados a apresentarem resultados de seus trabalhos de pesquisa sobre a análise, transformação química, conversão em matérias primas e materiais, utilização de resíduos de processos e novas aplicações sintéticas de micro-organismos, plantas e animais. O Prêmio Professor Arikerne Sucupira será concedido ao melhor pôster de autoria de aluno de pósgradação.

A biomassa já representa uma parcela considerável da nossa matriz energética e produtos de origem fóssil, como petróleo e gás natural, veem sendo substituídos sucessivamente pelos obtidos de fontes renováveis. Produtos e subprodutos de segmentos que já são altamente competitivos, como a agropecuária e de recursos florestais, representam uma opção promissora para a obtenção de matérias primas e para agregar valor às correntes de resíduos. Em outros segmentos, como na mineração e no agronegócio, busca-se conciliar a necessidade de sua expansão à capacidade de adotar processos químicos alinhados ao desenvolvimento sustentável.

Em escala global a integração de cadeias produtivas tem levado muitas empresas dos setores de energia, química e de materiais a escolherem o país para o

estabelecimento de parcerias de pesquisa, desenvolvimento e inovação em química verde. Empresas que estão dispostos a explorar novas abordagens e colaborar com parques tecnológicos, espaços de inovação, incubadoras e startups para gerar conhecimentos e compartilhar riscos poderão aproveitar as oportunidades para suas atividades de "networking".



LOCAL:

Instituto Senai de Inovação Biomassa

Av. Angelina Tebet, 777, Bairro Santa Luzia

Três Lagoas, Mato Grosso do Sul

E-mail: inovacao@ms.senai.br

Telefone: 0800 707 0745

www.ms.senai.br

DATAS IMPORTANTES:

Inscrições:

30 de maio a 03 de agosto de 2018.

Pagamentos:

01 de julho a 03 de agosto.

Submissão de resumos:

30 de maio a 03 de agosto.

Divulgação dos trabalhos selecionados:

17 de agosto

COMITÊ ORGANIZADOR:

- ► Adilson Beatriz, Instituto de Química, Universidade Federal do Mato Grosso do Sul, MS, Brasil.
- ► Carolina Rayol, IAR Pôle, França.
- ► Estevão Freire, Escola de Química, Universidade Federal do Rio de Janeiro, RJ, Brasil.
- ► Lucia Appel, Instituto Nacional de Tecnologia, Rio de Janeiro, Brasil.
- ► Luana Barros Furtado, Escola de Química, Universidade Federal do Rio de Janeiro, RJ, Brasil.
- ► Marney Pascoli Cereda, Universidade Católica Dom Bosco, MS, Brasil.
- ► Ricardo Soares, Universidade Federal de Uberlandia, MG, Brasil.

COMITÊ CIENTÍFICO:

- Adilson Gonçalves, Universidade Estadual Paulista Júlio de Mesquita Filho, SP, Brasil.
- ► Giulia Paggiola, Consultora independente, Londres, UK.
- ▶ James Clark, Green Chemistry Center of Excellence, Universidade de York, UK.
- ▶ José Vitor Martins, Escola de Química, Universidade Federal do Rio de Janeiro, Brasil.
- ► Maria Teresa Borges, Suzano, Campinas, SP, Brasil.
- ► Rochel Lago, Instituto de Química, Universidade Federal de Minas Gerais; Brasil.
- ➤ Sergio Carvalho de Araujo, Universidade Federal de Mato Grosso do Sul, Brasil.

Programa *

3 DE SETEMBRO DE 2018

Horário	Atividade	Participantes
08:00 / 09:00	Recepção e novas inscrições	
09:00 / 09:30	Abertura	Carolina Andrade, Diretora, Instituto SENAI de Inovação em Biomassa. Peter Rudolf Seidl, Coordenador da Escola Brasileira de Química Verde.
09:30 / 10:10	Conferência Plenária 1	Rafael Luque, Universidade de Córdoba, Espanha.
10:10 / 10:30	Coffee break	
10:30 / 12:30	Mesa redonda: "Aproveitamento de matérias primas e materiais em correntes de resíduos de biomassa".	Coordenador: Luiz Alberto Colnago, Embrapa Instrumentação. Apresentadores: Materiais - José Manoel Marconcini, Embrapa Instrumentação; Processos - Antonio Aprígio da Silva Carvalho, USP; Biologia Sintética - Fernando Araripe, UnB**; Agroenergia**.
12:30 / 13:30	Intervalo para almoço	
13:30 / 14:10	Conferência Plenária 2	Bradley D. Olsen, MIT
14:10 / 16:30	Mesa Redonda: "O papel de agentes financeiros na formulação, acompanhamento e viabilização financeira de projetos com elevado grau de incerteza".	Coordenador: Alessandro Rizato, Solvay Apresentadores: Edgard Rocca, Finep; Felipe Pereira, BNDES; Markus Will, ENRICH; Fundect** e EMBRAPII**.
16:30 / 18:00	Coffee break e Sessão de Pôsteres	

4 DE SETEMBRO DE 2018

Horário	Atividade	Participantes
09:00 / 09:40	Conferencia Plenária 3	Garo Antranikian, Biotechnology Institute, Technical University Hamburg-Harburg
09:40 / 10:30	Apresentações orais	Trabalhos selecionados pela Comissão Científica
10:30 / 11:30	Apresentação oral dos trabalhos de pós-graduação	Trabalhos selecionados pela Comitê Avaliador do Prêmio (Sessão paralela apenas para o Comitê).
10:30 / 12:30	Mesa Redonda: "Desafios e tendências na valorização da biomassa em correntes industriais".	Coordenador: Gonçalo Pereira ;* Apresentadores: Beraca**; Cargill**; Suzano**; Croda**; Startup**
12:30 / 13:30	Intervalo para almoço	
13:30 / 14:10	Conferência Plenária 4	David Constable, Green Chemistry Institute, American Chemical Society, Washington, DC, EUA*
14:10 / 16:30	Mesa Redonda: "Sustentabilidade e Conservação do Meio- Ambiente na Mineração".	Coordenador: Ana Maria Cunha , Centro de Tecnologia Mineral- Cetem. Apresentadores: Claudio Schneider , Cetem; Jussara Miranda , Instituto de Química, UFRJ; IBAMA; Vale**
17:30 / 17:45	Premiação	Entrega do Prêmio Professor Arikerne Sucupira de melhor trabalho apresentado por aluno de pós-graduação
18:00	Encerramento e coquetel	

^{*} a confirmar

RQI - 2° trimestre 2018 20-7

^{**} a ser indicado

Startups na Europa, Dicas de uma Consultora





Jovens empreendedores são a grande novidade do mercado, trazem conhecimentos de fronteira, são abertos ao intercâmbio, desafios e oportunidades, tem vontade de se provar e querem contribuir para a

sociedade. Para startups encontrar uma atitude de "yes we can" ("sim, podemos") tem valor inestimável no mundo da inovação. Entretanto, possuindo características-chave para serem inovadores, aos jovens empreendedores falta naturalmente uma experiência em outras áreas que são necessárias para atuar em um mundo de negócios e de regras que não se desenvolvem tão depressa quanto seus ideais.

Estabelecer e gerenciar uma empresa, mesmo pequena, requer experiência. Por exemplo, cada país europeu, além de pertencer ÈU, tem suas próprias regras, cargas tributárias e prazos para atender a burocracia. Estas diferenças são ainda mais marcadas de continente em continente, apesar dos sucessos obtidos lentamente pelos movimentos de harmonização das normativas internacionais. Um fundador precisa entender essas dinâmicas e também as características dos mercados de interesse da empresa e ainda dominar áreas como contabilidade, vendas, gestão de projetos, propriedade intelectual, gestão de recursos humanos, etc. todas sendo atividades tanto indispensáveis quanto complexas. Além disso, em áreas como a química e de saúde, há frequentemente a necessidade de garantia de qualidade dos produtos/serviços, o que pode levar a grandes custos e atrasos no desenvolvimento de um novo negócio. Como as startups podem prosperar sem afundar diante de tais desafios?

O European Startup Monitor publicou dados de um levantamento de 2016 sobre 2.515 empresas consideradas *startups* na Europa. Esse estudo apontou os maiores desafios como: 1) vendas e engajamento de clientes, 2) desenvolvimento de produto, 3) crescimento. No Brasil, um levantamento patrocinado pela Finep em 2017 como parte do programa Finep *Startup* evidenciou uma série diferente de dificuldades para *startups* brasileiras, menos orientadas ao desenvolvimento individual da empresa e mais a fatores externos como um sistema de burocracia lento, impostos elevados, e a falta de uma cultura de inovação e de assumir os riscos inerentes ao empreendedorísmo. Essa comparação denota a maturidade do ecossistema *startup* europeu e a urgência de gerar condições mais favoráveis para que *startups* brasileiras alcancem o sucesso e a estabilidade.

Existem várias iniciativas no Brasil visando maior apoio às startups sob a forma de treinamento e recursos financeiros. Mudanças não serão imediatas, e startups modernas terão que trabalhar com o sistema atual e maximizar as chances de sucesso. Minha experiência trabalhando com startups me mostrou um fator comum e absolutamente crítico no desenvolvimento de startups de sucesso sustentável. Uma linha de base que sustenta a empresa frente aos desafios internos e externos e que, na maioria dos casos, é determinante para a administração de uma empresa pequena. Esse é o fator humano, e atua em três níveis: na criação e manutenção de uma boa equipe, no estabelecimento de relações com especialistas do setor que se tornam mentores, e na participação em redes para conseguir apoio e financiamento para o projeto.

Montar uma equipe cheia de ânimo e bem focada, com um conjunto de competências variado e muita vontade de aprender, torna-se inevitavelmente o maior patrimônio da empresa. O estudo do European Startup Monitor evidenciou que *startups* são máquinas de emprego, geradoras de novos tipos de trabalhos, com uma média de 12 oportunidades geradas por cada empresa. Obter estes recursos não deve ser necessariamente caro nem complicado. Muitas *startups* aproveitam os contatos com as Universidades para engajar estudantes para projetos curtos de aplicação comercial. Esta solução é um "ganha-ganha" para todas as partes envolvidas: enriquecedora para os estudantes, de fácil gestão para as

Universidades, e econômica para a *startup*. Outro meio de anunciar posições ou projetos de grande sucesso na Europa é através do site AngelList. Uma rede profissional de *startups* e '*startuppers*' que se parece mais com Tinder do que com LinkedIn, elimina a formalidade e os longos tempos neces sários para se candidatar à trabalhos, proporcionando oportunidades para que os demais interessados possam contribuir para o projeto.

Além de uma força de trabalho comprometida e variada, é importante encontrar um ou mais mentores, profissionais experientes que possam aconselhar o fundador nas decisões estratégicas da empresa. Os conhecimentos práticos dessas pessoas não se encontram em livros, e complementa perfeitamente a competência de jovens empreendedores nas áreas de gestão, planejamento e integração ao mercado. A startup com a qual trabalho atualmente tem três 'senior advisors' que fazem parte do conselho administrativo da empresa, com formação em finanças, regulação, e medicina. Estas pessoas fazem uma grande contribuição técnica em áreas criticas a empresa, que desenvolve produtos de software para saúde. Mas onde encontrá-las? Universidades, aceleradoras, e eventos de startups são ótimos lugares para promover próprio projeto e encontrar parceiros. Na Europa, 21% das startups são vinculadas à uma aceleradora, e 74% cooperam com outras empresas mais estabelecidas ou com outras startups. Engajar-se em parcerias, seja com especialistas individuais ou com empresas/institutos pode ser determinante ao futuro da startup, e abrir oportunidades para financiamento, acesso aos consumidores que estão no mercado e mentorias/consultorias. Adicionalmente, um recurso disponível hoje em dia para estender as próprias competências de maneira barata e prática mas com alta qualidade de ensino é por meio de MOOCs (massive open online courses), cursos universitários online publicados pelas melhores universidades do mundo e geralmente acessíveis de graça.

Finalmente, a melhor solução para criar contatos profissionais é encontrar apoio através do envolvimento em redes. A Escola Brasileira de Química Verde é um excelente exemplo de uma rede rica em contatos, recursos educacionais e oportunidades para promover projetos de inovação em processos químicos. Ainda no



Brasil, os Institutos SENAI de Inovação representam uma estrutura extremamente interessante, inspirada no Fraunhofer Institute alemão. Com base no Reino Unido que mantem contatos no Brasil, estão a Royal Society of Chemistry (RSC) e o Green Chemistry Network (GCN) da Universidade de York, que oferecem plataformas internacionais de "knowledge-sharing" e eventos.

No mundo conectado e global de hoje, as oportunidades para *startups* e jovens empreendedores são infinitas. As redes proporcionam o acesso a especialistas que podem tornar-se consultores ou até investidores na empresa; as novas redes sociais permitem a expansão da própria equipe com as pessoas certas e reduz tempos e custos. O caminho permanece dificíl para as *startups*, mas até as que não alcançam grande sucesso terão contribuído significativamente ao avanço do ecossistema de inovação e convencido os demais que mudar é possível.

Referencias:

European Startup Monitor Report 2016, http://europeanstartupmonitor.com/.

Programa Finep Startup http://www.finep.gov.br/apoio-e-financiamento-externa/programas-e-linhas/finep-startup.

Nota do editor: Giulia Paggiola é consultora independente do setor químico e de saúde. Atua em duas startups em Londres com estratégias regulatórias de *software* para aparelhos médicos e produtos de fitoterapia. Tem Dsc em Química da U. York (Reino Unido), tendo participado do consorcio European Innovative Medicines Initiative (IMI - CHEM21). Foi pesquisadora na ONG ambiental Stockholm Environment Institute (SEI) num projeto com a UFRJ mapeando a sustentabilidade industrial no Brasil e como *senior scientist* na unidade de Green Chemistry R&D da GSK onde desenvolveu sistemas para avaliar sustentabilidade em ciclo de vida de fármacos.

RQI - 2º trimestre 2018 20-9

A Contribuição da Economia Circular para o Desenvolvimento Sustentável

Suzana Borschiver e Aline Souza Tavares

Escola de Química - UFRJ

Apesar dos avanços e inovações tecnológicas como, por exemplo, o desenvolvimento de Cidades Inteligentes, Inteligência Artificial e *Big Data*, a nossa sociedade ainda se depara com um cenário alarmante em relação a questão sócio-econômica-ambiental caracterizado, majoritariamente, pelo pouco aproveitamento de resíduos e uma economia do tipo colaborativa que ainda caminha a passos muito lentos. Entretanto, algumas iniciativas moldadas pelo conceito da economia circular já buscam mudar esse cenário e vão de encontro aos princípios da química verde no tocante ao uso eficiente de recursos e a eliminação de resíduos (LIEDER; RASHID, 2016).

Em 1987, o Relatório de Brundtland, publicado pela Comissão Mundial sobre Meio Ambiente e Desenvolvimento (CMMAD) da ONU, formalizou o conceito de sustentabilidade, tendo como principal meta satisfazer as necessidades da geração atual sem comprometer as gerações futuras. Passados 30 anos da publicação deste Relatório, o modelo de produção linear somado à cultura do consumismo que o alimenta, continua gerando mais desperdícios de matérias-primas, de alimentos, de eletrônicos, mais crise econômica, mais pobreza e assim por diante.

Segundo a plataforma mundial de dados estatísticos sobre resíduos sólidos urbanos, *Waste Atlas*, dos 1,9 bilhões de toneladas por ano desses resíduos gerados, 30% não são coletados e do restante levado aos aterros sanitários, apenas 19% é reciclado e 11% transformados em energia (WASTE ATLAS, 2017). No Brasil, foi constatado por um estudo intitulado "Dossiê Lixo", que são produzidos 387 quilos de lixo por pessoa em um total de mais de 79 milhões de toneladas de resíduos sólidos descartados anualmente (AGÊNCIA NOVA/SB, 2017).

Neste contexto, a Economia Circular se apresenta como caminho alternativo para alinhar a prosperidade econômica, social e ambiental de forma efetiva, de modo a contornar estes obstáculos contemporâneos da sociedade. Com essa perspectiva, os resíduos se tornam novos recursos, a energia deve ser renovável e os componentes tóxicos são eliminados, mantendo o valor das cadeias produtivas (ELLEN MACARTHUR FOUNDATION, 2015).



O modelo de produção circular não é um conceito novo, os seus princípios datam na literatura desde a década de 1970. Dentre estes estão, as escolas de pensamento *Design* Regenerativo (Prof. John T. Lyle, 1970), Economia Azul (Gunter Pauli, 2010), Capitalismo Natural (Amory e Hunter Lovins e Paul Hawken, 2008), bem como nos campos científicos, a Ecologia industrial (Prof. Roland Clift, Thomas E. Graedel, 2001), estudos de simbiose industrial e economia ecológica e ambiental (ELLEN MACARTHUR FOUNDATION, 2015; PAULIUK, 2018).

A Economia Circular pode ser definida de várias maneiras. A *British Standards Institution* (BSI)¹

20-10 RQI - 2º trimestre 2018

(2017a P10) apud Pauliuk (2018) define como uma "economia que é restauradora e regenerativa por design, e que visa manter produtos, componentes e materiais com a maior utilidade e valor em todos os momentos, distinguindo entre ciclos técnicos e biológicos". Isto é, existe a preocupação desde o projeto do produto ou serviço em restaurar, no ciclo técnico, os componentes dos produtos obtidos por via sintética, pela reutilização, remanufatura, reciclagem ou compartilhamento e, no ciclo biológico, regenerar a biosfera ao obter produtos biodegradávieis e utilizar matérias-primas renováveis, fechando o ciclo (ELLEN MACARTHUR FOUNDATION, 2015).

Outros autores, como Sauvé, Bernard e Sloan (2016), definem a Economia Circular como "produção e consumo de bens através de fluxos de materiais de circuito fechado que internalizam externalidades ambientais ligadas à extração de recursos virgens e à geração de resíduos (incluindo a poluição) [...], tendo como objetivo desacoplar a prosperidade do consumo de recursos". A definição de Stahel (1982) apud Lieder e Rashid (2016) complementa ao afirmar que este modelo econômico minimiza a matéria, o fluxo de energia e a deterioração ambiental sem restringir o crescimento econômico ou o progresso social e técnico.

Companhias de diversas áreas já começaram a transição, com 3 casos recentes, de 2015: 1) empresa holandesa de telefones celulares, Fairphone, que lançou um modelo modular cujas peças podem ser desmontadas e reparadas isoladamente, retornando-as à cadeia de eletrônicos (FAIRPHONE, 2017); 2) A produtora de água mineral Costa Rica, que inovou no desenho das garrafas PET, cujas peças são encaixáveis e podem ser reutilizadas como telha, garantindo alta capacidade isolante e evitando o descarte inadequado deste plástico (AGUA COSTA RICA, 2018); e 3) a startup brasileira, *Mig Jeans*, que recolhe jeans usado por meio de doações e customiza para revender, com desconto na próxima peça para quem faz a doação. (MIG JEANS, 2017).

Cabe destacar também que os modelos de negócio estão sendo impactados pela Economia Circular. Por exemplo, a *Philips* lançou, em 2015 luminárias modulares em LED que são conectadas e controladas por um sistema central, reduzindo em 50% o consumo de energia elétrica (LUZ et al., 2017). Por ser modular, o reparo das peças também pode s e r feito isoladamente,



aumentando a vida útil da luminária e reduzindo o consumo de matérias-primas. Ao final do ciclo de vida, a *Philips* é responsável pela coleta, reutilização e reciclagem das luminárias. Este conceito "produto como serviço", denominado *Light-as-a-Service* pela companhia, já foi aplicado, por exemplo, no aeroporto de *Schiphol* em Amsterdã (Holanda) em colaboração com o Grupo *Schiphol* e *Cofely* e no Porto Maravilha no Rio de Janeiro (PHILIPS, 2015; LUZ et al., 2017).

Ainda nesse tipo de modelo, a HP está utilizando a *Internet of Things* (IoT) para monitorar remotamente o nível de tinta em cartuchos de impressora. No *Instant Ink*, o cliente assinante do serviço paga uma taxa mensal com base no número de páginas que imprimem e, identificando o nível chegar ao fim, a companhia envia um cartucho novo¹. A *British Standard Institution* (BSI) é uma empresa de padrões comerciais, produzindo normas, certificações, entre outros, para diversos setores industriais. Fonte: www.bsigroup.com e coleta o usado para a reciclagem. Desse modo, são reduzidos até 57% de resíduos, até 50% de custo em tinta para o cliente, além de melhoria no serviço com a manutenção otimizada (ELLEN MACARTHUR FOUNDATION, 2017).

Essa circularidade, por sua vez, pode ser representada por indicadores no nível macro (países, cidades), meso (parques industriais) e micro (produto, organizações, indivíduos). Os indicadores podem ser mensurados a partir de diferentes parâmetros (valor econômico, massa, energia) e em função de diferentes variáveis (fluxos, ações, mudanças de estoque) ou

RQI - 2º trimestre 2018 20-11

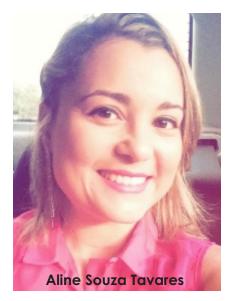
proporções (LINDER et al., 2017).

A China é o país pioneiro na transição para aeconomia circular ao adotar este modelo como política nacional e, por isso, é um forte exemplo de implementação dos indicadores no nível macro. Vale citar aqui alguns exemplos de indicadores macro que tem sido reportado no país, como o consumo de energia por unidade de PIB, o consumo de água por produto unitário em setores industriais-chave, a taxa de reciclagem de plásticos e as emissões de SO₂ (GENG et al., 2012).

No nível meso, os indicadores medem parâmetros da simbiose industrial em parques industriais. No setor da silvicultura, por exemplo, um grupo de pesquisadores na Suécia avaliou, em 2007, a troca de materiais e gasto de energia entre uma fábrica de celulose, uma serraria, uma rede de aquecimento urbano e uma planta de biocombustíveis. O modelo demonstrou os benefícios econômicos gerados, como baixos custos financeiros e estabilidade do sistema, e sugeriu pontos de melhoria tais como perdas no transporte e possíveis conflitos de interesse causados pela redução de incentivos na minimização de desperdícios e economia de energia (KARLSSON; WOLF, 2008).

O nível micro tem sido alvo de discussões na literatura pela complexidade de critérios a serem considerados. Vale citar algumas iniciativas como da Fundação Ellen MacArthur que em conjunto com a Granta Design criaram uma metodologia e ferramentas (MCI Product-Level Dynamic Modelling Tool e Company-Level Aggregator Tool) baseadas na produtividade dos recursos, atividades circulares, geração de resíduos, energia e emissões de GEE (Gases de Efeito Estufa) (ELLEN MACARTHUR FOUNDATION, 2015; PAULIUK, 2018). Um índice de circularidade financeira foi desenvolvido por Linder et al., (2017) como a proporção do valor econômico recirculado dos componentes em fim de ciclo de vida sobre o valor total do produto. O índice de economia circular (CEI) foi proposto por Di Maio e Rem (2015) apud Pauliuk (2018) como valor do material reciclado em percentagem do valor do material no novo produto.

Em relação a casos de Economia Circular relacionados especificamente com a Indústria Química, pode-se citar, por exemplo, a Balbo Group, produtora de álcool orgânico e outros derivados da canade-açúcar, que



implementou o sistema de agricultura regenerativa. Neste a cana-de-açúcar é cultivada sem queima, as folhas que seriam eliminadas no corte são devolvidas ao solo, evitando a evaporação da água e, assim, restaurando os nutrientes, além do reaproveitamento de subprodutos, como a torta de filtro do tratamento do caldo, a cinza das caldeiras e a vinhaça reciclados para fertilização.

Com isso, a empresa já obteve um aumento de 20% na produtividade (ELLEN MACATHUR FOUNDATION, 2017). Já a *Unilever*, em parceria com a *Consumer Goods Forum*, CEMPRE (Compromisso Empresarial para Embalagem) e cooperativas em 2011, começou a instalar pontos de coleta voluntária de embalagens. Desde então, coletou mais de 100 mil toneladas de material e apoiou 141 estações de reciclagem e 45 cooperativas distribuídas em 42 cidades, atuando, então, no retorno de resinas para a cadeia produtiva (UNILEVER, 2017).

Assim, pode-se observar que a economia circular apresenta grande potencial para empresas, governo, entidades de pesquisa e a sociedade com ações voltadas para o crescimento econômico, da proteção ambiental e da responsabilidade social.

Entretanto, para alcançar a integração da sustentabilidade ambiental, econômica e social serão necessárias ainda mudanças radicais de comportamento da sociedade, dos modelos de negócios e, principalmente, na gestão pública na direção à eficiência de recursos e a redução das externalidades negativas.

20-12 RQI - 2° trimestre 2018

Referências Bibliográficas

ABIQUIM. O Desempenho da Indústria Química em 2017. Disponível em: http://www.abiquim.org.br/. Acesso em: jan. 2018.

ACTION SHOP. Disponível em: http://actionshop.com.br/>. Acesso em: Nov. 2017.

A G U A C O S T A R I C A . D i s p o n í v e l e m : http://www.aguacostarica.com/. Acessado: Mai.2016. ELLEN MACARTHUR FOUNDATION. Rumo à Economia Circular: O Racional de Negócio para Acelerar a Transição. 2 0 1 5 . D i s p o n í v e l e m : http://https://www.ellenmacarthurfoundation.org/assets/downloads/ Rumo-à-economia-circular_SumarioExecutivo.pdf>.

ELLEN MACARTHUR FOUNDATION. Circularity Indicators. (2015). Disponível:

<http://www.ellenmacarthurfoundation.org/
programmes/insight/circularity-indicators> Acesso:
Jan.2018.

ELLEN MACARTHUR FOUNDATION. Disponível em: http://www.ellenmacarthurfoundation.org/case-studies/regenerative-agriculture-at-scale. Acesso em: Mai. 2017.

ELLEN MACARTHUR FOUNDATION. Disponível em: http://www.ellenmacarthurfoundation.org/case-studies/bio-based-material-for-single-use-packaging. Acesso em: Nov. 2017.

ELLEN MACARTHUR FOUNDATION. Disponível em: http://www.ellenmacarthurfoundation.org/case-studies/bringing-printing-as-a-service-to-the-home. Acesso em: Jan. 2018.

EXTRAIR ÓLEOS NATURAIS. Disponível em: http://extrair.com.br, Acesso em: Nov. 2017.

F A I R P H O N E . D i s p o n í v e l e m : http://www.fairphone.com/en/>. Acessado: Mai.2016. GENG, Y.; FU, J.; SARKIS, J.; XUE, B. 2012. Towards a national circular economy indicator system in China: an evaluation and critical analysis. Journal of Cleaner Production 23 (2012) 216-224

KARLSSON, M.; WOLF, A. Using an optimization model to evaluate the economic benefits of industrial symbiosis in the forest industry. Journal of Cleaner Production, v. 16, n. 14, p. 1536–1544, 2008.

LIEDER, M.; RASHID, A. Towards circular economy implementation: A comprehensive review in context of manufacturing industry. Journal of Cleaner Production, v. 115, p. 36–51, 2016.

LINDER, M.; SARASINI, S.; VAN LOON, P. A Metric for Quantifying Product-Level Circularity. Journal of Industrial Ecology, v. 21, n. 3, p. 545–558, 2017.

LUZ, B. et al. Economia circular Holanda:Brasil: da teoria à prática. 1ª ed. Rio de Janeiro: Exchange 4 Change Brasil, 2017. 170 p.

MIG JEANS. Disponível em: www.migjeans.com.br/sobre. Acessado: Mai. 2016.

NOVA/SB, A. Dossiê Lixo. [s.l: s.n.]. Disponível em: http://dossie.comunicaquemuda.com.br/wpcontent/uploads/2017/06/DOSSIER_CQM_LIXO_FINAL.pdf>. Acesso em: 16 jan. 2018.

PAULIUK, S. Critical appraisal of the circular economy standard BS 8001:2017 and a dashboard of quantitative system indicators for its implementation in organizations. Resources, Conservation and Recycling, v. 129, n. September 2017, p. 81–92, 2018.

PHILIPS. Disponível em: http://www.philips.com/a-w/about/news/archive/standard/news/press/2015/201 50416-Philips-provides-Light-as-a-

Service-to-Schiphol-Airport.html>. Acesso em: Jan. 2018. REVISTA QUÍMICA E DERIVADOS. Disponível em: http://www.quimica.com.br/perspectivas-2017-industria-quimica-setor-volta-crescer-mas-pede-reformas-amplas-para-sair-da-estagnacao/3/>. Acesso em: jun. 2017.

SAUVÉ, S.; BERNARD, S.; SLOAN, P. Environmental sciences, sustainable development and circular economy: Alternative concepts for trans-disciplinary research. Environmental Development, v. 17, p. 48–56, 2016.

UNILEVER. Disponível em: http://www.unilever.com/sustainable-living/reducing-environmental-impact/waste-and-packaging/rethinking-waste-towards-a-circular-economy/>. Acessado: Agosto. 2017.

WASTE ATLAS. Disponível em: www.atlas.d-waste.com/. Acessado: Nov. 2017.

RQI - 2º trimestre 2018 20-13

Biocombustível, petróleo e transição energética

Luiz Eduardo Duque Dutra
Escola de Química da UFRJ

O pioneirismo no uso do álcool combustível certificou a criatividade brasileira. Por trás dos dois "choques" do petróleo, para os militares, existiam três motivações: conter o gasto em dólar, reduzir a dependência energética e gerar renda no campo. Seguiuse o "contrachoque", traduzido em quase duas décadas de preços do barril deprimidos e a alternativa só não foi abandonada em razão da persistência de industriais e cientistas largados à própria sorte pelos sucessivos governos da época.

A partir da última década do século passado, a redução de particulados e emissões de gases de efeito estufa passou a orientar a política ambiental. Além disso, após atingir seu piso em junho de 1999, os preços do petróleo voltaram a subir. Preços do petróleo e meio ambiente se combinaram para recolocarem os biocombustíveis como alternativa para uma matriz energética mais verde.

Foi quando o Brasil redobrou a aposta. A partir de 2003 e em cinco anos, o perfil da frota mudou integralmente com a rápida penetração dos veículos "flex". Além disso, um quinto do combustível nas bombas de gasolina era constituído de álcool anidro. Até hoje, em nenhum outro país o álcool etílico hidratado é comercializado para fins automotivos, ou o teor de álcool anidro na gasolina é tão alto. O setor conheceu, então, o apogeu.



O biodiesel assentou a liderança. A partir de 2008, todas as metas para sua inclusão foram superadas, sem que a qualidade do combustível fosse questionada. Aliás, em se tratando do maior varejo do país, do custo (para o comprador) que acarreta a falta de qualidade e do ganho (para o vendedor) proporcionado pela fraude, o exigente padrão de conformidade dos dois biocombustíveis demonstrava a competência produtiva e laboratorial existente. Pelo mundo, os pesquisadores testavam todos os tipos de matérias-primas (de algas ao biogás) e processos (dos enzimáticos aos físico-químicos), ao mesmo tempo em que se miravam no exemplo brasileiro.

Duas crises financeiras (norte-americana, em 2008 e da dívida soberana europeia em 2011), seguidas pela brutal queda do preço do barril, a partir do quarto trimestre de 2014, decretaram o fim dos esforços. Com o setor altamente alavancado, as falências se sucederam nos EEUU, na Inglaterra, na Itália, na Espanha, no Brasil... até a desvalorização do petróleo dar cabo das poucas iniciativas restantes na pesquisa. Com o barril a menos de cinquenta dólares, não havia como concorrer com os derivados do petróleo.

A recente reviravolta do mercado petrolífero tem pouca serventia, a História ensina. Em primeiro lugar porque resulta de um acordo entre a Arábia Saudita e a Rússia. Sacrificar a produção pelo preço tem limites. No petróleo, a estratégia viabiliza concorrentes em águas profundas, no círculo polar, nas areias betuminosas e no não convencional; por isso, tem fôlego curto. Em segundo lugar, porque câmbio e dólar são imprevisíveis devido às incontáveis influências em seus comportamentos; para piorar, ambos são estreitamente relacionados. Em terceiro e último lugar, na microeconomia, o oligopólio caracteriza uma estrutura de mercado intrinsecamente instável, em particular quando concentrado e com

20-14 RQI - 2º trimestre 2018

participantes detendo diferentes condições de produção.

A imprevisibilidade do preço e a instabilidade dos oligopólios não impedem o consenso sobre a transição energética em andamento. As petroleiras estimam para daqui a vinte ou trinta anos a saturação das vendas dos combustíveis automotivos. Situação impensável há quinze anos, quando certos acadêmicos se apegavam à curva de Hubbert e previam a iminente exaustão do mineral. Vale lembrar que bastaram trinta anos para carros e bondes (elétricos) substituírem cavalos e carroças,

apenas dez para, da bomba nuclear, chegar à geração elétrica e ainda menos para introduzir as turbinas a gás natural nas usinas térmicas. Ninguém dúvida que o século XXI será movido por eletricidade.

Além da janela para o biocombustível automotivo estar se fechando, o Brasil perdeu a liderança para os Estados Unidos. Entre 2001 e 2016, a produção nacional de álcool foi multiplicada por 2,5; a norte-americana, por 8,7. Depois de 2008, do milho, eles produzem o triplo do que extraímos da cana e voltaram a crescer. No biodiesel não é diferente e, hoje, eles produzem 60% mais do que aqui. O comércio exterior escancara o retardo recente: em 2017, as importações de álcool etílico anidro somaram novecentos milhões de dólares e 99,9% oriundas dos EEUU. Também revela a fragilidade do biodiesel nacional: todo o metanol é importado, ou seiscentos e sessenta milhões de dólares gastos em 2017.

A única vantagem comparativa que resta ao país – a terra – é cada vez mais disputada com outras culturas agrícolas muito mais rentáveis. Assim, na entressafra, o Nordeste já é abastecido pelo álcool dos Estados Unidos! E o que sempre faltou, a ponto de justificar o uso da cana no passado, hoje, é abundante.

No primeiro trimestre de 2018, o Brasil exportou mais de sete bilhões de dólares em óleo cru, à frente do minério de ferro e somente atrás da soja. Nisso, também, ninguém apostaria em 2001.



Portanto, independente do preço do barril, enquanto não competir à saída da usina com o derivado na porta da refinaria, o biocombustível dependerá de política de fomento. Persistência e criatividade não serão suficientes. Muito menos a abundância de recursos naturais como se viu. Sem escala e submetido à sazonalidade agrícola, ao biocombustível só resta o ganho tecnológico que, contudo, depende de maciças despesas em pesquisa e desenvolvimento que, nem estado, nem capital, teve disposição para arcar nos últimos cinco anos.

A outra opção seria uma imposição parafiscal incidindo sobre os combustíveis de origem fóssil e de cunho estritamente ambiental. De qualquer forma, as duas iniciativas – investir em P & D, ou taxar a gasolina e o óleo Diesel – exigem decisões consistentes e de longo prazo.

No mês de maio, o colapso produzido pela greve dos caminhoneiros (contra o aumento diário do óleo Diesel) expôs a acefalia no poder e as reações destrambelhadas, do preço tabelado na bomba, sem incluir o biodiesel mesclado ao combustível final, ao subsídio por meio do orçamento público. Ao menos, a falta de governo tem data marcada para acabar: trinta e um de dezembro próximo.

Em matéria de biocombustível, conciliar a dotação natural e a competência local, de forma a inserir o Brasil na transição em curso, por tudo o que foi aqui colocado e o acontecido no mês passado, merece estar na pauta das discussões eleitorais.

QUÍMICA VERDE nas Empresas

Embalagens biodegradáveis da fécula de mandioca

A CBPak, fundada em 2002, investiu em P&D da tecnologia que transforma em embalagens a fécula de mandioca brava, matéria-prima abundante e muito usada pela indústria nacional. Hoje, a capacidade da produção é de quase 2 milhões de peças por mês, entre bandejas, copos e embalagens customizadas. O produto é biodegradável (são totalmente mineralizados em 92 dias) e 100% compostável (vira adubo orgânico). A pegada de carbono dos produtos da empresa também é inferior ao das que utilizam plástico, dada a baixa emissão dos gases de efeito estufa ao longo de toda a cadeia de produção e o baixo consumo de água durante o processo produtivo.

Couro a partir de fibras das folhas de abacaxi

Piñatex é um couro ecológico produzido pela Ananas Anam a partir das fibras de folhas de abacaxi comumente descartadas. O material é facilmente tingido e substitui o couro animal. O P&D foi realizado no Royal College of Art (Londres), em parceria com a Camper, Puma e o designer Ally Capellino. As fibras são extraídas por descasque e submetidas a um processo que os transforma em tecido não urdido.

O subproduto do descasque serve como fertilizante orgânico ou para gerar biogás.



Fibras de carbono podem ficam mais verdes em futuro muito próximo. Acrilonitrila, o monômero utilizado na fabricação de acrilatos, pode ser preparado em altos rendimentos a partir de derivados da decomposição biológica de certos açúcares evitando o uso de matérias primas e produtos tóxicos assim como altas temperaturas e pressões.

Escalonamento pode ser um problema em certos projetos mas, as vezes, ocorre o inverso. Uma grande indústria farmacêutica que precisa de pequenas quantidades de um princípio ativo destinado a testes de um quimioterápico descobriu que poderia sintetizá-lo com hidrazina de maneira mais segura, rápida e barata usando equipamento por reações em fluxo contínuas.

Fabricantes de plásticos preocupados com o entupimento de corpos de água e poluição de oceanos e praias estão a procura de fungos e bactérias que são capazes de decompor objetos de polietileno. Eles ganharam recentemente um reforço significativo sob as forma de sistemas digestivos de certos tipos de minhoca que é capaz de decompor também o poliestireno.



O Caderno de Química Verde é uma publicação da Escola Brasileira de Química Verde com o objetivo de divulgar matérias de interesse, fatos, entrevistas e notícias ligadas ao setor.

Editor Responsável:

 $Peter\,Rudolf\,Seidl.$

Editora Adjunta:

Adriana Karla Goulart.

Conselho de Redação:

Ana Karolina Muniz Figueiredo, Estevão

Freire, Julio Carlos Afonso, Roberio Fernandes Alves de Oliveira.

Consultor Senior:

Celso Augusto Caldas Fernandes.

Diagramação e arte:

Adriana dos Santos Lopes.

Contato:

quimicaverde@eq.ufrj.br

É permitida a reprodução de matérias desde que citada a fonte.

Os textos assinados são de responsabilidade de seus autores.

20-16 RQI - 2° trimestre 2018

PIONEIROS DA QUÍMICA

Manuel Mateus Ventura

Em 17 de junho de 1921 nascia, em Fortaleza, capital do estado do Ceará, Manuel Mateus Ventura, filho de Antônio Rodrigues Ventura e Maria Raimunda Ventura. Seu pai, português, era proprietário em Fortaleza da padaria Modelo, localizada na rua General Sampaio, próximo à praça da Estação, no centro da cidade. Durante um período em que seu pai resolveu voltar à terra natal, estudou em Portugal o curso primário e talvez um curso profissionalizante, pois aprendeu técnicas básicas de Agronomia.

Com o retorno da família ao Brasil, estudou no Liceu do Ceará e se formou Engenheiro Agrônomo em 1943 pela então Escola de Agronomia do Ceará, atualmente Centro de Ciências Agrárias da Universidade Federal do Ceará - UFC. O Professor Manuel Mateus Ventura contou, por ocasião da solenidade de entrega do título a que fez jus, de Professor Honoris Causa pela Universidade Federal do Ceará, em 1994, que fez o Curso de Humanidades (1933-1937) e o Pré-Politécnico e que os professores que mais o influenciaram no Liceu foram, segundo suas próprias palavras;

"Aderbal de Paula Sales, professor de Ciências Físicas e Naturais, competente e de excelente didática, Manuel de Ávila Goulart, excelente professor de Matemática, dotado de forte espírito crítico e lógico e Roberto Lisboa, professor de Física, portador de vasta cultura. Todos eles exerceram destacado papel em minha modelagem científica primordial e a eles presto meu profundo reconhecimento, pelo que significaram em minha formação intelectual".

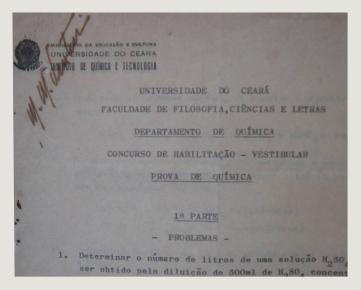
Mesmo antes de formado, Manuel Mateus Ventura já se interessava por Ciência em um ambiente em que ninguém tinha envolvimento com matéria científica. É exemplo disso e como ele mesmo mencionou, o primeiro trabalho científico realizado no Ceará. Foi um trabalho quando ainda era estudante de Agronomia, em 1941, com um colega de turma que era o encarregado de subir nos cajueiros para marcar os frutos a serem posteriormente coletados e analisados: "Ventura, M. M. e Vasconcelos, J. E. - Contribuição ao estudo químico da maturação do caju (hipocarpo de *Anacardium occidentale* L.). 1941 (Publicação mimeografada da Escola de Agronomia do Ceará)".

Depois de formado, Manuel Mateus Ventura foi nomeado Professor Assistente da Escola de Agronomia do Ceará, em 12 de janeiro de 1946, ocupando a Cadeira de Química Agrícola e passando, com a nova Constituição do Estado (1947), a gozar do título e dos benefícios da Cátedra de Química Agrícola. Os fundamentos de Química Orgânica na Escola de Agronomia até então eram ministrados em caráter puramente descritivo e modificou totalmente o seu conteúdo, esforçando-se para desenvolver, além da atividade didática, atividades de pesquisa na qual deveriam ser dados também os fundamentos de Bioquímica de Plantas. Sua indicação para ocupar a cadeira seria o berço da Bioquímica no Ceará.

Manuel Mateus Ventura trabalhou como químico prático da Usina Siqueira Gurgel, uma das muitas usinas que processavam sementes de algodão e que floresceram no Ceará desde o começo do século XX. No início da década de 40 a Usina Siqueira Gurgel se dedicava à extração de óleo de algodão, por meio do uso de solventes, para consumo humano e depois produziria sabão (Pavão) e sabonete (Sigel). Nessa fábrica Manuel Mateus Ventura conseguiu o apoio inicial para sua ciência: os diretores passaram a assinar revistas científicas, provavelmente as primeiras a chegarem ao Ceará com uma certa constância, como *Science*. Ainda hoje podem ser encontrados inúmeros livros de Química

e de Bioquímica na Biblioteca Central da UFC com a marca "M. M. Ventura" com sua caligrafia característica. Essa assinatura ele registrava em livros de sua biblioteca particular ou do então Instituto de Química e Tecnologia – IQT, do qual foi Diretor, ou em qualquer documento que por ele foi chancelado.

Na figura abaixo, vê-se detalhe da prova de Química do primeiro Concurso de Habilitação - Vestibular para ingresso no Curso de Química da UFC, com a inconfundível assinatura **M. M. Ventura**, primeiro e único diretor do Instituto de Química e Tecnologia – IQT da UFC, elaborada e aplicada pelo próprio professor em janeiro de 1962.



Professor Ventura, também chamado pelos companheiros, alunos e demais pessoas no ambiente de trabalho de Doutor Ventura, criou na Escola de Agronomia, uma publicação denominada "Publicação Técnica", Série A de natureza mais Físico-Química e Série B, mais Biológica. Alguns dos trabalhos nesta publicação eram puramente teóricos.

Por volta de 1956/7, recebeu chamado do Reitor Antônio Martins Filho que queria manter uma conversa. Palavras textuais do Reitor: "Ventura, eu gostaria que você estudasse a organização de um Instituto para se criar por aqui, de Química e Tecnologia". O Professor Ventura perguntou: "Reitor, por que Química e Tecnologia? "Bom, Química porque você com o seu grupo poderá nesse instituto ampliar os seus trabalhos, outros poderão vir e ali você na Escola de Agronomia está limitado, principalmente pelos objetivos da Escola e Tecnologia

porque, vamos dizer é em grande parte a ação prática da química e que nós devemos olhar, dar um sentido prático também". Então disse: "Bom, eu não tenho nada a objetar contra o fato de ser química e tecnologia, apenas digo ao senhor o seguinte, que nesta parte da tecnologia vamos ter muito pouco, porque o que nós estamos fazendo na universidade mesmo é mais voltado para a química propriamente dita e não para a tecnologia, mas futuramente é claro que a gente pode".

"Então organizei o Plano do Instituto, a criação do Instituto, e levei ao Reitor. O Reitor era muito veemente e recebeu do seguinte modo: "deixe isso aqui que eu vou ler e depois lhe chamo". Depois me chamou e disse logo: "assim não é possível. Você é um ditador desse Instituto e nós não podemos concordar com isto". Bom Reitor, eu estou no meu laboratório, estava onde estou na Escola de Agronomia, você mandou me chamar para organizar um plano e eu organizei. Se o senhor vai criar o Instituto segundo esse plano eu não sei, mas o senhor pode modificar à vontade, o senhor é o Reitor da Universidade. Agora, comigo não, porque eu só acredito nesse Instituto desse modo que aí está. O Reitor podia não estar num dia bom, eu também não. Então houve praticamente uma parada. Eu voltei para o meu laboratório e o Reitor ficou lá com os elementos e tal". (depoimento do Prof. VENTURA, 1984).

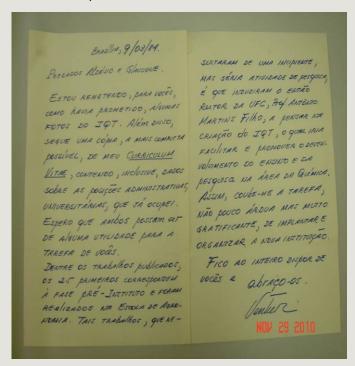
O Instituto de Química e Tecnologia - IQT foi criado na Universidade do Ceará através da Resolução nº. 58, de 27 de dezembro de 1958, publicada no Diário Oficial do Estado de 29.12.1958. Por esta Resolução o Reitor Antônio Martins Filho, usando das atribuições que lhe conferia o art. 21, letra u, do Decreto nº 40.229, de 31 de outubro de 1956 (Estatuto da Universidade), devidamente autorizado pelo Conselho Universitário (sessão de 26 de dezembro de 1958), "Cria o Instituto de Química e Tecnologia da Universidade do Ceará e dá outras providências". O Instituto de Química e Tecnologia não tinha hierarquicamente na Universidade a mesma posição das Escolas e Faculdades. Era praticamente o primeiro Instituto que surgia na Universidade. As Escolas e Faculdades tinham representação no Conselho Universitário e o Instituto só muito tempo depois é

que teve esta representação, por força da Reforma Universitária, por volta de 1970, não mais como Instituto de Química e Tecnologia, mas como Instituto de Química, passando a ter representação no Conselho Universitário tendo como membro o Prof. Antônio Enéas Mendes Bezerra, então Diretor do Instituto de Química.

Com a Reforma Universitária, já se passava a falar nas disciplinas básicas. E os Institutos (de Química, Física e Matemática) apareceram como meio ideal para ministrar essa parte básica. O Professor Valnir Chagas, do Conselho Federal de Educação, que nesse tempo ainda estava em Fortaleza, foi peça fundamental para que os Institutos fossem encontrando a sua razão de ser na parte didática da Universidade.

Uma análise da produção científica da Universidade compreendendo registros desde suas origens até o ano de 1962 mostra, de maneira insofismável, que o que se publicava cientificamente no Ceará, se originava da Química (Bioquímica) Agrícola/Instituto de Química e Tecnologia – IQT. Esta constatação confirma o que todos sabiam: onde se fazia Ciência em Fortaleza era nesse reduto do Professor Manuel Mateus Ventura.

Para o Professor Manuel Mateus Ventura, a ideia de criar o Instituto de Química e Tecnologia foi do Reitor, Professor Antônio Martins Filho. O próprio Professor Ventura afirma isto em carta manuscrita encaminhada de Brasília, em 09/03/1984, para os Professores João Aldésio Pinheiro Holanda e Glaucione Gomes de Barros, que foram seus alunos no Instituto de Química e Tecnologia. O que o Professor Manuel Mateus Ventura fez na realidade foi o Plano do Instituto e o Regimento, baseados em Instituições similares existentes na época, que ele conhecia por participar de Congressos. Nenhuma instituição isoladamente serviu de modelo, mas pensou justamente numa instituição compreendendo departamentos que abrangessem os vários campos de atividade em química, mas sem grandes preocupações, pois na época não tinha massa crítica de pessoas. Então não comportava muito refinamento nessa parte de estrutura da Instituição. Abaixo encontra-se a referida carta manuscrita enviada para os dois profissionais, exalunos do Prof. Manuel Mateus Ventura, relatando o que acima está explicitado.



Cursos para formar profissionais de nível superior em ciências exatas ou da natureza, tais como Química, Física, Biologia e Matemática não tinham ainda sido criados. Nessa época, ainda que existisse no Estado do Ceará apenas a UFC, havia pouca concorrência para o ingresso nos Cursos Superiores. Manuel Mateus Ventura fez a defesa do Curso de Engenharia Química:

"foi um negócio que me deixou numa situação muito ruim com aquele pessoal da Escola de Engenharia. Mas defendi com unhas e dentes a abertura do Curso de Engenharia Química. Eles eram contrários e isso aí outra vez eu contei com o Martins Filho. Eles eram contrários porque achavam que aquilo era da Escola de Engenharia e não achavam ainda o momento oportuno para o Ceará assumir a Engenharia Química e o Martins foi que me apoiou muito. Eu fiz a defesa, depois isso não quer dizer que necessariamente esse Curso de Engenharia Química fique no Instituto. Esse curso é de vocês, da Escola de Engenharia. Eu acho que fica muito bem lá". (depoimento do Prof. VENTURA, 1984).

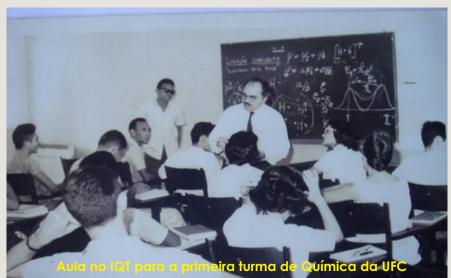
Os Professores Antônio Telmo Nogueira Bessa, Expedito José de Sá Parente e Antônio Moreira Filho, eram os responsáveis pela parte de engenharia, as disciplinas de fundamentos tecnológicos do Instituto,

e que o Professor Manuel Mateus Ventura afirmou serem pessoas realmente extraordinárias.

"Os contatos mantidos no Rio com Expedito e Moreira ocorreram antes da contratação, quando ainda faziam o Mestrado em Engenharia Química na COOPE. O Coimbra sempre me dava notícias deles. O Expedito quase desiste de concluir o Mestrado, mas o incentivamos a continuar. Tínhamos naquela época bons laboratórios, bem equipados, com boa manutenção graças ao Carlos Ernesto e com recursos do

CNPq, da CAPES e Rockfeller, que impressionava a todos, inclusive o pessoal do sul e até mesmo do exterior" (depoimento do Prof. VENTURA, 1984).

Em seu livro "O outro lado da História" o ex-Reitor Antônio Martins Filho afirma que criou o Instituto de Química e Tecnologia, com recursos próprios da Universidade e "o confiou ao cientista Mateus Ventura que já vinha fazendo um bom trabalho na Escola de Agronomia". É interessante que, no mesmo livro, o Reitor escrevendo sobre a incorporação da Escola de Agronomia à Universidade, alguns anos antes, diz que "um ilustre cientista da Agronomia muito se preocupava em que sua Escola fosse conhecida nos Estados Unidos e em Upsala, quando ela precisava era ser realmente conhecida e atuante em Quixadá ou no Nordeste". Esta foi sempre a antinomia: dava-se por um lado e, pelo outro, faziam-se cobranças desproporcionais.





A foto acima se refere à ocasião em que foi firmado o Convênio UFC/IQT – Comissão Nacional de Energia Nuclear (CNEN) para implantação de um laboratório de pesquisa com radioisótopos no IQT. Assinaram o Convênio, pelo Instituto de Química e Tecnologia o seu Diretor, Professor Manuel Mateus Ventura e pelo Comissão Nacional de Energia Nuclear o seu Presidente, Professor Marcello Damy de Souza Santos.

"Professor Ventura" ou "Doutor Ventura", como se tornou conhecido, foi um semeador de instituições, seja no Ceará seja em Brasília, admitido na UnB, em 1969. Na UFC, estruturou o Instituto de Química e Tecnologia e o Instituto de Biologia. Teve participou importante no estabelecimento dos Institutos de Química, de Física e de Matemática, denominados Institutos Básicos. Foi o primeiro presidente da Comissão Central de Pesquisas -

CCP, que concedia bolsas para estudantes universitários e pesquisadores na UFC, por volta do ano de 1960, tendo sido o primeiro Pró-Reitor de Pesquisa e Pós-Graduação da UFC. Prof. Manuel Mateus Ventura sempre teve prestígio fora do Estado sendo seu ponto de apoio a Biofísica de Carlos Chagas Filho na Praia Vermelha - Rio de Janeiro. Em 1964 foi eleito para a Academia Brasileira de Ciências, como membro Associado.

O reconhecimento da importância científica do Prof. Manuel Mateus Ventura foi

constatado após sua inclusão, como um dos dois mil cientistas de destaque do século XX, em um dicionário publicado provavelmente em 1999 pelo *International Biographical Centre*, de Cambridge - Inglaterra.

Foi admitido nas seguintes Associações Científicas: Academia Brasileira de Ciências (Membro Titular desde 1964), Société de Chimie Physique (France), Deutsche Botanische Gesellschaft (Deutschland), Sociedade Argentina de Fisiologia Vegetal, Sociedade Brasileira de Botânica (Presidente 1957-1958), Sociedade Brasileira de Bioquímica, Sociedade Brasileira de Ciência do Solo, Associação Brasileira de Química, New York Academy of Sciences (active member desde 1981).

O Professor Manuel Mateus Ventura recebeu o Prêmio Anísio Teixeira de 1981 (MEC/CAPES) "por contribuir de maneira eficaz e decisiva para a formação, orientação e desenvolvimento da Cultura Científica e da Pesquisa Brasileira". Entretanto, lamenta não ter tido muito reconhecimento no Ceará, mas que teve reconhecimento fora. De acordo com suas próprias palavras:

"Pelo que eu realizei aqui e em Brasília, esse prêmio Anísio Teixeira me foi concedido e a Universidade Federal do Ceará nem se fez representar. Quando o recebi, a Universidade de Brasília estava toda lá no Itamarati. Não tinha um representante da UFC. Nem um telegrama me enviaram" (entrevista do Prof. VENTURA, 1984).

Entretanto, a UFC reconheceu, merecidamente, todo o valor e importância científica do Professor Ventura quando, em 1994, concedeu-lhe por unanimidade o título de Professor *Honoris Causa*, feliz iniciativa na gestão administrativa do então Magnífico Reitor Professor Antônio Albuquerque Souza Filho.

O Centro Acadêmico do Curso de Química Industrial lhe prestou uma homenagem colocando seu nome: Centro Acadêmico Professor Manuel Mateus Ventura.

Em 12/03/1999 o Departamento de Bioquímica e Biologia Molecular do Centro de Ciências da UFC inaugurou o Bloco 939, no Campus do Pici, onde passou a funcionar, prestando significativa homenagem ao seu criador, dando-lhe o nome "Bloco Professor Manuel Mateus Ventura".

A seguir, as principais atuações acadêmicas, científicas e administrativas do Prof. Manuel Mateus Ventura:

- → Fez os Cursos Atualização em Biofísica, Instituto de Biofísica, Universidade do Brasil, 24/06/1957-03/08/1957 e Enzimas do Metabolismo Intermediário, sob a regência do Prof. Severo Ochoa (U.S.A.), Instituto de Biofísica, Universidade do Brasil, 02/07/1957 a 18/07/1957;
- → Diretor do Instituto de Química e Tecnologia IQT da UFC, de 1958 a 1968;
- → Presidente da Comissão Central de Pesquisa da UFC;
- → Presidente do Conselho de Ensino dos Institutos Básicos da UFC;
- → Professor Titular da Universidade Federal do Ceará, até 13/06/1975;
- → Vice-Diretor do Instituto de Ciências Biológicas da UnB;
- ightarrow Chefe do Departamento de Biologia Celular da UnB, de 1970 a 1974;
- → Ex-Membro: da Câmara de Pesquisa e Pós-Graduação da UnB e do Conselho de Ensino e Pesquisa da UnB;
- → Ex-Coordenador: do Curso de Pós-Graduação (Mestrado) em Bioquímica e Biologia Molecular da UFC e do Curso de Pós-Graduação (Mestrado) em Biologia Molecular da UnB;
- → Membro da Comissão de Seleção da Academia Brasileira de Ciências (eleito em três triênios consecutivos desde 1975);
- → Ex-Assessor Científico do Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq);
- ightarrow Ex-Editor Associado da Revista Brasileira de Tecnologia (CNPq);
- → Redator da Revista de Biologia (Lisboa-Portugal);
- → Assessor Científico da Revista Pesquisa Agropecuária, Departamento Nacional de Pesquisa Agropecuária do Ministério da Agricultura;
- → Professor Visitante do Curso de Pós-Graduação (Mestrado e Doutorado) em Bioquímica do Instituto de Química da UFRJ;

- \rightarrow Professor Titular (Visitante) da Universidade de Brasília, de 01/07/1970 a 13/06/1975;
- → Professor Titular do Quadro Docente da Universidade de Brasília, em regime de tempo integral e dedicação exclusiva, desde 13/06/1975;
- → Participação em vários exames de Dissertação de mestrado e exames de Tese de Doutorado, Orientação de Dissertações de Mestrado e de Teses de Doutorado;
- → Trabalhos completos publicados em periódicos: 79 (setenta e nove).

Na foto abaixo, o Prof. Manuel Mateus Ventura após a solenidade de outorga do Prêmio Professor Honoris Causa, pela UFC, vendo-se ainda, da esquerda para a direita, os professores Ary Marques da Silva, José Wilson de Alencar, Manassé Claudino Fonteles e Osório Viana.



Em junho de 1986 o Professor Manuel Mateus Ventura enviou, para o Professor Ary Marques da Silva, uma relação das suas citações identificadas na literatura científica. Para se ter ideia, já naquele ano o Professor Ventura relacionou 46 citações, indicando nominalmente os respectivos pesquisadores que o citou. A maioria das citações foi identificada no *Science Citation Index*, conforme indicação do Professor Ventura, assinalada ao lado de cada uma delas.

As linhas de pesquisa nas quais o Prof. Manuel Mateus Ventura realizou trabalhos científicos foram: Inibidores de Protease; Caracterização Físico-Química de Proteínas; Análise Teórica de Sequência de Aminoácidos (Polipeptídios e Proteínas); Pesquisa Básica. Essas Linhas de Pesquisa têm como áreas de atuação Ciências Biológicas (Grande Área), Bioquímica e Biofísica (Áreas) e Biologia Molecular e Biofísica Molecular (Subáreas).

Prof. Manuel Mateus Ventura completou noventa e sete anos no dia 17 de junho de 2018, com uma destacada atuação na formação de profissionais de nível superior, dos quais ex-bolsistas no estado do Ceará (UFC) e em Brasília (UnB). Com vasta produção científica difundida até no exterior, é, sem dúvida, um renomado cientista de nosso país.

REFERÊNCIAS

MARTINS FILHO, Antônio. **O Outro Lado da História**. Fortaleza-CE: Edições UFC, 1983, 442 p.

SILVA, Ary Marques da; SILVA, Airton Marques da; COUTO, Cláudio Sampaio; HOLANDA, João Aldésio Pinheiro; OLIVEIRA, José Maria Barreto de. Trajetória da Química no Ceará – Resgate da Memória. Fortaleza-CE: Gráfica LCR, 2011, 226 p. VENTURA, M. M. CVLattes. Endereço para a c e s s a r e s t e C V: http://lattes.cnpq.br/0110642542221985.

Ceará. 2. ed. Fortaleza-CE: Expressão Gráfica e Editora, 2010.

Notas do Editor

O Editor agradece de coração aos irmãos Ary Marques da Silva e Airton Marques da Silva pela realização desta entrevista e coleta de dados da trajetória do Nobre Prof. Manuel Marques Ventura.

Foram utilizadas fotografias e uma carta manuscrita gentilmente cedidas pelo Prof. Ventura, e fotografias do acervo pessoal do Prof. Ary Marques da Silva.

Também foi inserida neste trabalho parte da entrevista gravada, concedida pelo Prof. Ventura para os Químicos João Aldésio Pinheiro Holanda e Glaucione Gomes de Barros em 1984 (depoimento do Prof. VENTURA, 1984).

Política Mineral do Brasil

Os recursos minerais são recursos insubstituíveis para o desenvolvimento socioeconômico de um país; eles são usados em todas as indústrias, seja como matérias-primas ou para produtos semiacabados. Por exemplo, o ferro e o titânio são muito utilizados para a fabricação de máquinas de construção, automóveis, navios, ferrovias, pontes etc. O níquel é usado para a obtenção do aço inoxidável, bem como em moedas, baterias e equipamentos eletrônicos, artigos estes indispensáveis à vida moderna.

A instalação de fábricas que exercem atividades de mineração gera benefícios socioeconômicos para uma determinada região, pois são criados empregos, diretos e indiretos, geralmente associados a melhores salários. Isso tem um efeito multiplicador sobre a economia da área afetada pela atividade de mineração e das áreas adjacentes, acarretando melhorias de infraestrutura, como estradas, comunicações, energia etc.

De acordo com o secretário do Ministério das Minas e Energia, *Carlos Nogueira* da Costa Junior, em palestra proferida em Brasília em setembro de 2013, os bens minerais têm como principais características econômicas: a) cadeias produtivas associadas a mercado interno e/ou externo; b) preço diferenciado em função da abundancia e/ou raridade na natureza, crescimento e/ou redução de consumo; c) atividade produtiva de nano a giga empresas, dependendo de condições geológicas, mineralógicas e de mercado; d) a mina pode servir como impulsionadora do desenvolvimento de outras atividades econômicas da região.

O Brasil, no contexto mundial, é um importante produtor de *commodities* minerais,

destacando-se: nióbio, ferro, manganês, alumínio, tântalo, grafita, amianto, caulim, vermiculita, mica e magnesita; o país é autossuficiente em calcário, cromo, diamante, titânio, ouro talco e níquel. É importador de fosfatos, cobre, zinco, tungstênio, e tem grande dependência externa de potássio, enxofre, carvão metalúrgico e terras raras. O Brasil produz cerca de 70 bens minerais, e o valor de sua produção mineral atingiu cerca de US\$ 41 bilhões em 2012. De acordo com o Informe Mineral, publicação semestral do Departamento Nacional de Produção Mineral (DNPM), na sua edição de julho/agosto de 2012, a distribuição das substâncias minerais em valores percentuais na produção brasileira mostra grande predominância do ferro.

O Brasil está entre os países com maior potencial de investimento em mineração em curto e médio prazo. Face à expressiva presença dos produtos minerais na balança comercial, tanto na exportação como na importação, à crescente consciência da importância do conhecimento geológico para a descoberta de jazidas, à importância da agregação de valor aos minerais e ao planejamento das ações públicas e privadas para o setor, o lançamento do Plano Nacional de Mineração (PNM 2030) teve como meta central dotar o Brasil de um planejamento de médio prazo para o setor, alicerçado por um planejamento com diretrizes e metas para assegurar hoje e no futuro um setor mineral que sirva aos interesses do povo brasileiro.

Como minerais estratégicos no âmbito do PNM 2030, destacam-se: potássio e carvão metalúrgico (bens de que o Brasil depende e importa), lítio e terras raras (minerais cuja demanda deverá se expandir nas próximas décadas). O Brasil, apesar do grande território e das vastas reservas



minerais que possui, tem respondido por pouco mais de 10% dos investimentos em pesquisa mineral na América Latina. Além disso, a participação de apenas 3% no total de investimentos globais do setor confirma que o desenvolvimento do País nessa área está

muito aquém de suas potencialidades.

Não é raro que temas relativos à exploração mineral no Brasil sejam abordados na Revista de Química Industrial. Particularmente, a descrição de jazidas que viriam a ser exploradas mais adiante em escala comercial é uma das marcas desta Revista em seus primeiros 30 anos de existência. É um segmento que oferece muitas oportunidades aos profissionais da área química, tanto em pesquisa e desenvolvimento, como na área de produção. Para ilustrar o alcance da Política Mineral do Brasil, convidamos Humberto Gracher Riella, Professor Titular do Depto. de Engenharia Química e Engenharia de Alimentos da Universidade Federal de Santa Catarina, Pesquisador Nível 1 do CNPq e Supervisor do LABMAC - Laboratório de Materiais e Corrosão -, para dar um panorama geral dessa Política aos leitores da RQI.

O Brasil é um país privilegiado quando o assunto é a disponibilidade de recursos minerais, porque tem um imenso território com uma formação rochosa antiga. A grande extensão territorial, a localização geográfica e sua formação geológica criaram condições para que o país apresente uma ampla oferta de diversos minérios e minerais. Convém salientar que, mineral é uma substância homogênea, de composição inorgânica definida e que surge naturalmente na crosta terrestre. Os minérios, nada mais são que minerais de grande

valor comercial. Entre eles estão: a magnetita, a hematita e a pirita (minérios de ferro), a bauxita(minério de alumínio) e a casseterita (minério de estanho).

Entende-se por mineração todos os processos e atividades industriais que têm por finalidade a extração de substâncias minerais do solo, a partir da perfuração ou contato com áreas de depósitos ou massas minerais das mesmas. A indústria de **mineração no Brasil** atrai investimentos e é um retorno financeiro garantido, desde que bem explorado. Atualmente, pode-se dizer que a mineração no Brasil produz e comercializa para todo tipo de indústria que possa fazer o uso de um montante de aproximadamente 70 minerais, sendo 21 tipos de metais, 4 tipos de combustíveis fosseis e 45 tipos de minerais industriais.

No Brasil, os primeiros registros remontam ao século XVI logo após a colonização portuguesa, e entre os primeiros minérios extraídos no território brasileiro, pode-se destacar o **ouro**, **o diamante**, **a prata e o ferro**.

A mineração ocupa importante posição na economia brasileira, especialmente no que se refere às exportações. O Brasil possui consideráveis reservas de minério e ocupa papel de destaque nas exportações de minério de ferro, de nióbio, de manganês e de bauxita.

Atualmente a mineração no Brasil é a atividade responsável por quase 5% do PIB (Produto Interno Bruto) nacional e é capaz de oferecer produtos que são amplamente utilizados em indústrias bem diversificadas, tais como metalúrgicas, de fertilizantes e principalmente, petroquímicas. O evidente potencial na mineração do Brasil, fundamenta a passagem de um país emergente para desenvolvido, cuja expectativa que está muito atrelada ao crescimento do ramo de mineração. É importante estar atento ao que acontece na mineração, já que reflete em nosso cotidiano político e econômico, da mesma forma

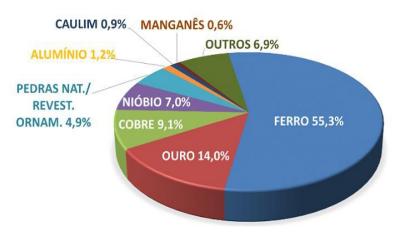


Figura 1:Distribuição das substâncias minerais em valores percentuais na produção brasileira, de acordo com o DNPM/MDIC (1º semestre de 2016)



Figura 2: Mineral quartzo granulado (3- 6 mm) de elevada pureza (>99,9%)

com que traz consigo questões ambientais que devem ser avaliadas e ponderadas.

Além disso, o Brasil detém as maiores reservas de nióbio, que responde por mais de 90% das reservas mundiais, o país tem mais da metade das reservas mundiais de barita e grafite natural. Os minérios de níquel, de estanho e de ferro também têm uma participação significativa em relação às reservas mundiais. Ressalta-se ainda que o Brasil

detém as maiores reservas mundiais do mineral de quartzo, em blocos e granulado, conforme apresentado na Figura 1. Porém, como muitas das empresas operam no regime de garimpo e de forma muito rudimentar, elas não têm base tecnológica para agregar valor e explorar toda a potencialidade de uso do mineral.

O Brasil apesar de ser o detentor de 95% das reservas mundiais, o que equivale a 78 milhões de toneladas, é dependente de produtos de quartzo manufaturado, tais

como: cristais piezelétricos montados e suas partes, silício metálico grau solar e eletrônico e fibras óticas, produzidos a partir do mineral quartzo beneficiado.

Com ressalvas para alguns minérios e minerais, que são adequadamente processados visando elevar sua pureza e consequentemente a concentração, pode-se certamente afirmar que o Brasil é um dos grandes exportadores de commodities como é o continente africano, com



LABMAC/UFSC

relação aos minérios bauxita, bentonita, fluorita carvão mineral. Portanto, apesar do Brasil possuir tantos recursos e riquezas minerais, o processo de transformação e de produção desses recursos fica sob controle de grandes empresas multinacionais estrangeiras, como por exemplo a exploração do titânio.

Como destaque da produção mineral no Brasil, em relação ao mercado mundial, os mais representativos são:

- Minérios de ferro
- Nióbio (maior produtor mundial)
- Minérios de alumínio
- Amianto (crisotila)
- Bentonita
- Vermiculita
- Talco

Seja por não possuir grandes jazidas ou por não ter exploração ou produção insuficiente para atender a demanda do mercado interno, o Brasil possui carência ou dependência externa dos seguintes minerais:

- Carvão metalúrgico
- Fosfato
- Potássio,
- Enxofre
- Chumbo
- Fluorita
- Tungstênio
- Prata

Em relação à origem das importações nacionais, tem-se o Canadá e Rússia como os principais fornecedores de potássio, principalmente para a área de fertilizantes. Chile e Estados Unidos, por sua vez, respondem, respectivamente, pelo segundo e terceiro lugar no ranking dos países de origem das importações brasileiras de minérios. O Chile como principal fornecedor de minério de cobre, os Estados Unidos como o principal país de origem das importações brasileiras de carvão.

Embora o Brasil possua uma expressiva variedade e quantidade de recursos minerais, o

aproveitamento destes sofre prejuízo em determinadas regiões em função da escassez de tecnologia e da falta de logística para exploração comercial destes recursos visando a exportação e até comercialização interna no país. Nesses locais, região norte e nordeste do Brasil é significativa a exploração rudimentar dos garimpos irregulares. O pouco desenvolvimento tecnológico industrial de mineração, tanto para a exploração, quanto para a utilização, faz com que estes recursos sejam vendidos para o mercado internacional a baixos preços, tais como, minério de manganês e mineral de quartzo. O desenvolvimento da jazida mineral é a área mais carente em tecnologia, onde pode-se considerar que cerca de 1% das minas estudadas resultam em comercialização. O histórico da descoberta dos depósitos até a exploração comercial geralmente atinge cerca de 10 anos ou mais, dependendo da região no Brasil. Com algumas exceções o desenvolvimento das jazidas carece de sondagem e acompanhamento geológico na frente de lavra. Análises químicas são limitadas aos minerais mais importantes e aos contaminantes que penalizam o preço, por exemplo o teor de fósforo elevado, em torno de 1%, no minério de ferro ou manganês praticamente inviabiliza a exploração comercial para o setor siderúrgico. Pouco esforço técnico ou econômico é feito em relação a potenciais subprodutos que poderiam ser obtidos da lavra. O minerador formal alega que a competição da lavra informal prejudica o preço, margem e qualidade, pois não existe incentivos a melhora do bem mineral já que a competição é no preço.

Países como a Austrália, a Índia e a África do Sul, são exemplos de como alguns países têm políticas de incentivo ao minerador que refletem diretamente na participação do Produto Mineral Bruto no PIB. Como objetivo de minimizar estas carências recomenda-se a criação de projeto de "Conhecimento Estratégico do Distrito Mineiro" - coordenado pelo DNPM.

Apesar do grande número de centros

tecnológicos espalhados pelo Brasil, como o Centro de Tecnologia Mineral (CETEM/RJ), Instituto de Pesquisas Tecnológicas (IPT/SP), Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares (IPEN/SP), Parque de Ciência e Tecnologia da Universidade de São Paulo (CIENTEC/SP), CEPED, CNCT, Centro de Desenvolvimento da Tecnologia Nuclear (CDTN/MG), Fundação Núcleo de Tecnologia Industrial do Ceará (NUTEC/CE) e outros, estes não são vistos como centro de referência pelos mineradores. A utilização destes centros se limitam a testes de laboratório, esporádicos, e sem conceito de desenvolvimento de aplicativos de produtos. A justificativa dada pela não utilização, é o custo elevado, o longo prazo de entrega de serviços e principalmente a falta de incentivos para o desenvolvimento de novos aplicativos. Um exemplo de aliança entre transformadores de matéria-prima e centro de tecnologia foi observada na Fundação ParcTec de São Carlos, onde existe parceria na área de cerâmicas da região de São Claro.

Aproximadamente 85% das minas brasileiras são registradas como produtoras de não metálicos, tais como: talco, com uma produção de 5% do mundo, caulim onde o Brasil possui reservas de boa qualidade para indústria de papel, mas a produção mundial de caulim beneficiado é dominada pelos Estados Unidos e Reino Unido. Barita é o mineral que mais sofre concorrência externa já que é dominada pela China em volume de produção, cerca de 45% e de reservas 31%. A bentonita tem aplicativos específicos para a siderurgia, fertilizantes e ração animal, mas o mercado é dominado pelos Estados Unidos e Argentina, embora que no nordeste do Brasil existe o mineral bentonita de ótima qualidade beneficiado. A vermiculita se destaca como o produto de maior futuro em aplicativos já existentes no Brasil, mas principalmente a crescente demanda nos países desenvolvidos, devido a sua capacidade de substituir o asbesto e os aplicativos na agricultura. Nossa reserva oficial é cerca de 8% da produção mundial, mas podem ser expandidas já que no Brasil existem uma grande ocorrência de carbonatitos, que é a grande fonte de vermiculita. Nossa produção é 4% da produção mundial, mas o mercado está concentrado em poucos fornecedores.

Sendo considerada como uma atividade extremamente lucrativa, a mineração recebeu muitos investimentos, sobretudo de empresas estrangeiras, para viabilizar a ampla e completa exploração dos minérios, com destaque no território nacional, para o **minério de ferro**, estando entre os cinco maiores produtores mundiais. Entre os principais compradores destaca-se a China,com quase metade de toda extração, seguido do Japão, Coréia do Sul, Holanda, Itália e outros de menor porte. A China, que também possui números expressivos no quesito extração e produção do minério de ferro, é uma das maiores compradoras do ferro brasileiro devido à falta de qualidade dos minérios que são retirados. O minério de ferro é explorado, principalmente, em três grandes áreas:

- Quadrilátero Central (Minas Gerais)
- Maciço de Urucum (Mato Grosso do Sul)
- Serra dos Carajás (Pará), onde a extração do minério de ferro é da melhor qualidade em todo globo terrestre.

As maiores empresas extratoras e produtoras do minério de ferro no Brasil são:

- Vale, Figura 3, responsável por 80% da produção nacional;
- Samarco, com pouco mais de 6%;
- CSN (Companhia Siderúrgica Nacional), com mais de 5%;
- MMX (Mineração e Metálicos) com aproximadamente 2%;
- Usiminas com menos de 2%.

A **Bauxita**, Figura 4, é outro mineral importante para o Brasil na produção de alumínio metálico e sulfato de alumínio para tratamento de água. O Brasil detém a terceira maior reserva do mundo com as jazidas concentradas na serra do Oriximiná, no



Figura 3: Mineração de ferro. Fonte: Vale



Figura 4: Bauxita in natura

no Pará e Minas Gerais. As reservas do mineral bauxita em Santa Catarina são de pequeno porte e exploradas para a produção de sulfato de alumínio ferroso para tratamento de água.

O Brasil possui a sexta maior reserva do mundo de **manganês**, sendo exportado em lascas com deferentes concentrações de Mn, variando de 43 a 54% sem qualquer beneficiamento, para os Estados Unidos, França, Alemanha, Japão e China que não possuem reservas.

O **cobre** é um dos metais mais consumidos no mundo, ultrapassado apenas pelo ferro e alumínio. As reservas de cobre estão no Chile com 27% e nos Estados Unidos com 15%, enquanto que o Brasil possui apenas 2% das reservas mundiais e a produção é da ordem de 0,5%.

A Vale é a maior produtora global de **níquel**, um dos metais mais versáteis do mundo, utilizado em diversas aplicações.

A exploração de minerais na mina de Guajú,

situada no município de Mataraca, Paraíba, é considerada a mais importante na exploração do minério de titânio para a produção de TiO_2 pela empresa Cristal, uma multinacional. Os principais minerais de interesse comercial que são extraídos da mina do Guajú são: Ilmenita (Fe/Ti), zirconita (Zr) e cianita matéria-prima para refratários. A Ilmenita é o minério mais importante do ponto de vista comercial, porque visa a produção de TiO_2 com vasta aplicação comercial: em tintas, plásticos, cosméticos, borracha e cerâmica.

A utilização do metal **zinco** corresponde a 49% do consumi mundial, sendo o Brasil o décimo segundo maior produtor de zinco, representando 1,8% da produção mundial. Os principais produtores por estado são: Minas Gerais (83%), Rio Grande do Sul (9%), Bahia (3%) Paraná (3%) e Pará (1%).

O **ouro** atende o mercado interno e externo, mas devido sua extração e comércio ilegais deste mineral, é difícil chegar-se a um registro preciso de produção e ou exploração. O Brasil participa com números oficiais de 4% das reservas e 2% da produção mundial.

O metal **nióbio** é alvo de cobiça mundial, mas para sorte do Brasil as reservas contemplam 98% das mundiais. O Brasil corresponde a mais de 90% da comercialização mundial de **nióbio**, seguido por Canadá e Austrália. As maiores jazidas estão localizadas em Minas Gerais (75%), Amazonas (21%) e em Goiás (3%).

Um relatório realizado pelo Plano Nacional de Mineração 2030 relata que, atualmente o país explora pelo menos 55 minerais, o que corresponde a 5% de toda produção mundial e é líder global na produção de nióbio. Devido a este fato existem várias teorias sobre a negociação desse metal com outros países. Especulações indicam que o preço comercializado para exportação é ínfimo e que as reservas estão sendo "dilapidadas" e que, por não regulamentar a comercialização e controlar o preço de venda, o Brasil estaria perdendo bilhões de dólares. Outro fator relevante, é que a CBMM (Companhia Brasileira de Metalurgia e Mineração), considerada a maior produtora de nióbio do mundo, vendeu parte de suas ações para companhias asiáticas.

Os Engenheiros Químicos têm enormes chances nas empresas de mineração que aplicam as **Tecnologias de Mineração**, tais como, fenômenos de transporte aplicados ao tratamento de minérios de ferro, zinco, nióbio, titânio e outros, flotação aniônica direta de vários constituintes e metalurgia extrativa. Extração de níquel e cobalto de minérios lateríticos, com ênfase em minérios a base de silício:

- Emprego de rotas de extração alternativas aos processos mais utilizados na atualidade (hidro e piro metalúrgicos);
- Estudos de purificação de licores de lixiviação, visando à remoção de alumínio, cromo e ferro por alternativas que não provoquem a perda dos valores de interesse (Ni e Co);
- Estudos em aspectos da eletro-recuperação de cobalto.

No processamento de minérios não metálicos, tais como, caulim, feldspato, fluorita, nephelina e outros também o mercado de trabalho para os Engenheiros Químicos em competição com Engenheiros de Minas está em alta.

Ressaltamos a chamada CNPq Nr.10/2018, encerrada em 23/05/2018 visando especificamente a Formação de Recursos Humanos no Setor de

mineração com o objetivo de promover e desenvolver ações que visem o fomento de bolsas no setor de mineração através da seleção de bolsistas e de agregação de especialistas que contribuam para a execução de projetos de pesquisa ou de desenvolvimento de tecnologia do setor minerometalúrgico.

Com ênfase aos principais problemas das **questões ambientais na mineração brasileira**, de forma inânime, os mineradores e especialistas consideram que a legislação ambiental é extensa e avançada, porém conflitante, pois sua aplicabilidade deixa muito a desejar por uma séria de fatores:

- A legislação ambiental é relativamente recente e, em muitos caos, conflita com a legislação mineral, que data de 1967;
- O CONAMA Conselho Nacional de Meio Ambiente, vem estabelecendo resoluções aumentando as restrições à atividade mineral;
- Os órgãos estaduais, responsáveis pelo licenciamento e fiscalização dos empreendimentos minerais, salvo raríssimas exceções, não dispõem de estrutura e nem de profissionais qualificados em meio ambiente e mineração.

Contudo, o minerador brasileiro tem feito esforços para acompanhar as demandas atuais em torno da questão ambiental e a mineração. Mas sabe-se que várias atividades antrópicas vêm criando problemas ambientais, no uso do solo e subsolo além das atividades de mineração, entre as quais se destacam: urbanização desordenada, agricultura, pecuária e construção de barragens visando a geração de hidroeletrecidade, uso não controlado de água subterrânea e gerenciamento de resíduos.

Outro fator relevante consiste na delimitação das fronteiras de responsabilidade entre as três esferas de poder (União, Estado e Município), com vistas à área de competência para a atividade mineral. Existem claramente incompatibilidades entre as disposições das leis de zoneamento

municipais e a vocação mineral das zonas estabelecidas na legislação municipal de uso e ocupação do solo.

Em entrevista concedida ao informativo CETEM ano III, nº.3, o Eng. Gildo Sá, Diretor do CETEM afirma: "Quanto à relação entre mineração e meio ambiente julgo imprescindível um permanente entrosamento entre o órgão normalizador da mineração e os órgão ambientais fiscalizadores. A solução da questão passa por estudos que contemplam os benefícios e problemas gerados pela mineração versus os benefícios decorrentes da mineração".

Analisando o controle ambiental da mineração no Brasil em relação a outros no tratamento das concessões minerais e no gerenciamento ambiental dessas atividades. No Brasil e na África do Sul, o Governo Central possui órgãos federais concedentes enquanto nos demais países os Estados e Províncias têm o controle da atividade mineral. Com relação a gestão ambiental na mineração, é bem variada a atuação governamental. Na áfrica do Sul, o Governo Central estabelece normas gerais através do Departamento de Negócios Ambientais e Turismo. Na Austrália, o Ministério de Recursos Naturais e o Ministério do Meio Ambiente trabalham em conjunto nas questões de controle ambiental na mineração.

Finalmente, ressalta-se que a humanidade certamente quer manter um nível elevado de conforto material, sendo então inevitável a atividade mineral. No entanto, essa é possivelmente a atividade econômica com menos cuidados com problemas ambientais. Entretanto, algumas mineradoras vêm progredindo no quesito ambiental, com processo mais limpos e desenvolvendo tecnologias para recuperar os resíduos dispostos em barragens.

Na atual conjuntura pela qual passa o Brasil, nada mais urgente e necessário, especificamente tendo-se em vista a escorchante carga tributária que vitimiza o setor mineral e industrial, seria por meio da inovação tecnológica liberar incentivos fiscais visando estimular o crescimento das empresas brasileiras comprometidas com a sustentabilidade ambiental resultando na diminuição dos impactos ambientais severos.

Antes de comentar sobre o Marco Regulatório da Mineração, deve-se salientar que medidas mitigadoras é um termo utilizado em segurança do trabalho e meio ambiente, quando são levantados os perigos para uma determinada atividade ou situação.

O Marco regulatório da Mineração substitui o atual Código de Mineração, Decreto – Lei nº. 227, de 28 de fevereiro de 1967. Pelo atual Código de Mineração, qualquer interessado pode pleitear uma "Autorização de Pesquisa" em uma determinada área. A autorização de pesquisa é atribuída ao primeiro interessado cujo requerimento tenha por objeto a área considerada livre, isto é, a área que não seja objeto de nenhum outro requerimento de data anterior. Somente o titular da autorização de pesquisa pode requerer o direito de explorar minerais naquela área, ou seja, a concessão de lavra. Resumidamente, o direito de propriedade significa que quem requer primeiro, atendidos certos requisitos burocráticos, ganha o título do minerário. Trata-se, portanto, de um regime de "Autorização e Concessão".

O novo Marco Regulatório da Mineração substitui tal regime pelo sistema de licitação para áreas selecionadas pelo Conselho Nacional de Pesquisa Mineral (CNPM) e pela chamada pública quando o particular formalizar interesse nas áreas restantes.

A concessão precedida pela licitação ou chamada pública significa o fim do direito de prioridade, adotado pela legislação mineraria da maioria dos países mineradores, como Austrália, Canadá, México, Chile, Peru, entre outros, devido ao incentivo que representa ao empreendedorismo no setor mineral.

Como a prospecção mineral é uma atividade

de baixo índice de sucesso, da ordem de 0,1%, ou seja, de cada 1000 trabalhos de prospecção mineral, somente 1% resulta em uma descoberta comercial, só a expectativa de encontrar uma jazida de grande porte, e lucrar com sua produção, motiva as empresas a enfrentar empreitadas de tão alto risco.

Para a nova política pública foi criado o Conselho Nacional de Política Mineral (CNPM), órgão de assessoramento da Presidência da República para a formulação da política mineral, que terá por incumbência propor medidas para o planejamento da atividade de mineração e o bom aproveitamento dos recursos minerais, além de propor diretrizes para o estímulo à pesquisa, inovação e agregação de valor na cadeia produtiva dos bens minerais. Irá apontar, ademais, as áreas sujeitas ao regime de concessão precedida de licitação e propor as rodadas de licitações e propor diretrizes, requisitos e critérios para a emissão de Autorização de Exploração de Recursos Minerais.

O novo Marco Regulatório de Mineração prevê importantes alterações nos procedimentos e na regulação da atividade. Para a execução da política setorial, a atribuição será transferida do Ministério de Minas e Energia para o CNPM. As atividades de regulação e fiscalização ficarão a cargo da ANM, hoje de competência do retrógrado Departamento Nacional de Produção Mineral (DNPM). A competência para arrecadação da Compensação Financeira pela Exploração de Recursos Minerais (CFEM) passará do DNPM para a ANM.

Outro fato importante no novo Marco Regulatório da Mineração se refere à rentabilidade líquida das empresas mineradoras, ficando evidente no texto a intenção do governo em aumentar a participação nas receitas do setor de mineração em detrimento do lucro privado. Busca-se em especial, o aumento da receita dos estados e municípios advinhas da Compensação Financeira pela Exploração de Recursos (CFEM). A base de cálculo da CEFEM deixa de ser faturamento líquido e passa

a ser a receita bruta da venda, deduzidos os tributos efetivamente pagos incidentes sobre a comercialização, e a alíquota máxima sobe de 3 para 4%. Outro ponto importante é o rearranjo da CFEM. Antes, os recursos eram divididos entre Município minerador com 65%, Estado 23% e União 12%. A nova distribuição da CEFEM consiste em 60% para o Município, 20% para o Estado e 10% para a União.

Evidentemente que o fim da prioridade é um poderoso desestímulo à iniciativa de buscar áreas minerais promissoras. O setor mineral perecerá sem a descoberta de novas jazidas, pois os recursos minerais são esgotáveis e, assim novas reservas têm que ser descobertas para repor as reservas exauridas. Os sistemas concorrenciais para acesso aos títulos minerários só se justificam quando há disponibilidade de informações detalhadas, de forma a permitir aos concorrentes fazer propostas bem fundadas.

Considerando o futuro da mineração, devese considerar que os minerais e os metais constituem uma importante contribuição para a economia mundial e para as sociedades modernas. As indústrias de mineração são importantes para todos os países com recursos minerais, como o Brasil, país em desenvolvimento. A mineração oferece a oportunidade de base ampla, de reduzir a pobreza e de ajudar os países com recursos minerais abundantes. A consolidação da mineração no futuro certamente deverá considerar que as atividades maximizem os benefícios sociais e econômicos, bem como efetivamente enfrentar os impactos ambientais e sociais negativos. Quanto a isto, deve-se reconhecer que os governos demandam forte capacidade para desenvolver, administrar e regular suas indústrias de mineração no interesse do desenvolvimento sustentável. Destaca-se a importância de estruturas legais e regulatórias, de políticas e práticas sólidas e efetivas para a mineração trazendo benefícios econômicos e sociais incluindo salvaguardas que reduzem os impactos ambientais, bem como conservem a

biodiversidade e os ecossistemas, inclusive no pós-fechamento das minas.

O Laboratório de Materiais e
Corrosão (LABMAC) do Departamento de
Engenharia Química e Engenharia de
Alimentos da Universidade Federal em
Santa Catarina atua na área de mineração
em parceria com o Instituto de Psquisas
Energéticas e Nucleares-SP (IPEN),
UNISUL(Universidade do Sul
C a t a r i n e n s e) e m
Tubarão/SC,SATC/SC,CDTN/MG,
Engenharia Química da Universidade
de São Paulo(USP) entre outros
visando desenvolver produtos

comerciais a partir de resíduos industriais e resultantes da transformação de minérios. No setor de carvão mineral, o grupo de pesquisa desenvolveu vários produtos a partir da Cinza Pesada resultante da queima do carvão mineral em termelétricas:

- Vidros para embalagens de cosméticos e vitro cerâmico, Figura 5;
- Materiais Cerâmicos para construção Civil, Figura 6;





embalagens

vitrocerâmicos

Figura 5: Vidros



Figura 6: Materiais cerâmicos

- Zeólitas X, A, 4A e P1 para diferentes aplicações comerciais, tais como, X para captura de CO₂,4A e P1 para adsorção de metais pesados em efluentes industriais;
- Geopolímeros, Figura 7, com propriedades cimentícias é considerado um polímero inorgânico.

Propriedades:

Resistência ao fogo;

Resistência química;

Excelente adesão;

Rápido endurecimento;

Acabamentos duráveis;

Durabilidade.

O potencial de aplicação é muito abrangente, incluindo :

Estruturas pré-fundidas;

Produtos e pavimento de concreto;

Imobilização de resíduos tóxicos perigosos e radioativos; Formam cerâmicas refratárias e ferramentas estruturais avançadas.

Os geopolímeros podem também oferecer soluções para problemas como nivelamento de superfícies de lixeiras, construção de base impermeabilizada de aterros de resíduos, etc.

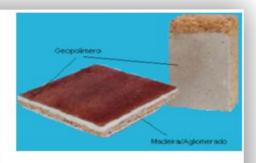




Figura 7: Geopolímeros

O LABMAC tem desenvolvido vários processos com inovação tecnológica em minérios não metálico e metalicos:

- Minério Bauxita de Otacílio Costa/SC visando a redução do teor de ferro para produção de sulfato de alumínio isento de ferro para tratamento de água e refrat´rios como bauxita calcinada;
- Minério Feldspato de Lages/SC visando reduzir o teor de ferro e quartzo para exportação na fabricação de cristais;
- Minério feldspato Potássico para aplicação em feritilizantes, com baixo teor de quartzo processado por flotação para elevar o teor de potássio visando concorrer com o produto importado KCI da Rússia;
- Minério de manganês objetivando desenvolver um processo químico para produção de sulfato de manganês;
- Produção de silício metálico grau solar a partir de quartzo granulado de minas Gerais (2- 5 mm) através da rota carbotémica, Figura 8.

A mineração brasileira necessita de inovação tecnológica objetivado reduzir a importação de produtos minerais, principalmente para o setor de fertilizantes e assim dismistificar o termo "país de commodities no setor mineral".

Ressaltamos que incentivos fiscais para inovação tecnológica no processamento de minerais e reaproveitamentos dos resíduos gerados na transformação dos minerais em produtos, não significa ajudar o setor sem compromisso, mas sim, ampliar a capacidade econômica, social do setor minerário em conformidade com a sustentabilidade.

Notas do editor:

- → O Prof. Humberto Gracher Riella pode ser contatado pelo correio eletrônico: humberto.riella@ufsc.br
- → O portal do LABMAC é http://labmac.ufsc.br/
- \rightarrow O Currículo Lattes do entrevistado pode ser a c e s s a d o p e l o l i n k : http://lattes.cnpq.br/0055080134892269.



Figura 8: Produção de silíco metalico grau solar via quartzo granulado

Há 75 anos atrás (Ano 12, número 134, junho de 1943)

CAPACIDADE DE ADAPTAÇÃO

(por Jayme da Nóbrega Santa Rosa, Editor)

Nunca talvez na história da nossa indústria tenhamos tido uma fase tão acidentada como a atual, em que se torna mister seguir uma política de trabalho estritamente de emergência. Desejamos e podemos desenvolver a produção fabril; mas os meios de que nos estamos servindo para alcançar os fins visados resultam em grande parte da habilidade de adaptação, admiravelmente plástica e oportuna, própria da nossa índole. Com a falta de certas matérias-primas, modificaram-se processos clássicos de manufatura. Escasseando alguns produtos de importação, surgiram os similares nacionais. Não sendo possível mandar vir de fora determinados tipos de máquinas e aparelhos, começou a espalharse pelas nossas cidades fabris a indústria mecânica. Nessa faina de trabalhar de acôrdo com as circunstâncias, passou-se a encarar o elemento humano como fator básico de êxito. Desenvolveu-se o treino individual, criaram-se escolas profissionais, buscou-se o técnico onde porventura estivesse. (...)



A INDÚSTRIA DA DESTILAÇÃO SÊCA DE MADEIRA ENTRE NÓS

(por Reinaldo Spitzner e Pedro Chiocarello, Curitiba - Paraná)

O carvão vegetal, combustível sólido que já há tempo, em diversos países do mundo, tem sido estudado e aproveitado com muito esforço e dedicação, para torná-lo um substituto da gasolina em motores de tração, principalmente em caminhões, também entre nós já está em franco uso, afim de mitigar a falta do valioso combustível líquido, cuja conseqüência é a ameaça da paralização total dos nossos transportes. (...) Já existe entre nós vários tipos de gasogênios, que nada deixarão a desejar em face dos melhores tipos europeus, seja pela técnica de construção (devendo-se elogiar a simplicidade), seja pela eficiência de funcionamento na majoria deles. Efetivamente. nós brasileiros mais uma vez demonstramos a nossa grande capacidade criadora, realizada à margem de uma técnica acentuada. (...)

SOBRE A DEFICIÊNCIA DE CAFEÍNA

Como resultado da atual guerra européia, houve uma diminuição da importação de produtos farmacêuticos, entre êles, a cafeína. (...) A cafeína pode ser produzida sintèticamente do ácido úrico ou pode ser obtida de certas plantas como chá, café, cacau, mate, guaraná e cola. (...) O café contém 1 a 1,5% de cafeína; na base de um consumo de 50 toneladas de cafeína por ano, aproximadamente, 4.500 toneladas de grãos seriam necessárias. (...) A cafeína ocorre nos grãos principalmente como cafeína clorogenato de potássio, do qual pode ser libertada por meio de álcali. Soda é prejudicial à cafeína, mas cal, magnésia e amônia, nesta ordem, são menos prejudiciais. (...) O cacau contém uma pequena quantidade de cafeína (0,15%), mas contém de 1 a 3% de teobromina na amêndoa e 0,8% na casca. (...)

Há 50 anos atrás (Ano 37, número 434, junho de 1968)



PRODUÇÃO BRASILEIRA DE ÓLEOS E GORDURAS VEGETAIS

(por Jayme da Nóbrega Santa Rosa, Editor)

A produção de óleos e gorduras vegetais no Brasil chegou em 1966 ao nível de 587.414 toneladas. Neste grupo geral se incluem os óleos essenciais e os de composição particular, como o líquido da casca da castanha de caju. (...) No ano de 1966 o óleo obtido em maior quantidade foi o de semente de algodão, com a massa de 130.568 t. Em seguida, colocaram-se o de amendoim, com 122.276 t, e o de mamona, com 104.196 t. (...) Na classe dos óleos alimentícios, merece citação especial o de soja, cuja produção subiu extraordinàriamente de 1964 para 1966, passando de 34.129 t para 62.488 t. Entre os óleos industriais, também foi apreciável a produção do óleo de palma ou dendê, que no mesmo período pulou de 6.429 t para 10.980 t. Na categoria dos óleos e gorduras de palmeiras, o babaçu manteve a supremacia. Em 1966 extraíram-se 66.614 t. (...) Na classe dos óleos essenciais, aparecem notadamente citados 16 produtos. Os que avultam na produção, em peso, são os óleos de hortelã, sassafrás e pau-rosa. (...) A indústria de óleos glicerídicos e gorduras vegetais tem condições para amplo desenvolvimento no país. E há mercados com notável capacidade de consumo, tanto no interior como no exterior.

O CRESCIMENTO DAS FIRMAS AMERICANAS QUE SE ALICERÇAM NA PESQUISA CIENTÍFICA

(A Química é a ciência básica da investigação científica)

(...) A pesquisa é a procura de novas e boas soluções para problemas industriais. Buscam-se processos mais eficientes e econômicos, especialmente adaptados às circunstâncias existentes; por exemplo, à abundância de certas matérias-primas. De outra parte, trata-se de descobrir novos empregos para produtos que podem ser obtidos em alta escala, em condições satisfatórias. O desenvolvimento são os meios que se empregam para expandir, em forma de indústria, os achados, as descobertas. Neste ponto, surgem inúmeras dificuldades de ordem técnica, que é preciso vencer. A experimentação apenas em laboratório não resolve os embaraços. Por isso se recorre á experimentação em fábricas-pilôto, quando se acompanham as fases de fabricação em escala semi-industrial, e se fazem as correções imprescindíveis. (...) Os laboratórios devem ser muito bem equipados com aparelhos e instrumentos, e o ambiente de trabalho e de vida social deve ser o mais agradável possível, para que haja produtividade. (...) São recrutados químicos de todas as modalidades (...). Tem sido comum, e continuará sendo que, ao investigar-se determinada questão, visando um alvo certo, se obtenham no caminho inúmeras soluções que na verdade não se procuravam. São as descobertas paralelas, muitas vêzes mais importantes que a do objetivo principal. Por esta razão, a pesquisa científica oferece tantos resultados práticos, germinativos, insuspeitados. Por isso, a indústria tanto se diversifica, se expande. A diversificação é mesmo uma característica da indústria dos EUA. (...)

Há 25 anos atrás (Ano 61, número 692, abril a junho de 1993)

PATENTES ÁNA INDÚSTRIA QUÍMICO-FARMACÊUTICA

(por Thais Cavalcante)

Votada no mês de maio [1993] pelos representantes da sociedade brasileira que ocupam as duas casas do Congresso Nacional, a versão final do projeto de lei sobre propriedade intelectual e industrial acabou desagradando a boa parte dos interessados na matéria. Foi difícil caminhar para um consenso, principalmente pela diversidade de grupos representados - cada um empenhado na defesa de interesses às vezes tão díspares quanto distantes da realidade e das aspirações da sociedade brasileira. (...)



(por Wilson Milfont Jr.)

A produção de catalisadores de pirólise de frações de petróleo e dos conversores para veículos automotivos deram expressão econômica ao setor. O atendimento do grande mercado químico e petroquímico continua, porém, dependente de importações.

Uma característica inerente à indústria de catalisadores é a grande diversidade destes, quer na constituição e desempenho químico, ou nas propriedade físicas e físico-químicas. A classe compreende milhares de produtos, muito contendo metais nobres, (...) outros não tão nobres, (...), óxidos e sais orgânicos e inorgânicos, compostos orgânicos e organometálicos, produtos bioquímicos como enzimas, carbono elementar, sílica, alumina e silicatos (...). A demanda de catalisadores no país respondeu em 1992 por um dispêndio da ordem de US\$ 150 milhões, alcançando a oferta interna US\$ 107 milhões. Estes valores representam mais do dobro do mercado estimado para 1990. (...)



CORES E NUANCES DO MERCADO DE CORANTES

(por Thais Cavalcante)

A especialização e a diversificação das linhas da produto ainda são importantes requisitos para atuar nos mercados de corantes e pigmentos. Embora com preços declinantes e altamente dependentes da importação de intermediários, o setor se mantém forte e moderno no Brasil. Sob a designação de corantes e pigmentos estão incluídos os corantes, alvejantes ópticos, pigmentos orgânicos e inorgânicos. A classe dos corantes é a mais numerosa e de maior expressão econômica, compreendendo substâncias solúveis, intensamente coloridas, empregadas para tingir. (...) Os pigmentos, por seu turno, são insolúveis em água e usualmente aplicados por meio de veículos ao material que vão colorir, no qual se depositam. (...) A produção de corantes é dos mais antigos segmentos da indústria química, tendo conhecido sua maior expansão nas décadas de 30 a 50. (...)

Há 1 ano atrás (Ano 85, número 755, 2º trimestre de 2017)



EDITORIAL

(por Júlio Carlos Afonso, Editor)

De vez em quando se abordam neste Editorial aspectos históricos envolvendo a nossa Associação Brasileira de Química. Este número da RQI dá particular destaque ao passado da ABQ: afora a tradicional seção "Aconteceu na RQI", um sumário do primeiro CBQ ocorrido em Porto Alegre (em 1947) e a entrada no portal da Associação de toda a coleção completa dos Anais da ABQ e dos números da RQI editados entre 1949 e 1959 são passados em revista. O leitor pode ainda apreciar uma tabela contendo todos os CBQs realizados desde 1922 em nossa matéria sobre os eventos da ABQ para este ano. (...)

ETANOL DE 2a GERAÇÃO: UM DESAFIO DE P & D PARA O BRASIL

(por Elba Pinto da Silva Bon, Viridiana Santana Ferreira Leitão, e Ayla Sant'Ana da Silva)

O etanol de segunda geração (etanol 2G), também chamado de etanol celulósico, pode ser definido como o etanol obtido a partir da fermentação de açúcares provenientes dos polissacarídeos da biomassa lignocelulósica, que é a parede das células vegetais. Em geral, o processo de produção de etanol de segunda geração envolve as seguintes etapas principais: (i) pré-tratamento da biomassa; (ii) hidrólise enzimática do material pré-tratado; (iii) fermentação dos açúcares resultantes da hidrólise e (iv) a destilação do etanol. É importante também que a biomassa seja quimicamente caracterizada (Figura 1). O principal açúcar obtido a partir dos polissacarídeos da biomassa é a glicose (hexose - açúcar de seis carbonos), resultante da hidrólise do polissacarídeo celulose e a xilose e arabinose (pentoses-açúcares de cinco carbonos), e também manose e galactose (hexoses), resultantes da hidrólise da hemicelulose. O principal açúcar resultante da hidrólise da hemicelulose varia de acordo com a origem da biomassa, sendo a xilose em angiospermas, como a cana de açúcar, e a manose como em gimnospermas, não sendo esta, entretanto, uma regra geral. Existe um grande interesse nos estudos que visam aumentar a eficiência das etapas de conversão da celulose em glicose, pois este açúcar é prontamente fermentável a etanol pela levedura Saccharomyces cerevisiae. Neste caso teríamos uma abordagem mais conservadora em relação a atual indústria sucroenergética, onde a produção de etanol de primeira geração (a partir da sacarose contida no caldo da cana) é totalmente baseada na fermentação de hexoses. O aumento da conversão da celulose em glicose pode ser obtido tanto através do melhoramento da etapa de pré-tratamento da biomassa, quanto da etapa de hidrólise enzimática da celulose. Outra área intensamente estudada é a modificação genética da Saccharomyces cerevisiae de forma a se obter leveduras capazes de cofermentar glicose e os açúcares provenientes da hemicelulose, o que aumentaria o rendimento de conversão dos polissacarídeos da biomassa em etanol. Esta possibilidade seria uma novidade em relação ao processo fermentativo atualmente empregado no setor de produção de etanol de primeira geração.(...)

Agenda

Nacionais

II Congresso Brasileiro de Fluidodinâmica Computacional

Rio de Janeiro, RJ, 27 a 29 de junho de 2018 info: http://2018.cbcfd.com.br/br/node/1032

4º Simpósio Nordestino de Química

Mossoró, RN, 25 a 27 de julho de 2018 Info: www.abq.org.br/sinequi Trabalhos: 8 de junho

16º Simpósio Brasileiro de Educação Química - SIMPEQUI

Rio de Janeiro, RJ, 6 a 8 de agosto de 2018 Info: www.abq.org.br/simpequi Trabalhos: 28 de junho

VIII Encontro da Escola Brasileira de Química Verde

Três Lagoas, MS, 3 e 4 de setembro de 2018 Info: www.ms.senai.br Trabalhos: 3 de agosto

1º Encontro Nacional de Hidrotecnologia ENHTEC

Recife, PE, 17 a 19 de setembro de 2018 Info: www.abq.org.br/enhtec Trabalhos: 8 de agosto

58º Congresso Brasileiro de Química CBQ

São Luís, MA, 6 a 9 de novembro de 2018 Info: www.abq.org.br/cbq Trabalhos: 23 de agosto

II SNNB - Simpósio Nacional de Nanobiotecnologia

São Bernardo do Campo, SP, 6 e 7 de dezembro de 2018 info: www.nanobiomrg.com/snnb

Internacionais

World Polymer Congress MACRO18

Cairns Queensland, Australia, 1 a 5 de julho de 2018 info: http://www.macro18.org

1st Brazilian Symposium on Sustainable Chemistry (BSSC)

São Pedro, SP, 1 a 3 de outubro de 2018 Trabalhos: 31 de julho info: https://bssc.faiufscar.com/

33° Congreso Latinoamericano de Química (33-CLAQ)

X Congreso de Ciencias, Tecnología e Innovación Química

Havana, Cuba, 9 a 12 de outubro de 2018 info: http://www.chemistrycuba.com/

XXIX Interamerican Congress of Chemical Engineering Incorporating the 68th Canadian Chemical Engineering Conference

Toronto, Canada, 28 a 31 de outubro de 2018 Info: http://csche2018.ca/

ECSOC-22 - The 22nd International Electronic Conference on Synthetic Organic Chemistry

Pela internet, 1 a 30 de novembro de 2018 info: https://sciforum.net/conference/ecsoc-22

Equilíbrio ácido-base: ácidos fracos na presença de ácidos e bases fortes

Acid-base equilibrium: weak acids in the presence of strong acids and bases

Júlio Carlos Afonso

Instituto de Química, Universidade Federal do Rio de Janeiro
Rio de Janeiro – RJ, Brasil.
julio@iq.ufrj.br

Submetido em 19/12/2017; Versão revisada em 27/03/2018; Aceito em 12/04/2018

Resumo: Este trabalho mostra em esquemas gráficos todas as possibilidades quando quantidades variáveis de base ou ácido forte são adicionadas a uma solução contendo um ácido fraco, incluindo o cálculo do pH em cada situação. São obtidas zonas compostas por misturas binárias (que incluem soluções tampão), delimitadas por fronteiras em que há apenas uma única substância em solução. A adição de ácido forte a uma solução do sal oriundo da neutralização total do ácido fraco permite obter os mesmos resultados, na ordem inversa. Os diversos equilíbrios ácido-base envolvendo ácidos fracos são inter-relacionados, segundo a proporção relativa entre esses ácidos e a quantidade de ácido ou base forte adicionada.

Palavras-chave: equilíbrio ácido-base; ácido fraco; cálculo do pH.

Abstract: This work presents graphical schemes showing all possibilities when variable quantities of strong acids or bases are added to a solution containing a weak acid, including the calculation of pH in each situation. The schemes are composed of zones (binary mixtures, including buffer solutions) and boundaries (there is only one substance in solution). Addition of a strong acid to a solution of the salt coming from the total neutralization of the weak acid gives the same results in reverse order. The various acid-base equilibria involving weak acids are interrelated, depending on the relative proportions of these acids and the amount of strong acid or base added.

Keywords: acid-base equilibrium; weak acid; pH calculation.

INTRODUÇÃO

O equilíbrio ácido-base é um dos quatro equilíbrios fundamentais existentes em meio aquoso (os outros são solubilidade, complexação e oxirrerdução), merecendo destaque nos conteúdos programáticos de química no ensino médio e em disciplinas dos primeiros períodos de cursos de ensino superior. Tal importância dada a esse equilíbrio tem sua razão de ser: ele intervém na grande maioria dos processos bioquímicos que regem a vida, em muitos processos industriais (Gama e Afonso, 2007), em procedimentos de laboratório como titulações ácido-base, precipitação de cátions e abertura de amostras (Vogel, 1981, 2002), na estabilização de solos (correção de acidez Antunes et al., 2009) e em nosso cotidiano: antiácidos estomacais, sucos e refrigerantes (Lima e Afonso, 2009), aditivos alimentares (acidulantes, conservantes etc. - Albuquerque et al., 2012), produtos de higiene pessoal e de limpeza (Barbosa e Silva, 1995), e ainda temas ambientais como a chuva ácida (Mara et al., 2005). Além da própria riqueza e diversidade do tema acido-basicidade, muitos trabalhos vêm investindo no emprego de indicadores naturais (como o repolho roxo) para avaliação do pH de soluções aquosas (Terci e Rossi, 2002; Fatibello-Filho et al., 2006).

A apresentação do equilíbrio ácido-base nos ensinos médio (Marconato et al., 2004) e superior (Silva et al., 2014) envolve um conjunto de tópicos: produto iônico da água (K_w), faixas ácida, neutra e alcalina e definição de pH; constante de ionização de ácidos (K_a), constante de dissociação de bases (K_b), constante de hidrólise de sais (K_h), sais com hidrogênio ionizável (hidrogenossais ou sais ácidos), soluções tampão. Fórmulas que relacionam as constantes de equilíbrio e as espécies participantes são deduzidas ou apresentadas para cada situação acima. A chamada teoria eletrolítica da dissociação de Svante Arrhenius (1859-1927), proposta em sua primeira versão em 1887, e que lhe valeu o Prêmio Nobel de Química em 1903 (Campos e Silva, 1999,

Silva et al, 2014), é ainda muito usada nos ensinos médio e superior porque muitas das reações ácidobase envolvem soluções aquosas. Sob o ponto de vista de Arrhenius, em meio aquoso, a característica da reação entre substâncias com propriedades ácidas e aquelas com propriedades básicas é a formação de água a partir dos íons H₃O⁺ (comumente simplificado como H⁺) e OH⁻ por meio da seguinte equação iônica (Pastre el al., 2012):

$$H_3O^+ + OH^- + H_2O + H_2O$$
 (ou $H^+ + OH^- + H_2O$) (1)

O produto $[H_3O^{\dagger}][OH]$ é chamado produto iônico da água, K_w (Gama e Afonso, 2007). Afora a formação de água, a reação entre substâncias ácidas e básicas produz uma solução contendo íons que não reagiram no processo. Ao evaporar o solvente (a água) obtêm-se uma massa cristalina de alto caráter iônico, os sais (Campos e Silva, 1999; Silva et al., 2014).

Após 25 anos ministrando disciplinas teóricas e experimentais de análise qualitativa para alunos do 1º e 2º período dos cursos de Engenharia Química, Farmácia, Licenciatura em Química, Nutrição, Química e Geologia da Universidade Federal do Rio de Janeiro, percebeu-se que os alunos apresentavam, em maior ou menor grau, duas deficiências relativas ao equilíbrio ácido-base em solução aquosa: a) a aplicação de fórmulas de cálculo do pH sem preocupação com a dedução (interpretação) de tais expressões, levando a erros frequentes nas expressões utilizadas; b) a visão fechada em si de cada tópico do equilíbrio ácidobase, com grande dificuldade de perceber que todos eles são inter-relacionados com base nas várias proporções de reagentes com propriedades ácidas ou básicas que podem ser utilizadas, prejudicando o entendimento dos fenômenos ocorridos quando se altera, por exemplo, o pH de uma solução.

Uma análise de livros de química do ensino médio e de química geral e analítica empregados no ensino superior, publicados nos últimos 30 anos, indicou que, em geral, os tópicos dos equilíbrios

ácido-base eram apresentados de forma individual, com pouca conexão com os demais, especialmente quando pelo menos um dos reagentes (ácido ou base) era fraco.

Considerando a grande importância deste equilíbrio em práticas de laboratório e em inúmeros processos industriais, este trabalho apresenta uma nova proposta, baseada em esquemas gráficos a fim de sintetizar em um único olhar de conjunto os vários tipos de equilíbrio ácido-base envolvendo ácidos fracos. Esse foco se justifica pela grande importância que eles têm na preparação de tampões e em sistemas biológicos e industriais. Esses esquemas incluem a dedução, para cada equilíbrio ácido-base, da fórmula de cálculo do pH. A discussão a ser apresentada na sequência considera os diversos tipos de ácidos fracos conforme o número de hidrogênios ionizáveis.

ÁCIDO MONOPRÓTICO FRACO

A Figura 1 apresenta o esquema para um ácido monoprótico fraco, exemplificado pelo ácido acético (etanoico). O ácido sozinho em solução aquosa constitui um ponto específico dessa figura, representada por um traço vertical, que serve como fronteira entre duas regiões de acidez. Nessa posição, existe o seguinte equilíbrio:

$$CH_3COOH + H_2O \longleftrightarrow CH_3COO^- + H_3O^+$$
 (2)

cuja constante de equilibrio (a constante de ionização do ácido) é expressa por

$$K = K_a = [CH_3COO^-][H_3O^+]/[CH_3COOH]$$
 (3)

Por se tratar de um ácido fraco (K_a < 10^{-3}), a fração do ácido que se ioniza é muito pequena nas concentrações habituais no laboratório (0,01 - 1 mol L⁻¹); assim, a concentração do ácido no equilíbrio é praticamente igual à sua concentração inicial. Dada a igualdade entre as concentrações das espécies CH_3COO^- e H_3O^+ (Eq. 3), podemos re-escrever a equação 3:

$$K_a \approx [H_3O^+]^2/C_{\text{acido}}$$
 (4)

donde
$$[H_3O^+] \approx \sqrt{K_a C_{acido}}$$
 (5)

Logaritmizando a expressão anterior,

$$\log [H_3O^{\dagger}] \approx \frac{1}{2} \log (K_a C_{\text{acido}})$$
 (6)

Aplicando as definições de pH e p K_a (Fiorucci et al., 2001; Gama e Afonso, 2007),

$$pH \approx \frac{1}{2}pK_a - \frac{1}{2}logC_{\text{ácido}}$$
 (7)

expressão aplicável apenas para o cálculo do pH de uma solução aquosa contendo somente o ácido fraco, conforme visto na Figura 1.

Nessa figura vê-se uma fronteira correspondente à solução contendo apenas os íons do sal, resultado da reação em proporção exatamente estequiométrica entre o ácido fraco e uma base forte, exemplificada pelo hidróxido de sódio (NaOH). No presente caso, o sal, chamado acetato (etanoato) de sódio, CH₃COONa, se encontra dissociado em seus íons (CH₃COO e Na⁺). O ânion acetato, proveniente de um ácido fraco, sofre uma reação de hidrólise:

$$CH_3COO^{-} + H_2O \longrightarrow CH_3COOH + OH^{-}$$
 (8)

Essa equação é o resultado da combinação de doís equilíbrios:

$$CH_3COO^+ + H_3O^+ \longrightarrow CH_3COOH + H_2O K = 1/K_a$$
 (9)

$$H_2O + H_2O \longrightarrow H_3O^+ + OH^- K = K_w$$
 (10)

A constante de hidrólise do ânion acetato (K_h) referente à equação 8 será dada por (Fatibello-Filho et al., 2006):

$$K_h = [CH_3COOH][OH^*]/[CH_3COO^*] = K_w/K_a$$
 (11)

Uma constante de hidrólise pequena (< 10⁻⁷) indica que a concentração do ânion no equilíbrio é praticamente igual à concentração inicial do sal. Dada a igualdade entre as concentrações das espécies CH₃COOH e OH⁻ (Eq. 8), podemos reescrever a equação 11:

$$K_h = K_w / K_a = [OH^{-1}]^2 / C_{sal}$$
 (12)

donde
$$[OH^{-}] \approx \sqrt{\frac{K_{w}C_{sal}}{K_{a}}}$$
 (13)

Logaritmizando a expressão anterior,

$$\log \left[\text{OH}^{-} \right] \approx \frac{1}{2} \log \left(K_{\text{w}} C_{\text{sal}} / K_{\text{a}} \right) \tag{14}$$

Aplicando as definições de pH e p K_a (Fioriccu et al., 2001; Gama e Afonso, 2007),

$$pH = 7 + \frac{1}{2}pK_3 + \frac{1}{2}\log C_{col}$$
 (15)

expressão aplicável para o cálculo do pH da solução contendo apenas os íons do sal.

Além das duas fronteiras, a Figura 1 permite identificar três zonas distintas:

a) Ácido fraco na presença de um ácido forte (como o clorídrico, HCl_{ss})

À esquerda da fronteira correspondente ao ácido acético sozinho, existem duas ionizações nessa região: a do ácido fraco (Eq. 2) e a do ácido forte, que pode ser considerada praticamente total ($K_a \approx 10^7$) (Ferreira e Rocha-Filho, 1981). Ambas as reações formam íons H_3O^+ ; contudo, o íon proveniente do ácido forte afeta o equilíbrio envolvendo o ácido fraco, levando à inibição de sua ionização pelo efeito do íon comum. O resultado é que a acidez nessa região será praticamente devida apenas ao ácido forte, de modo que

$$pH = -\log[H_3O^+]_{acidoforte} \quad (16)$$

b) Sal na presença de base forte

Esta zona, à direita da fronteira correspondente à solução dos íons do sal, decorre do emprego de solução de base forte além da quantidade estequiométrica necessária para neutralizar todo o ácido fraco (que se comporta aqui como o reagente limitante). Nessa situação (razão molar base forte/ácido fraco acima de 1), além da hidrólise do

ânion do sal (Eq. 8), aparece a dissociação da base forte em seus íons (Na⁺ e OH⁻). Novamente deparamo-nos com um efeito do íon comum, decorrente da presença de íons OH⁻ oriundos de ambas as reações. O íon OH⁻ da base forte afeta o equilíbrio de hidrólise do ânion do sal, reprimindo-a. Praticamente todo o OH⁻ em solução provém da base forte. Nessa situação, pode-se escrever

$$pOH = -log[OH^{-}]_{baseforte}$$
 (17)

e o pH nessa região da Figura 1 será expresso por pH = 14 + log[OH]_{baseforte} (18)

c) Neutralização parcial do ácido pela base forte

A zona central corresponde à adição de base forte em quantidade inferior àquela necessária para a neutralização total do ácido fraco. Ou seja, a base forte é o reagente limitante e o ácido fraco, o reagente em excesso. A presença numa mesma solução do ácido fraco não reagido e dos íons de seu sal obtido na reação com base forte (CH₃COO e Na⁺) caracteriza um sistema tampão (Fiorucci et al., 2001; Marconato et al., 2004).

O equilíbrio de ionização do ácido fraco (Eq. 2) é inibido pelo ânion proveniente de sua neutralização parcial, em mais um caso do efeito do íon comum. Assim, no equilíbrio, a concentração do ácido é praticamente igual a sua concentração inicial, e a do ânion é praticamente igual à concentração do sal. A partir da expressão da constante de equilíbrio de ionização do ácido fraco (Eq. 3), chega-se à expressão conhecida como equação de Henderson-Hasselbach, proposta em 1916 (Fiorucci et al., 2001; Marconato et al., 2004)

$$pH = pK_a + log(C_{sa}/C_{\acute{a}cido})$$
 (19)

O centro da zona tampão equivale à adição de base forte capaz de neutralizar 50% do ácido fraco inicialmente presente. Nessa situação, pela Eq. 19, $C_{sal} = C_{acido}$ e pH = p K_a . Com base no conceito de capacidade tampão (Fiorucci et al., 2001), a faixa operacional de um sistema tampão, é expressa por:

$$pH = pK_a \pm 1 \tag{20}$$

indicando que o quociente entre as concentrações do ácido e dos íons do sal deve se situar na faixa $1/10 \le C_{sa}/C_{acido} \le 10$.

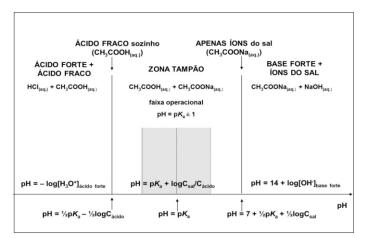


Figura 1: Esquema mostrando as zonas e fronteiras de equilíbrios ácido-base para um ácido monoprótico fraco

E SE O ÁCIDO FOSSE MONOPRÓTICO FORTE?

Esta é uma pergunta que os alunos colocam com frequência, para fins de comparação entre ácidos fortes e fracos. A Figura 2 mostra como um ácido monoprótico forte (Hcl_{aq}.) se comporta no lugar do ácido monoprótico fraco frente à uma base forte (NaOH).

Na solução contendo apenas HCl_{aq}, ele praticamente se ioniza de forma completa por ser um ácido forte (Ferreira e Rocha-Filho, 1981). O pH à esquerda da região em que se inicia a adição de solução de base forte será dado pela Eq. 16. A adição de um ácido fraco não modifica o cálculo, pois sua ionização será inibida pelo ácido forte inicialmente presente.

A segunda fronteira corresponde à solução aquosa contendo os íons Na⁺ e Cl⁻, resultante da exata neutralização total do ácido forte pela base forte. Comumente se fala que ambos os íons não sofrem hidrólise; por isso, essa solução tem pH igual ao da água pura (7 a 25 °C) porque seu equilíbrio não é perturbado pelo íons presentes. Um tratamento mais rigoroso com base nas supostas equações de hidrólise

$$Cl^{-}+H_{2}O \longrightarrow HCl+OH^{-}$$
 (21)

onde
$$K_h = K_w/K_a \approx 10^{-14}/10^7 \approx 10^{-21}$$
 (22)

e
$$Na^+ + H_2O \longrightarrow NaOH + H^+$$
 (23)

onde
$$K_h = K_w/K_h \approx 10^{-14}/4 = 2.5 \times 10^{-15}$$
 (24)

indica que as hidrólises dos íons sódio e cloreto são mais insignificantes que a própria autoionização da água (Gama e Afonso, 2007):

$$H_2O + H_2O \longleftrightarrow H_3O^+ + OH^-$$
 (25)

razão pela qual o pH desta não é afetado por íons derivados de ácido e base fortes.

A zona à direita da fronteira da solução do sal corresponde à adição de excesso de base forte além da quantidade estequiométrica necessária à neutralização total do ácido forte. Como não há hidrólise significativa do íons constituintes do sal, o pH será determinado apenas com base na concentração do excedente de íons OH da base, de acordo com a Eq. 18.

A zona central contém uma mistura de íons Na⁺, H₃O⁺ e Cl⁻, visto a neutralização parcial do ácido forte. O tratamento rigoroso exige que se considere também a autoionização da água (Eq. 25), afora a ionização do ácido forte. Os dois processos produzem íons H₃O⁺, porém, quando a concentração do ácido forte é elevada (> 10⁻⁵ mol L⁻¹) o pH da solução será dado pela Eq. 16: a concentração do ácido forte é suficientemente alta para que a contribuição da água à acidez seja desprezível, não só pela extensão da ionização do ácido forte, mas também pelo efeito do íon comum (H₃O⁺) sobre a autoionização da água. Quando a concentração do ácido forte diminui para valores abaixo de 10⁻⁵ mol L⁻¹, estágio tipicamente atingido quando ele é progressivamente neutralizado por uma base forte, como numa titulação ácido-base (Vogel, 2002), a contribuição da água não pode mais ser ignorada.

Na água pura, as concentrações de H₃O⁺ e de OH⁻são iguais a 10⁻⁷ mol L⁻¹. Então, é mais correto escrever

$$[H_3O^{\dagger}] = [H_3O^{\dagger}]_{\text{ácidoforte}} + [H_3O^{\dagger}]_{\text{áqua}}$$
 (26)

$$[H_3O^{\dagger}] = [H_3O^{\dagger}]_{\text{ácidoforte}} + 10^{-7}$$
 (27)

$$pH = -log\{[H_3O^{\dagger}]_{\text{ácidoforte}} + 10^{-7}\}$$
 (28)

que é a fórmula apresentada para esta zona na Figura 2. Uma solução de HCl 10⁻⁸ mol L⁻¹, jamais terá um pH 8 (se fosse ignorada a contribuição da água), mas -log{10⁻⁸ + 10⁻⁷} = 6,96.

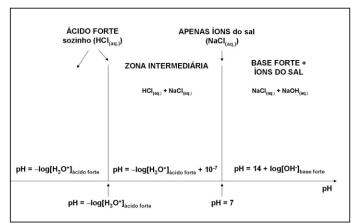


Figura 2: Esquema mostrando as zonas e fronteiras de equilíbrios ácido-base para um ácido monoprótico forte

ÁCIDO DIPRÓTICO FRACO

A Figura 3 apresenta o esquema para um ácido representativo desta classe, o ácido oxálico (etanodioico, $H_2C_2O_4$). A comparação entre as Figuras 1 e 3 permite identificar zonas e fronteiras análogas para os casos de ácidos fracos mono e dipróticos. O ácido sozinho é uma das fronteiras, e apresenta dois equilíbrios expressos por duas constantes de ionização:

$$H_2C_2O_4 + H_2O \iff HC_2O_4^- + H_3O^+$$
 (29)

$$K = K_{a_1} = [HC_2O_4][H_3O^{\dagger}]/[H_2C_2O_4]$$
 (30)

e
$$HC_2O_4^{-} + H_2O \iff C_2O_4^{-2} + H_3O^{+}$$
 (31)

$$K = K_{a2} = [C_2O_4^2][H_3O^{\dagger}]/[HC_2O_4]$$
 (32)

Em geral, para ácidos com dois ou mais hidrogênios ionizáveis (os chamados ácidos polipróticos), $K_{a1} >> K_{a2} >>> K_{an}$. A remoção de uma espécie positiva (íon H_3O^+) de uma espécie de carga

progressivamente mais negativa (o ânion) se torna cada vez mais difícil (atração de cargas elétricas opostas). Além disso, existe ainda o efeito do íon comum sobre um estágio de ionização provocado pelos íons H_3O^+ provenientes do(s) estágio(s) anteriore(s).

Na prática, somente o primeiro estágio de ionização de um ácido poliprótico tem significado na acidez global de sua solução por ser largamente o contribuinte principal. Se o primeiro estágio de ionização corresponde a um ácido fraco, a concentração deste no equilíbrio é praticamente igual à concentração inicial. Isso leva a uma expressão similar para um ácido monoprótico (Eq. 5), onde somente a primeira constante de ionização é utilizada:

$$[H_3O^+] \approx \sqrt{K_{a1}C_{acido}}$$
 (33)

O tratamento equivalente dado à Eq. 5 leva à expressão final

$$pH \approx \frac{1}{2}pK_{a1} - \frac{1}{2}logC_{acido}$$
 (34)

A diferença entre as Eq. 5 e 35 é a presença do subscrito 1 para o K_a .

Na figura 3, outra fronteira corresponde à solução resultante da neutralização total do ácido diprótico pela base forte. Os íons formados são ${\rm C_2O_4}^2$ (oxalato) e Na $^+$. O ânion oxalato, proveniente de um ácido fraco, sofre um processo de hidrólise em duas etapas:

$$C_2O_4^{2-} + H_2O \iff HC_2O_4^{-} + OH^{-}$$
 (35)

$$HC_2O_4 + H_2O \iff H_2C_2O_4 + OH$$
 (36)

Seguindo raciocínio apresentado para o cálculo da constante de hidrólise do ânion do sal proveniente de um ácido monoprótico fraco, chega-se a duas constantes de hidrólise:

$$K_{h1} = [HC_2O_4][OH]/[C_2O_4^2] = K_w/K_{a2}$$
 (37)

$$K_{h2} = [H_2C_2O_4][OH^2]/[HC_2O_4] = K_w/K_{a1}$$
 (38)

Como $K_{a1} >> K_{a2} >> K_{an}$, decorre que

 $K_{\rm h1} >> K_{\rm h2} >> K_{\rm hn}$, pois elas variam inversamente. Na prática, apenas a primeira constante de hidrólise impacta o pH desse tipo de solução. Uma constante de hidrólise pequena ($K_{\rm h1} < 10^{-7}$) indica que a concentração do ânion no equilíbrio é praticamente igual à concentração inicial (a do sal). Dada a igualdade entre as concentrações das espécies $HC_2O_4^-$ e OH^- (Eq. 35), podemos re-escrever a equação 38:

$$K_{h1} = K_w / K_{a2} = [OH^-]^2 / C_{sal}$$
 (39)
 $[OH^-] \approx \sqrt{\frac{K_w C_{sal}}{K_{a2}}} / K_{a2}$ (40)

Logaritmizando a expressão anterior, e aplicando as definições de pH e p K_a ,

е

$$pH = 7 + \frac{1}{2}pK_{a2} + \frac{1}{2}\log C_{sal}$$
 (41)

expressão aplicável para o cálculo do pH da solução contendo apenas os íons do sal $Na_2C_2O_4$. A diferença entre as Eqs. 41 e 15 é a presença do subscrito 2 para pK_a .

Para o ácido diprótico surge uma nova fronteira, que corresponde à neutralização total apena do primeiro estágio. A reação entre $H_2C_2O_4$ e NaOH, produz H_2O e íons $HC_2O_4^-$ e Na $^+$. O composto $NaHC_2O_4$ é chamado hidrogenossal (ou sal ácido). O ânion hidrogeno-oxalato pode sofrer uma reação de hidrólise (indicando um comportamento como uma base),

$$HC_2O_4^- + H_2O \longrightarrow H_2C_2O_4 + OH^- \quad K = K_{h2} = K_w/K_{a1}$$
 (42)

bem como se ionizar (comportando-se como um ácido), dando origem ao ânion oxalato:

$$HC_2O_4^- + H_2O \iff C_2O_4^{-2} + H_3O^+ \qquad K = K_{a2}$$
 (43)

A geração de íons OH⁻ e H₃O⁺ implica na consideração do equilíbrio da Eq. 1. Somando as equações 1, 42 e 43, obtém-se a equação global

$$2 HC_2O_4^- \longleftrightarrow C_2O_4^{-2} + H_2C_2O_4 \quad K = K_{a2}/K_{a1}$$
 (44)

Considerando a primeira ionização do ácido oxálico (reação duplicada),

$$2H_{2}C_{2}O_{4} + 2H_{2}O \longrightarrow 2HC_{2}O_{4} + 2H_{3}O^{+} K = K_{a}^{2}$$
 (45)

e somando as equações 44 e 45, chega-se a

е

$$H_2C_2O_4 + 2H_2O \implies 2H_3O^+ + C_2O_4^{2-}$$
 (46)

$$K = K_{a1}K_{a2} = [H_3O^{\dagger}]^2 [C_2O_4^{2-}]/[H_2C_2O_4]$$
 (47)

Pela equação 44, $[C_2O_4^{2}] = [H_2C_2O_4]$. Assim,

$$K = K_{a1}K_{a2} = [H_3O^+]^2$$
 (48)

$$[H_3O^+] = \sqrt{K_{a1}K_{a2}}$$
 (49)

$$pH = \frac{1}{2}pK_{a1} + \frac{1}{2}pK_{a2}$$
 (50)

Essa expressão mostra uma independência do pH de uma solução de íons de um hidrogenossal com a sua concentração. Em elevadas concentrações, há um desvio desse comportamento devido à natureza não ideal da solução. Por outro lado, a igualdade entre as concentrações de C₂O₄²⁻ e H₂C₂O₄ (Eq. 44) é tão mais correta quanto mais próximos são os valores das constantes das equações 42 e 43.

As zonas à esquerda da fronteira da solução do ácido diprótico fraco e à direita da fronteira da solução dos íons do sal final (sal neutro) (razão molar base forte/ácido fraco acima de 2) são análogas ao caso do ácido monoprótico fraco estudado anteriormente.

As duas zonas centrais correspondem a dois sistemas tampão distintos. Na primeira, parte do primeiro estágio de ionização do ácido oxálico foi neutralizado pela base forte, resultando numa mistura de HC₂O₄ e H₂C₂O₄. A base forte é o reagente limitante e o ácido fraco, o reagente em excesso. A presença do ácido não reagido e de seu sal com base forte caracteriza um sistema tampão (Fiorucci et al., 2001; Marconato et al., 2004). O equilíbrio de ionização do ácido fraco é inibido pelo ânion proveniente do hidrogenossal (efeito do íon comum). No equilíbrio, a concentração do ácido é praticamente a concentração inicial, e a do ânion é praticamente a concentração do hidrogenossal.

A expressão de Henderson-Hasselbach para esse sistema tampão é escrita como

$$pH = pK_{a1} + log(C_{hidrogenossal}/C_{\acute{a}cido})$$
 (51)

O centro desta zona tampão equivale à adição de base forte necessária para neutralizar 50% do primeiro estágio de ionização do ácido diprótico fraco. Nessa situação, $C_{sal} = C_{acido}$ e pH = p K_{a1} . A faixa operacional desse sistema tampão é dada por pH = p K_{a1} ± 1.

A segunda zona tampão contém os íons $HC_2O_4^{-1}$, $C_2O_4^{-2}$ e Na^+ . O equilíbrio da segunda ionização do ácido fraco (Eq. 31) é inibido pelo ânion proveniente do sal neutro (efeito do íon comum). Deve-se reparar que o hidrogenossal se comporta aqui como ácido, enquanto desempenhava o papel de sal no sistema tampão anterior. No equilíbrio, a concentração do ácido é praticamente a concentração inicial do hidrogenossal e a do ânion é praticamente a do sal neutro. A equação de Henderson-Hasselbach para esse sistema-tampão é

$$pH = pK_{a2} + log(C_{salneutro}/C_{hidrogenossal})$$
 (52)

O centro desta zona tampão equivale à adição de base forte necessária para neutralizar todo o primeiro estágio de ionização e metade do segundo do ácido diprótico fraco originalmente presente (razão molar base forte /ácido = 1,5). Nessa situação, $C_{sal\ neutro} = C_{hidrogenossal}$ e pH = p K_{a2} . A faixa operacional desse sistema tampão é dada por pH = p K_{a2} ± 1.

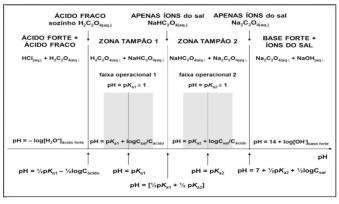


Figura 3: Esquema mostrando as zonas e fronteiras de equilíbrios ácido-base para um ácido diprótico fraco

ÁCIDO TRIPRÓTICO FRACO

A Figura 4 apresenta o perfil para um ácido dessa categoria, exemplificado para o ácido fosfórico (H₃PO₄). A comparação dessa figura com a Figura 3 indica o surgimento de uma fronteira adicional (um novo hidrogenossal) e uma zona tampão adicional.

As zonas extremas (ácido fraco + ácido forte e sal neutro + base forte) têm o mesmo cálculo de pH de acordo com os raciocínios mostrado nas situações anteriores. O mesmo se aplica às três zonas tampão (tendo o cuidado de usar o valor de K_a conforme a neutralização parcial do estágio a que se refere) e à fronteira correspondente ao ácido triprótico fraco sozinho. As expressões para as fronteiras correspondentes aos hidrogenossais devem levar em conta os estágios de ionização anterior e seguinte em relação aos ânions dos mesmos. O pH da solução do sal neutro leva em conta o valor de K_a 3 do ácido.

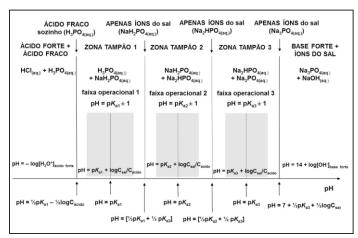


Figura 4: Esquema mostrando as zonas e fronteiras de equilíbrios ácido-base para um ácido triprótico fraco

GENERALIZAÇÕES DOS DIAGRAMAS

As figuras 1, 3 e 4 permitem fazer algumas generalizações para um ácido poliprótico fraco com n hidrogênios ionizáveis:

 os esquemas apresentam (n + 2) zonas. Duas delas estão sempre presentes: as misturas de ácido forte + ácido fraco e da solução do sal neutro + excesso de base forte. Cada hidrogênio ionizável contribui com uma zona intermediária, que possui propriedades tamponantes;

- os diagramas apresentam (n-1)+2 fronteiras. Todos os diagramas apresentam duas fronteiras: as soluções do ácido fraco e dos íons do sal neutro. A partir de n=2 surgem fronteiras correspondentes a soluções de íons de hidrogenossais, cuja quantidade é dada pela expressão entre parênteses. Monoácidos (n=1) não formam hidrogenossais;

- as fórmulas de cálculo do pH das fronteiras seguem um mesmo formato, apesar da dedução individualizada para uma delas, com dois termos contendo p $K_{\rm an}$ (correspondentes aos estágios de ionização anterior e posterior do ânion do hidrogenossal) ou p $K_{\rm an}$ e log $C_{\rm componente}$ (soluções dos ácidos ou dos íons dos sais neutros sozinhos). Além da concentração do referido composto, o primeiro estágio (ácido) ou o último estágio de ionização (sal neutro) são relevantes no cálculo considerado.

É sempre bom recordar que todas as deduções apresentadas e as encontradas em livros didáticos e em outros trabalhos se baseiam nas premissas que $K_{a1} >> K_{a2} >> ... K_{an}$ (portanto, $K_{h1} >> K_{h2} >> ... K_{hn}$), e que K_{a1} e K_{b1} sejam suficientemente pequenos para justificar as simplificações algébricas introduzidas nas deduções das fórmulas de cálculo de pH das fronteiras de ácidos e sais neutros. Se isso não se mostrar verdadeiro, as soluções terão de ser obtidas por meio de expressões não simplificadas, levando a equações do 2º grau, cuja raiz positiva é a única que deve ser considerada. Por exemplo, íons S²-, PO₄³- e CN⁻ têm valores de K_{h1} muito acima de 10^{-3} ; no ácido cítrico (2-hidroxi-1,2,3-propanotricarboxílico - K_{a1} = $7.1 \times 10^{-4} \text{ e } K_{a2} = 1.7 \times 10^{-5} \text{ e } K_{a3} = 6.4 \times 10^{-6}$), os dois primeiros estágios devem ser considerados como contribuintes significativos para a acidez da solução aquosa.

PORQUE APENAS ÁCIDOS FRACOS MONO E POLIPRÓTICOS?

Essa é uma pergunta frequente dos alunos quando lidam com o preparo de soluções tampão. Em

geral, os ácidos são solúveis em água o suficiente para preparar soluções, e seus sais neutros ou hidrogenossais com metais alcalinos são bastante solúveis em água, o que permite preparar todos os tipos de solução apresentados nos esquemas. Hidrogenossais de metais alcalino-terrosos e mesmo de metais de transição (blocos d e f) são também frequentemente solúveis em água. Isso dá aos ácidos polipróticos uma grande versatilidade no preparo de soluções tampão cobrindo uma larga faixa da escala de pH, embora outros fatores como custo, grau de pureza e toxicidade a seres vivos devam também ser consideradas quando da escolha de um sistema tampão para estudos científicos ou fins didáticos.

No caso das polibases, com poucas exceções $(Ba(OH)_2, Ra(OH)_2, N_2H_6(OH)_2, aliás compostos altamente tóxicos tanto do ponto de vista químico como radiológico), elas são pouco solúveis em água (< 0,05 mol L-1), e a grande maioria do sais básicos também é pouco solúvel nesse solvente. Salvo no caso do <math>N_2H_6(OH)_2$ (hidróxido de hidrazônio), os valores de K_{bn} correspondem a bases fortes. Esse conjunto de propriedades ácido-base e de solubilidade torna inviável o preparo de sistemas semelhantes aos dos ácidos polipróticos.

A PASSAGEM DA SOLUÇÃO DOS ÍONS DO SAL NEUTRO PARA A ZONA ÁCIDO FORTE + ÁCIDO FRACO

Embora os raciocínios apresentados nos conduziram do ácido fraco sozinho até a zona além da neutralização total dos hidrogênios ionizáveis desse ácido, por meio de adições crescentes de solução de base forte, é possível fazer o caminho inverso: a adição de quantidades crescentes de ácido forte desloca os equilíbrios até a zona em que o ácido fraco se acha na presença do ácido forte adicionado além da proporção estequiométrica para a protonação total do ânion do sal neutro. Os processos que ocorrem são exemplificados para o ânion oxalato na presença de íons H₃O⁺ provenientes de um

de um ácido forte como o clorídrico:

$$C_2O_4^{2-} + H_2O \longrightarrow HC_2O_4^{-} + OH^{-}$$
 (53)

$$OH^{-} + H_{3}O^{+} \iff H_{2}O + H_{2}O$$
 (54)

A Eq. 54 mostra que o consumo dos íons hidroxila pelo íon hidrogênio do ácido forte desloca o equilíbrio de hidrólise na direção de formação do ânion do hidrogenossal. Se a quantidade for além do estequiométrico para converter todo o ânion do sal neutro no ânion do hidrogenossal, este último será convertido, no todo ou em parte, no ácido fraco não ionizado

$$HC_2O_4^- + H_2O \iff H_2C_2O_4 + OH^-$$
 (55)

pois os íons H₃O⁺ consomem os íons OH⁻ provenientes da nova hidrólise, deslocando o equilíbrio na direção do ácido fraco não ionizado. Quantidades de ácido forte além do estequiométrico para a formação do ácido fraco levam à inibição da ionização deste pelo efeito do íon comum, representado pela zona à esquerda das Figuras 1, 3 e 4.

Embora a descrição do processo seja exatamente o inverso visto quando se adicionou base forte à solução do ácido fraco, neste caso, além dos produtos derivados deste ácido conforme a quantidade de ácido forte adicionada, surgem íons correspondentes a um sal derivado de base e ácido fortes (por exemplo, NaCl). Como tais sais não sofrem processos hidrolíticos que interfiram no pH das soluções, ele não interferirão nos cálculos dos pH das diversas soluções possíveis. Porém, esses sais tendem a aumentar a força iônica da solução, o que pode levar a diferenças nos resultados no caso de soluções com concentrações elevadas.

CONCLUSÕES

Os esquemas apresentados neste trabalho

apontam para a grande importância do conceito de estequiometria nas reações ácido-base, envolvendo especialmente ácidos polipróticos, pois ela permite prever em que posição (zona ou fronteira) se chegará após a adição de uma determinada quantidade de reagente. Essa visão abrangente reforça a interpretação de que as zonas e fronteiras são interrelacionadas e intercambiáveis pela adição de quantidades adicionais de ácido ou base forte.

Essa ferramenta pode ajudar alunos de níveis médio e superior a interpretar os diversos tipos de equilíbrio ácido-base envolvendo ácidos fortes e fracos, conseguindo fazer a conexão entre um tipo e outro, aumentando a probabilidade de eliminar a visão segmentada dos equilíbrios químicos e de reduzir a tendência em memorizar as fórmulas de cálculo, sem conexão com a interpretação dos fenômenos ocorridos.

REFERÊNCIAS

ALBUQUERQUE, M. V., SANTOS, S. A., CERQUEIRA, N. T. V., SILVA, J. A. Educação Alimentar: Uma Proposta de Redução do Consumo de Aditivos Alimentares. **Química Nova na Escola**, n. 34, p. 51-57, 2009.

ANTUNES, M., ADAMATTI, D. S., PACHECO, M. A. R., GIOVANELA M. pH do Solo: Determinação com indicadores ácido-base no ensino médio. **Química Nova na Escola**, n. 31, p. 283-287, 2009.

BARBOSA, A. B., SILVA, R. R. Xampus. **Química Nova na Escola**, n. 1, p. 3-6, 1995.

CAMPOS, R. C., SILVA, R. C. Funções da química inorgânica... funcionam? **Química Nova na Escola**, n. 9, p. 18-22, 1999.

FATIBELLO-FILHO, O., WOLF, L. D., ASSUMPÇÃO, M. H. M. T., LEITE, O. D. Experimento simples e rápido ilustrando a hidrólise de sais. **Química Nova na Escola**, n. 24, p. 30-34, 2006.

FERREIRA, R., ROCHA FILHO, R. C. Sobre a acidez dos haletos de hidrogênio. **Química Nova**, n. 4, p. 123-124, 1981.

FIORUCCI, A. R., SOARES, M. H. F. B., CAVALHEIRO, E. T. G. O conceito de solução tampão. **Química Nova na Escola**, n. 13, p. 18-21, 2001.

GAMA, M. S., AFONSO, J. C. De Svante Arrhenius ao Peagâmetro Digital: 100 anos de medida de acidez. **Química Nova**, n. 30, 232-239, 2007.

LIMA, A. C. S.; AFONSO, J. C. A química do refrigerante. **Química Nova na Escola**, n. 31, p. 210-215, 2009.

MAIA, D. J., GAZOTTI, W. A., CANELA, M. C., SIQUEIRA, A. E. Chuva ácida: um experimento para introduzir conceitos de equilíbrio químico e acidez no ensino médio. **Química Nova na Escola**, n. 21, p. 44-46, 2005.

MARCONATO, J. C., FRANCHETTI, S. M. M., PEDRO, R, J. Solução-tampão: uma proposta experimental usando materiais de baixo custo. **Química Nova na Escola**, n. 20, p. 59-62, 2004. PASTRE, I. A., PLICAS, L. M. A., TIERA, V. A. O.,

CUSTÓDIO, J. V., AGOSTINHO, S. M. L. Reações ácido-base: conceito, representação e generalização a partir das energias envolvidas nas transformações. **Química Nova**, n. 35, 2072-2075, 2012.

SILVA, L. A., LARENTIS, A. L., CALDAS, L. A., RIBEIRO, M. G. L., ALMEIDA, R. V., HERBST, M. H. Obstáculos Epistemológicos no Ensino-Aprendizagem de Química Geral e Inorgânica no Ensino Superior: Resgate da Definição Ácido-Base de Arrhenius e Crítica ao Ensino das "Funções Inorgânicas" Química Nova na Escola, n. 36, p. 261-268, 2014.

TERCI, D. B. L., ROSSI, A. V. Indicadores naturais de pH: usar papel ou solução? **Química Nova**, n. 25, 684-688, 2002.

VOGEL, A. I. **Química Analítica Qualitativa**. São Paulo: Mestre Jou, 1981, cap. IB e IC.

VOGEL, A. I. **Química Analítica Quantitativa**, 6ª ed., Rio de Janeiro: Livros Técnicos e Científicos, 2002, cap. 4 a 10.

Simulação numérica de trocador de calor casco-tubo: influência das chicanas sobre a dinâmica do fluido

Numerical simulation of heat exchanger hull-tube: influence of baffles on the dynamics of fluid

¹Sebastião José S. Filho, ¹Josedite S. de Souza, ²Antonio G. B. de Lima, ²Kelly C. L. Angelim

¹ Faculdade Mauricio de Nassau, Departamento de Engenharias.- Campina Grande - PB ² Universidade Federal de Campina Grande, Departamento de Engenharia Mecânica Campina Grande -. PB ¹eng.josedite@hotmail.com

Submetido em 07/07/2017; Versão revisada em 16/03/2018; Aceito em 12/04/2018

Resumo

Dimensionar dispositivos tais como trocadores de calor envolvem algoritmos e correlações bastante complexas, as quais necessitam de ferramentas apropriadas para realizar um estudo detalhado. Neste sentido o presente artigo avaliou numericamente o processo de troca térmica em um trocador de calor do tipo cascotubo, considerando o escoamento com e sem a presença de chicanas, a fim de propor um dimensionamento desses equipamentos e verificar sua validade, visando a construção de um protótipo que viabilize estudos experimentais posteriores. A avaliação numérica foi realizada através do uso de *softwares* comerciais (Aspen Plus® e Ansys CFX 15.0°), para efeito de comparação foi desenvolvida uma planilha de cálculo, utilizando o Microsoft Excel®, capaz de determinar os parâmetros construtivos básicos deste sistema, cujos dados foram comparados com dados obtidos através das simulações numéricas utilizando (Aspen Plus® e Ansys CFX 15.0°). Os resultados dos campos de fluxo e de temperatura forneceram credibilidade à metodologia desenvolvida. Observou-se que os referidos campos de fluxos e de temperatura apresentaram zonas de maior troca térmica, favorecendo um melhor direcionamento aos engenheiros projetistas. Verificou-se maiores variações de temperatura com o aumento da vazão na entrada, e que a turbulência causada pela presença de chicanas influencia significativamente a eficiência de troca térmica.

Palavras-Chave: Trocadores de calor, CFD, Chicanas.

Abstract

Heat exchangers are very efficient equipments for energy use within a process. However, the dimension these devices involves quite complex algorithms and correlations, which require appropriate tools to perform a detailed study. In this sense, this paper aims to numerically evaluate the process of thermal exchange in a heat exchanger of the shell-tube type, considering the flow with and without the presence of baffles, in order to propose a dimensioning of this equipment and verify its validity. Aiming at the construction of a prototype that will enable subsequent experimental studies. For such, we developed a spreadsheet, using Microsoft Excel®, able to determine the basic constructive parameters of this system, whose data were compared with data obtained through simulations in commercial software (Aspen Plus® and Ansys CFX 15.0®). Flow and temperature field results are presented and analyzed. Higher temperature variations were observed with increasing inlet flow. It is noticed that the baffles presence significantly increases the thermal exchange efficiency.

Keywords: Heat exchangers, CFD, buffles.

INTRODUÇÃO

A transferência de calor é um dos mais utilizados e importante processo em uma indústria. Normalmente, a economia da planta industrial é controlada em grande parte pela eficiência na utilização da energia térmica no processo. Dentre as possíveis maneiras de redução no consumo de energia, destacam-se as que envolvem os trocadores de calor, que tem por objetivo principal a reciclagem de energia térmica e a eficiência de utilização da energia dentro do processo. Sendo a eficiência desses dispositivos determinada em função dos fatores que possam interferir na troca térmica, a própria parede do trocador de calor se opõe à transferência de calor, resistindo à troca térmica. Portanto, um trocador será melhor quanto menor for a espessura da parede que separa os fluidos à diferente temperatura, maior a condutividade da parede responsável pela troca e maior for a turbulência na passagem dos fluidos (Foust (1982), Çengel (2007) e Dias (2009)).

No dimensionamento de trocadores de calor é imprescindível o conhecimento detalhado dos fenômenos físicos envolvidos no processo, as condições das correntes que alimenta o equipamento, devido informações do processo à montante deste, bem como da saída desejada, a fim de se realizar determinado procedimento à jusante. Aplicação de trocadores de calor em operações de condensação em tem sido analisada em estudos analíticos e experimentais na tentativa de compreender os parâmetros fundamentais que afetam esse fenômeno (CARUSO et al, 2012).

Neste sentido, costuma-se utilizar o método da Média Logarítmica da Diferença de Temperatura (MLDT) para a determinação da área de troca térmica necessária a fim de que essas condições sejam atendidas. No entanto, em alguns casos, as condições finais do processo de troca térmica não são conhecidas, nestes é comum determinar certos parâmetros construtivos do equipamento, tais como a

área de troca e materiais a serem utilizados, para que dessa forma seja possível avaliar a termofluidodinâmica do processo e calculá-las (Incropera e Dewitt, 2003, Souza et al, 2015).

Independentemente do tipo de trocador de calor, todos terão uma entrada e uma saída para o fluido quente e para o fluido frio. A diferença de temperatura de entrada é calculada subtraindo-se da temperatura do fluido quente a temperatura do fluido frio, enquanto que a diferença de temperatura de saída é encontrada pelo mesmo procedimento, porém utilizando os valores das saídas do equipamento. Uma média aritmética entre essas suas diferenças é um cálculo grotesco, e a MLDT surge para retratar a diferença média de temperatura, a qual é necessária para calcular a taxa de transferência de calor ou a área necessária para se ter a referida taxa. O Número de Unidades de Transferência (NUT) é um grupo adimensional relacionado á quantidade máxima de calor que pode ser transmitida no trocador e é usado para calcular a efetividade do equipamento.

Dentre os diversos tipos de trocadores de calor, destaca-se o trocador de calor casco e tubo, o qual consiste em um feixe de tubos acondicionados no interior de um casco, onde o eixo dos tubos é paralelo ao do casco. Esses tipos de trocadores são representados pelo cabeçote de entrada, casco, feixe de tubos, cabeçote de retorno ou saída e chicanas, conforme ilustra a Figura 1. Um dos parâmetros que influenciam na capacidade de troca térmica do lado do casco, em um trocador casco-tubo, é a quantidade e disposição das chicanas.

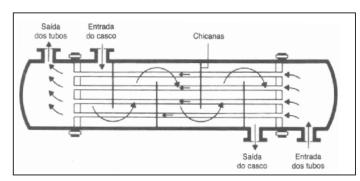


Figura 1 – Visão lateral de trocador de calor casco-tubo

Fonte: Incropera e Dewitt, 2003.

As propriedades mecânicas de construção dos trocadores de calor do tipo casco e tubos têm relação com seu desempenho. Silva et al, 2017 avaliaram os campos de pressão em função da vazão mássica e da presença de chicanas no trocador de calor. Verificaram que o aumento das taxas de fluxo massico resulta em uma maior pressão em sua estrutura, e a presença de chicanas interferem diretamente no campo de pressão, com uma maior perda de carga distribuída. Ratificando a importante relevancia destes parâmetro no projeto do permutador.

Neste sentido, para o problema proposto neste trabalho, efetuou-se um estudo numérico utilizando a fluidodinâmica computacional CFD em um trocador de calor do tipo casco-tubo, fixando-se os parâmetros de sua construção, encontrando-se a diferença de temperatura no permutado. Determinou-se a área de troca necessária para que este equipamento atenda às especificações, bem como o efeito da presença da chicanas na troca térmica. Por fim, comparou-se os resultados dessa análise com àqueles obtidos em simulações numéricas através de *softwares* comerciais e modelos analíticos propostos na literatura, visando a construção de um protótipo que viabilize o estudo experimental posterior.

METODOLOGIA

Descrição do Problema

O fluido usado para a troca térmica é a água em diferentes temperaturas. Para a determinação das propriedades do fluido, utilizou-se os dados encontrados na Tabela do Apêndix de Welty et. al. (1984). Os valores das variáveis são encontrados a partir de polinômios, onde para a densidade, para a capacidade calorífica e para a condutividade o polinômio foi de ordem 2, e para a viscosidade o polinômio foi de ordem 3.

Frequentemente, valores de coeficientes de transferência são determinados experimentalmente. Porém, na ausência de tais experimentos é

necessário realizar uma estimativa dessas quantidades, viabilizando o dimensionamento do trocador de calor. Para o cálculo do coeficiente do lado dos tubos foi utilizada a correlação proposta por Petukhov (Incropera e DeWitt (2003)), válida para $10^4 \le Re \le 5 \times 10^6 e 0,5 \le Pr \le 2000$, na forma:

$$Nu = \frac{(f/8) \text{Re}_D Pr}{1,07 + 12,7(f/8)^{(1/2)} (Pr^{(2/3)} - 1)}$$
(1)

sendo o número de Nusselt o adimensional que relaciona a transferência de calor convectiva com a transferência difusiva, no qual é definido como:

$$Nu = \frac{hD}{k} \tag{2}$$

O fator de atrito é definido para escoamentos em tubos lisos de acordo com a correlação proposta por Petukhov (Incropera e DeWitt (2003)), válida para $3x10^3 < Re < 5x10^6$:

$$f = (0.790 \ln \text{Re}_D - 1.64)^{-2}$$
 (3)

Do lado do casco foi utilizada a correlação proposta por McAdams (Kakaç e Liu (2002)), válida para $2x10^3$ $\leq Re \leq 1x10^6$:

$$Nu = 0.36 \text{Re}_D^{0.55} Pr^{(1/3)} \left(\frac{\mu}{\mu_w}\right)^{0.14}$$
 (4)

em que o número de Reynolds é definido em função do diâmetro equivalente do lado do casco, que leva em consideração o perímetro molhado e a área livre para o escoamento.

Sabe-se que quanto maior o número de chicanas no trocador, maior o coeficiente de troca do lado do casco e consequentemente a eficiência desse dispositivo, obedecendo o limite da área de troca e da capacidade do fluido nos tubos. O diâmetro equivalente varia de acordo com o arranjo de tubos, que pode ser triangular ou quadrático, sendo, portanto, calculado através da equação 5, de Schlünder (1983):

$$D_{e} = \frac{4\left(P_{T}^{2} - \frac{\pi d_{o}^{2}}{4}\right)}{\pi d_{o}}$$
 (5)

$$G_{s} = \frac{m}{A_{s}} \tag{6}$$

Sendo G_s , o fluxo mássico total, definido em função da área transversal ao sentido do fluxo que se encontra livre para escoamento A_s :

$$A_{s} = \frac{D_{s}CB}{P_{T}} \tag{7}$$

em que D_s é o diâmetro do casco, B é o espaçamento entre os defletores e C e P_τ são a distância entre as bordas dos tubos e a distância entre o centro de um tubo e o centro do outro, respectivamente, determinados de acordo com o arranjo escolhido conforme pode ser observado na Figura 2.

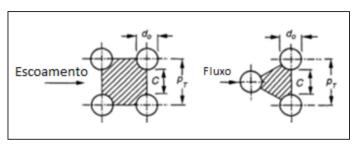


Figura 2 – Propriedades dos arranjos de tubos Fonte: Adaptado de Rubbo, 2014.

Pode ser facilmente verificado que o espaçamento entre os defletores se relaciona com a quantidade destes pela seguinte equação, uma vez que o comprimento do trocador é fixo:

$$B = \frac{L}{N_b + 1} \tag{7}$$

em que N_b é o número de defletores e L é o comprimento do casco. O aumento no número de chicanas (defletores) e consequente redução do espaçamento entre elas tem potencial de aumentar a troca térmica, no entanto a escolha desses parâmetros não pode ser feita de forma arbitrária, de

acordo com o Tema (1988) o espaçamento mínimo entre as chicanas deve ser 1/5 do diâmetro do casco e no máximo equivalente ao diâmetro do casco. De posse dos coeficientes individuais de troca e conhecendo a condutividade térmica do aço, determinou-se o coeficiente global de transferência de calor, usando a equação 9:

$$U = \left[\frac{D_o}{D_i h_o} + \frac{D_o \ln \frac{D_o}{D_i}}{2k} + \frac{1}{h_i} \right]^{-1}$$
 (9)

A depender do fluido de trabalho, bem como da sua interação com a tubulação, é possível que haja deposição de materiais sobre a tubulação resultando em alterações no coeficiente global de transferência tornando necessário adicionar fatores de incrustação, tanto do lado do casco como no interior do tubo. Porém, para o caso em estudo em que o fluido utilizado é água pura, esses termos podem ser desprezados.

As capacidades térmicas das correntes foram determinadas pela multiplicação da vazão por suas respectivas capacidades caloríficas. Dessa forma, o cálculo da eficiência baseia-se no máximo de calor que pode ser transferido para ou da corrente com menor capacidade de transferência pela equação 10:

$$Q_{M\acute{A}X} = C_{MIN} \left(T_{qi} - T_{fi} \right) \tag{10}$$

Conforme descrito por Özişik (1985), o NUT é uma medida do "tamanho térmico" do trocador, ou seja, para um determinado pela expressão:

$$NUT = \frac{UA_T}{C_{MIN}} \tag{11}$$

O NUT indica a área real de troca de calor, assim, para os mesmos valores de capacidade mínima de transferência e coeficiente global, quanto maior o NUT, maior é a dimensão física do equipamento. Conhecidos os valores de NUT e C_{MIN} , pode-se determinar a efetividade do trocador

conforme Incropera e DeWitt (2003):

$$\varepsilon = 2 \left[1 + C + \left(1 + C^2 \right)^{(1/2)} \frac{1 + \exp\left[-NUT \left(1 + C^2 \right)^{(1/2)} \right]}{1 - \exp\left[-NUT \left(1 + C^2 \right)^{(1/2)} \right]} \right]^{-1}$$
(12)

em que C é a relação entre o C_{MIN} e o C_{MAX} .

Conhecida a efetividade de troca do equipamento e sua capacidade máxima de troca, é possível determinar a quantidade de calor de fato transferida entre as correntes e, dessa forma, a condição térmica de ambas na saída do trocador.

Finalizado o cálculo do Número de Unidades de Transferência e uma vez conhecida a condição térmica nas saídas do trocador, utilizou-se o método da Média Logarítmica da Diferença de Temperatura (MLDT) para determinação da área necessária de troca para que sejam atingidas a condições encontradas conforme a metodologia apresentada por Schlünder *et al.* (1983). A MLDT é calculada segundo a equação 13:

$$\Delta T_{ML} = \frac{\Delta T_1 - \Delta T_2}{\ln \frac{\Delta T_1}{\Delta T_2}} \tag{13}$$

onde, para o fluxo em contracorrente, as diferenças de temperatura são definidas por:

$$\Delta T_1 = T_{qi} - T_{fo} e \Delta T_2 = T_{qo} - T_{fi}$$
 (14)

No método MLDT utiliza-se os parâmetros adimensionais P e R:

$$R = \frac{T_{qi} - T_{qo}}{T_{fo} - T_{fi}} \quad P = \frac{T_{fo} - T_{fi}}{T_{ai} - T_{fi}}$$
 (15)

em que R é a razão entre as capacidades caloríficas dos fluidos e P representa a efetividade térmica com relação ao fluido frio. Uma vez que o fluxo não é completamente contracorrente, é necessário realizar a correção da média logarítmica da diferença de temperatura em que o fator de correção F é

determinado pela equação para trocadores com 2 passes nos tubos e um no casco sugerida por Kern (1980):

$$F = \frac{\sqrt{R^2 + 1} \ln \frac{1 - S}{1 - RS}}{\left(R - 1\right) \ln \frac{2 - S\left(R + 1 - \sqrt{R^2 + 1}\right)}{2 - S\left(R + 1 + \sqrt{R^2 + 1}\right)}}$$
(16)

em que S é definido como:

$$S = \frac{\alpha - 1}{\alpha - R} \tag{17}$$

е

$$\alpha = \left\lceil \frac{1 - RP}{1 - P} \right\rceil^{1/N} \tag{18}$$

onde N é o número de passes nos tubos. Dessa forma a MLDT real, corrigidos os efeitos dos fluxos cruzados e em co-corrente, é calculada como sendo:

$$\Delta T_{ML}^{C} = F \Delta T_{ML} \tag{19}$$

Conhecida a diferença de temperatura, podese determinar a área de troca necessária para que tão condição seja atingida, observando-se que a área existente é suficiente para realizar tal processo.

MODELAGEM MATEMÁTICA

Análise Termofluidodinâmica CFD

A análise da termofluidodinâmica computacional foi desenvolvido na Universidade Federal de Campina Grande no Centro de Ciências e Tecnologia da Unidade Acadêmica Engenharia Mecânica no Laboratório Computacional de Térmica e Fluidos (LCTF).

O modelo matemático definido para descrever o processo de troca térmica é baseado na generalização das equações de Navier-Stokes de conservação de massa e quantidade de movimento, adotando a abordagem Euleriana-Euleriana, bem como o modelo de turbulência *RNG k-ε*. Para simplicidade de solução, foram adotadas as seguintes considerações:

RQI - 2º trimestre 2018

- ✓ Fluido Newtoniano incompressível e com propriedades físicas e químicas constantes;
- ✓ Regime permanente e escoamento isotérmico;
- ✓ A reação química, transferência de massa entre as fases e fonte de massas são desconsiderados;
- ✓ As forças interfaciais de arraste foram consideradas;

As equações permanentes da conservação do momento linear, da massa e da energia, consideradas na modelagem matemática proposta no presente trabalho, podem ser expressas matematicamente pelas equações 20, 21 e 22, respectivamente:

$$\nabla \cdot \rho \stackrel{\mathbf{r}}{U} \otimes \stackrel{\mathbf{r}}{U} + \nabla p - \nabla \mu \left\{ \left[\nabla \stackrel{\mathbf{r}}{U} + \left(\nabla \stackrel{\mathbf{r}}{U} \right)^{T} \right] \right\} - \stackrel{\mathbf{r}}{S}_{M} - \stackrel{\mathbf{r}}{M} = 0$$
 (20)

$$\nabla \cdot \left(\rho \stackrel{\mathbf{r}}{U} \right) = 0 \tag{21}$$

$$\nabla \cdot \left(\rho \stackrel{\mathbf{r}}{U} H - \lambda \nabla T \right) = 0 \tag{22}$$

Onde, ρ e U_{α} são respectivamente a densidade e o vetor velocidade, ρ é a pressão, S_{M} representa o termo das forças externas que atuam sobre o sistema por unidade de volume, M_{α} descreve a força total por unidade de volume sobre as fases.

Areprodução numérica do escoamento de água em um trocador casco-tubo, com e sem chicanas, foi avaliada a fim de analisar qual é a influência das chicanas na eficiência do trocador. Para isto, foram realizadas duas simulações numéricas com as mesmas condições de contorno (Tabela 1), variandose as temperaturas e as vazões mássicas nas entradas do tubo e do casco do trocador de calor. Primeiramente foi simulado um trocador sem chicanas, conforme Figuras 3.a e 4.a. Para observar como a presença das chicanas no interior do trocador pode afetar a troca térmica, foram inseridas as

chicanas no mesmo trocador (Figuras 3.b e 4.b).

Tabela 1
Temperaturas e vazões mássicas do fluxo de água utilizadas como condições de contorno para as simulações

	Entradas	Temperatura (°C)	Vazão Mássi ca (kg/s)
CASO 1	Tubo	40	0,17
OAGO I	Casco	25	0,19
CASO 2	Tubo	80	0,50
	Casco	25	1,00

Com o auxílio do software ANSYS CFX, dois modelos de geometrias de trocadores de calor do tipo casco-tubo, contendo ou não chicanas (Ver Figura 3), foram desenvolvidos. A malha numérica representativa do problema é formada por 625.398 elementos tetraédricos, na geometria sem chicanas e 1.828.214 elementos tetraédricos, no domínio com chicanas, conforme Figura 4 (a) e (b), respectivamente.

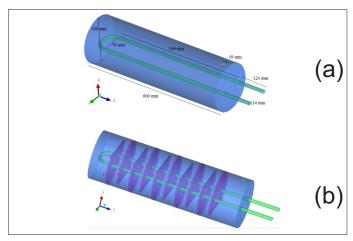


Figura 3 – Representação do trocador de calor casco e tubo com 2 passes nos tubos e um passe no casco (a) sem chicanas e (b) com chicana.

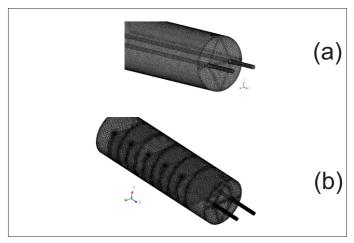


Figura 4 – Representação da malha numérica do trocador de calor (a) sem chicanas com 625.398 elementos tetraédricos e (b) com chicanas com 1.828.214 elementos tetraédricos.

RESULTADOS E DISCUSSÕES

Calor trocado entre as correntes - Aspen®

O calor total trocado entre as correntes foi determinado a partir do uso do número de unidades de transferência (NUT). Elaborou-se uma rotina no software comercial Aspen®, utilizando um trocador com mesma configuração, bem como as mesmas variáveis de entrada e saída, conforme pode ser observado na Figura 5, para comprar com o resultado encontrado anteriormente.

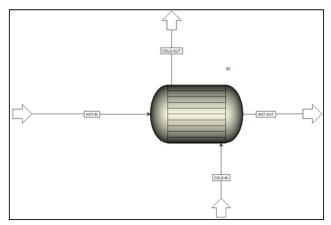


Figura 5 - Tocador de calor simulado no Aspen®

Os dados iniciais da simulação no Aspen® encontram-se na Figura 6, enquanto que os resultados das simulações estão expostos na Figura

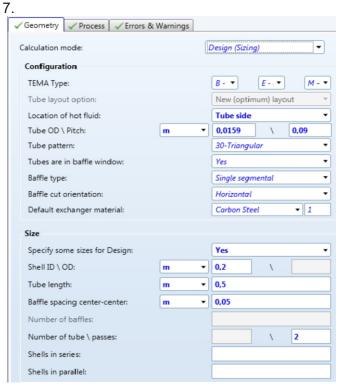


Figura 6 - Valores de entrada do modelo no Aspen® (modelo Robusto)



Figura 7 - Resultados dos cálculos no Aspen®

Dessa forma, o valor do calor calculado pelo método proposto através da simulação computacional utilizando o CFX 15.0, bem como aquele determinado pela simulação em Aspen® e o erro relativo encontra-se na Tabela 2:

Tabela 2
Comparação do calor trocado

Calor total trocado (kJ/kg.K)	Calor total Aspen® (kJ/kg.K)	Erro relativo (%)
8,08410133	9,46690482	14,6

Comparação entre o Microsoft Excel® e no Aspen®

Uma vez conhecido o calor trocado entre as correntes, é possível determinar a troca térmica ocorrida em ambas simulações, em Microsoft Excel® bem como no Aspen®, conforme resultado pode ser observado na Figura 8:

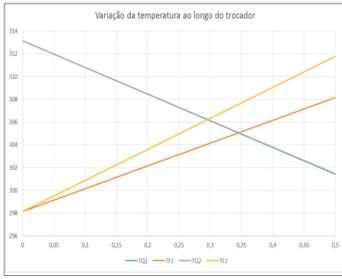


Figura 8 - Variação da temperatura ao longo do trocador

onde o índice Q indica o fluido quente e o índice F indica o fluido frio. E os índices 1 e 2 indicam a simulação em Excel® e a simulação em Aspen®, respectivamente.

Observa-se que para o fluido quente o erro da simulação em Excel® foi mínimo, resultando em uma sobreposição das curvas que descrevem a trajetória da temperatura no trocador. No entanto o comportamento da corrente fria não foi o estimado pela planilha, resultando em um erro significativo, apresentado na Tabela 3:

Tabela 3
Erro no cálculo da temperatura final do fluido frio

	Entradas	Temperatura	Vazão mássica
Caso 1	Tubo	40°C	0,17 kg/s
	Casco	25°C	0,19 kg/s
Caso 2	Tubo	80 °C	0,50 kg/s
	Casco	25 °C	1,00 kg/s

Campo de temperatura usando o CFX 15.0

Com as temperaturas e vazões de água na entrada do tubo e do casco, foram tomadas as temperaturas médias nas seções de saídas para cada simulação numérica, e as estas foram comparadas àquelas calculadas pelo método analítico de NUT. A Tabela 4 ilustra tais resultados e o erro percentual de cada valor numérico. A Figura 9 mostra os campos de temperatura dos casos simulados. Note que as maiores temperaturas são exibidas para o campo do Caso 2, conforme esperado devido maiores vazões que favorece a troca térmica, com consequente aumento de temperatura.

Tabela 4Temperaturas médias da água nas seções de saída

	Saídas	Resultado numérico	NUT	Erro (%)
Caso 1	Tubo	36°C	40°C	10%
	Casco	29°C	30°C	3%
Caso 2	Tubo	68°C	78°C	16%
	Casco	31 °C	33°C	5%

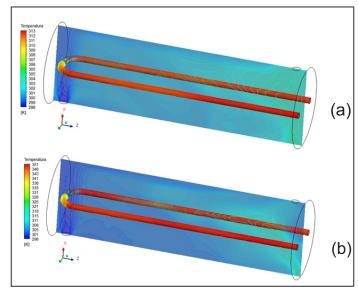


Figura 9 – Campo de temperatura em função da vazão mássica no casco e no tubo para (a) Caso 1 (b) Caso 2

Efeito das chicanas no campo de temperatura

Para a análise do efeito da presença das chicanas na eficiência do trocador, conforme apresenta a Tabela 5, realizou-se a simulação do escoamento de água em um trocador casco-tubo sem e com chicanas. Para tal, foram realizadas duas simulações numéricas com as mesmas condições de contorno, diferenciando-se apenas pela presença das chicanas, ilustrada na Figura 10:

Tabela 5Efeito da presença de chicanas na troca térmica

	Entradas	Temperatura	Vazão mássica
Caso 1 - Sem chicanas	Tubo	80°C	0,5 kg/s
	Casco	25°C	1,00 kg/s
Caso 2 - Com chicanas	Tubo	80 °C	0,50 kg/s
	Casco	25 °C	1,00 kg/s

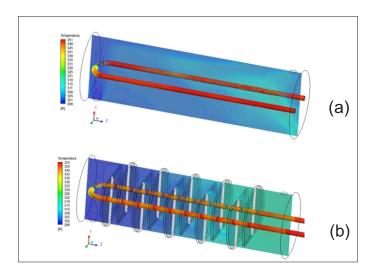


Figura 10 – Campo de temperatura em função da presença das chicanas (a) Caso 1 sem chicanas (b) Caso 2 com chicanas

Pode-se notar, comparando a Figura 10 (a) e (b), que a presença das chicanas aumenta significativamente a eficiência de troca térmica, mesmo submetidas às mesmas condições de escoamento, pois aumenta a superfície de transferência de calor. Em concordância com o trabalho de Fialho (2004), que avaliou a instalação de chicana dentro de um reservatório, o autor afirma que o dispositivo em formato de aleta, aumenta a superfície de troca térmica dentro do reservatório, sem que haja a necessidade do uso de um trocador de calor.

CONCLUSÕES

A partir dos resultados apresentados no presente artigo, pode-se concluir:

- A modelagem matemática proposta foi capaz de representar a dinâmica dos fenômenos físicos envolvidos no processo de transferência de calor utilizando um trocador de calor casco e tubos:
- O método de determinação da eficiência de troca térmica proposto é adequado para tal cálculo, uma vez que apresentou erro relativo de aproximadamente 15% quando comparado com o valor calculado pela plataforma de simulação Aspen Plus®, que utiliza um modelo robusto para o cálculo.
- O cálculo da diferença de temperatura foi bem executado pela planilha de cálculo proposta utilizando o Microsoft Execel, resultando em erro relativo de aproximadamente 1% quando comparado com a plataforma comercial Aspen.
- A partir da análise termofluidodinâmica via software Ansys CFX 15.0® verificou-se que a presença de chicanas aumenta significativamente a eficiência de troca térmica.

AGRADECIMENTOS

Os autores agradecem à Universidade Federal de Campina Grande (UFCG), ao Laboratório Computacional de Térmica e Fluidos do Departamento de Engenharia Mecânica da UFCG e à Faculdade Maurício de Nassau pelo suporte fornecido para o desenvolvimento deste trabalho.

REFERÊNCIAS

CARUSO, G.; MAIO, D. V.; NAVIGLIO, A. Condensation heat transfer coefficient with noncondensable gases inside near horizontal tubes. Desalination. Journal of Power Souces. Roma, v. 309, p 247-254, (2012).

ÇENGEL, Y. A. **Transferência de Calor e Massa**. McGraw Hill, 2007.

DIAS, L. R. S. Operações que envolvem transferência de calor e massa, Internciência Ed, 2009.

FIALHO, A. B. Automação Hidráulica: Projetos, Dimensionamentos e Análise de Circuitos. 2. ed. Tatuapé: Ediitora Érica, 2004.

FOUST, ALAN E CLUMP, C. W. **Princípios das Operações Unitárias**. LTC, 2ª Ed., 1982.

INCROPERA, FRANK P. AND DEWITT, DAVID P. Fundamentals of Heat and Mass Transfer. LTC, 5th Ed, 2003.

KAKAÇ, SADIK, LIU, HONGTAN, PRAMUAN-JAROENKIJ, ANCHASA. **Heat Exchangers: Selection, Rating and Desing.** CRC Press, 2012.

KERN, DONALD Q. **Process Heat Transfer.** Mc Graw Hill, 1980.

ÖZIŞIK, N. N. **Heat Transfer – A Basic Approach.** McGraw-Hill, Singapore, 1985.

RUBBO, P. N. Determinação do Coeficiente Global de Transferência de Calor de um Condensador do Tipo Casco e Tubo de um Chiller por Adsorção de Amônia em Nabr. Universidade Federal de Santa Catarina, Trabalho de Conclusão de Engenharia, 2014.

SANTOS FILHO, S. J.; SOUZA, J. S.; LIMA, A. G. B., Numerical Simulation of the Shell-and-Tube Heat Exchanger: Influence of the Lower Flows and the Baffles on a Fluid Dynamics, Advances in Chemical Engineering and Science 7, n°4, 349–361, 2017. ISSN Online: 2160-0406

SOUZA, J.S; FARIAS NETO, S. R., LIMA, A. G. B., Separação de Líquidos via

Hidrociclone:Termofluidodinâmica. Germany : NEA-Novas Edições Acadêmicas, 2015, v.1. p.156. ISBN:978-3639-69946-3

TEMA. Standards of the Tubular Heat Exchanger Manufactures Association, 7th ed, 1988.

WELTY, R.; WICKS, C. E.; WILSON, R. E. **Fundamentals of Momentum**. Heat and Mass Transfer, 1984.

Avaliação da qualidade do biodiesel a partir de diferentes técnicas de lavagem e purificação

Evaluation of biodiesel quality from different washing and purification techniques

Jessica Aparecida Deluqui Pires, Cláudia Roberta Gonçalves, Danilo Morais Itokagi, Admilson Costa Cunha, Isabel Matos Fraga, Lidiane Renata Zocal Dos Santos, Jéssica Luzia da Silva Leal, Talitha Jesus Carmo Sousa

Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia de Mato Grosso – Campus Cáceres Cáceres-MT, Brasil.
*lidiane.zocal@gmail.com

Submetido em 10/01/2018; Versão revisada em 11/04/2018; Aceito em 04/12/2018

Resumo

Uma das barreiras que impedem o uso do biodiesel como um combustível alternativo é o processo de purificação do mesmo, devido entre outros fatores ao valor econômico e o tempo gasto neste processo. Desta forma, o objetivo deste trabalho consistiu em avaliar os processos de purificação do biodiesel por vários métodos diferenciados de lavagem visando analisar qual método é mais viável sob a ótica econômica, ambiental e sustentável. Existem diversas técnicas de purificação e lavagem de biodiesel, entretanto este trabalho restringiu-se em avaliar algumas variações tanto durante o processo de lavagem quanto de purificação. No primeiro foram testados diferentes tempos, quantidades, tipos de soluções, água destilada, ácido clorídrico, hidróxido de sódio, ácido fosfórico (HCI, NaOH, e H₃PO₄) e no processo de purificação usaram-se diferentes alternativas quanto à utilização de estufa, de centrifuga e de sulfato de sódio anidro para secagem. A partir dos resultados encontrados verificou-se que os métodos de lavagem via úmida e seca, de lavagem com HCl 1% e secagem por Centrífugas foram os melhores, exceto para a porcentagem de umidade.

Palavras-chave: biodisel, purificação, lavagem.

Abstract

One of the barriers that prevent the use of biodiesel as an alternative fuel is the process of purification, due, among other factors, to the economic value and time spent in this process. Thus, the objective of this work was to evaluate the biodiesel purification processes by several different washing methods in order to determine which method is more feasible from the economic, environmental and sustainable perspective. There are several purification and washing techniques of biodiesel. However, this work was restricted in evaluating some variations both during the washing process and purification. In the first one was tested different times, quantities, types of solutions, distilled water, hydrochloric acid, sodium hydroxide, phosphoric acid (HCI, NaOH, and H_3PO_4). In the purification process different alternatives were tested involving the use of greenhouse, centrifuge and anhydrous sodium sulfate for drying. From the results found it was verified that the wet and dry washing, washing with 1% HCI and centrifuge drying methods were the best, except for the humidity.

Keywords: biodisel, purification, washing.

64 RQI - 2° trimestre 2018

INTRODUÇÃO

A sociedade atual encontra-se consciencializada para os problemas levantados pelo consumo abusivo de combustíveis fósseis com significativo impacto no ambiente, aliados ao crescente aumento dos preços do petróleo e a escassez de reservas (SILVA, 2011).

Para minimizar este problema pesquisadores em todo mundo buscam por alternativas energéticas que sejam capazes de atender à demanda mundial. Somando-se ao fato que o Brasil é um país com grande potencial na produção de sementes oleaginosas, fez-se com que surgisse a necessidade de buscarem-se fontes renováveis de energia, tais como os biocombustíveis.

Dentre os biocombustíveis, destaca-se o biodiesel, combustível que pode substituir total ou parcialmente o emprego do óleo diesel.

O biodiesel é um combustível biodegradável composto de alquilésteres de ácidos carboxílicos de cadeia longa, obtido através de diferentes processos tais como o craqueamento, a esterificação ou por transesterificação (RAMOS et al., 2006). Apresenta características similares ao diesel de petróleo, com a vantagem de apresentar emissões reduzidas de material particulado, compostos de enxofre e dióxido de carbono (SILVA, 2010).

O biodiesel pode ser produzido a partir de inúmeras oleaginosas, tais como a soja, girassol, amendoim, canola e algodão, etc.

A qualidade da matéria-prima influencia diretamente o produto final. É necessário que a matéria-prima tenha o mínimo de umidade e de acidez, o que é possível submetendo-a a um processo de neutralização, por meio de uma lavagem com uma solução de hidróxido de sódio ou de potássio, seguida de uma operação de secagem ou desumidificação. A umidade deve ser baixa, pois caso contrário promove a hidrólise dos óleos e gorduras formando ácidos graxos livres, que,

por sua vez, levam à formação de sabões quando neutralizados. A especificidade do tratamento depende da natureza e das condições da matéria-prima selecionada para o processo (CAVALLARI, 2012).

Cavallari (2012) afirma que de todos os processos utilizados na lavagem e purificação do biodiesel, aquele que faz o uso da decantação, é considerado o melhor, pois o glicerol é mais denso que o biodiesel, dessa forma decanta facilmente e arrasta outras impurezas presentes na mistura. Após a decantação, é efetuada a lavagem com água. Mas, apesar desse processo ser de baixo custo e eficiente, é muito lento e gera um volume muito grande de efluente, tornando assim necessária a busca por processos alternativos.

A partir deste contexto este trabalho propõe o estudo de diferentes processos de lavagem e purificação do biodiesel e comparar os resultados através da caracterização físico-química, com as especificações da ANP.

METODOLOGIA

O presente trabalho foi desenvolvido no Laboratório de Química do Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia do Mato Grosso - Campus Cáceres. Ele consistiu na produção de biodiesel para avaliação de diferentes métodos de lavagem e purificação.

O óleo de soja foi adquirido em um supermercado do município de Cáceres, MT. As análises do óleo, foram realizadas no laboratório de química.

O biodiesel foi produzido pela rota metílica por irradiação em micro-ondas. Como matéria-prima para este estudo utilizou o óleo de soja comercial; como catalisador o hidróxido de potássio (KOH) 1% (m/v), como álcool o metanol na razão molar 6:1 (metanol:óleo). Nesta produção englobaram-se as seguintes etapas: preparo da solução de metóxido de potássio e reação de transesterificação por

micro-ondas. Na figura 1 está representado um fluxograma com as etapas do processo de produção do biodiesel.

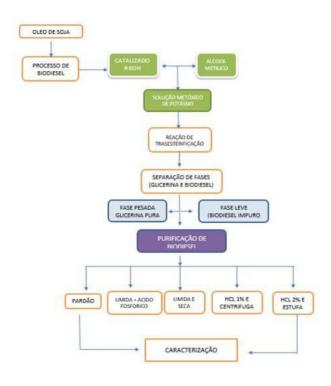


Figura 1: Organograma de produção de Biodiesel

Para a realização da reação de transesterificação inicialmente preparou-se a solução de metóxido de potássio, através da solubilização do catalisador hidróxido de potássio a 1% (m/v), com o metanol, em relação à massa dos óleos e razão molar de 6:1 álcool/óleo.

Em balões de fundo chato colocou-se 100 mL de óleo de soja em seguida foi adicionado ao óleo a solução de metóxido de potássio preparada previamente e levado ao forno micro-ondas, por 60 s. Após este tempo, retirou-se o balão do forno micro-ondas e os produtos obtidos foram levados a um funil de decantação para a separação das fases.

As amostras transesterificadas permaneceram nos funis de decantação por 24 h. Após esse período observou-se que as fases de biodiesel e glicerina estavam visivelmente separadas, a glicerina mais densa na parte inferior e o biodiesel na superior. Posteriormente, a glicerina foi retirada do funil com aferição do seu volume. No funil de decantação permaneceu apenas o biodiesel produzido, estes

foram submetidos ao processo de lavagem a fim de purificar os ésteres presentes e remover resíduos de sabões, ácidos graxos e outras impurezas.

Para esta pesquisa foram produzidas 10 amostras de biodiesel para em seguida, em duplicata, realizar cinco métodos diferentes de lavagem. Os métodos consistiram em:

- O primeiro método, chamado de padrão, é o mais utilizado para lavagem de biodiesel;
- O segundo foi via úmida usando ácido fosfórico (H₃PO₄);
- O terceiro, via úmida e seca utilizando ácido fosfórico (H₃PO₄);
- O quarto processo de lavagem foi realizando usando ácido clorídrico (HCI) 1% v/v, seguida de centrifugação e secagem em estufa;
- Na quinta e última lavagem, usou-se HCl 2% durante a lavagem e a estufa para secagem.

A seguir encontram-se as explicações de cada metodologia:

Lavagem padrão

Para realização da lavagem do biodiesel foram adicionados inicialmente 25 mL de ácido clorídrico (HCI) 5 % (v/v), em cada funil de separação, permanecendo em repouso por um período de 15 min. Este procedimento foi realizado duas vezes. Posteriormente, realizaram-se duas lavagens com 20 mL de uma solução saturada de NaCl. Ao final do processo realizou se a lavagem com 20 mL de água destilada (GERIS, 2007).

Em seguida, realizou-se a secagem do biodiesel utilizando sulfato de sódio anidro (Na₂SO₄). Uma amostra de sulfato de sódio anidro foi adicionada em cada um dos funis de separação e deixada em repouso por um período de 15 min, em seguida, com o auxílio de funis de haste curta, foi realizada a filtração em papel de filtro contendo o Na₂SO₄. O biodiesel purificado foi transferido para provetas graduada a fim de quantificar o volume final e calcular o seu rendimento.

Tradicionalmente, o método usado para

66 RQI - 2° trimestre 2018

separar álcool e glicerol do biodiesel é o método de purificação por via úmida, que consiste na utilização de solventes para extrair impurezas da mistura. Sendo o glicerol e o metanol altamente solúveis em água, a aplicação de água deionizada como solvente é mais comum (CAVALLARI, 2012).

Este método de lavagem consistiu em aquecer 10 mL de água destilada a 50°C e após atingida a temperatura adicionou-se ácido fosfórico (H₃PO₄) 2% v/v. Posteriormente, esta solução foi adicionada ao biodiesel sob agitação lenta e permaneceu em repouso durante 15 min para separação de fases. Posteriormente, retirou a primeira fase do funil de decantação e adicionou-se 15 mL de água destilada com agitação lenta. Novamente permaneceu em repouso por 15 min. para a separação das fases. Repetiu-se este último processo, mais duas vezes com água destilada, usando 20 mL cada.

Em seguida, realizou-se a secagem dos biodieseis utilizando o sulfato de sódio anidro (Na₂SO₄ P.A), conforme explicação feita no item anterior.

Lavagem via úmida e seca

Um dos métodos de purificação, alternativos ao método por via úmida, é o método da lavagem a seco, que consiste no uso de adsorventes para remover impurezas do biodiesel. Tais adsorventes possuem sítios de adsorção básica e ácida, tendo forte afinidade a compostos polares. Após a adição destes à mistura, efetua-se uma filtração que os retêm, obtendo-se um biodiesel com baixas concentrações de impurezas (CAVALLARI, 2012).

Nesse método de lavagem, primeiramente aqueceu 10 mL de água destilada a 50°C e após esta temperatura ter sido alcançada adicionou-se ácido fosfórico (H₃PO₄) a 2%. Posteriormente, adicionou a solução ao biodiesel, e aqueceu-a esta mistura a uma temperatura de 70°C, permanecendo por 5 min.

Em seguida, transferiu-se o biodiesel para um funil de decantação e aguardou 5 min para a separação de fases. Posteriormente, retirou a

solução de ácido fosfórico do funil de decantação, presente na fase inferior. No biodiesel adicionou-se 25 mL de água destilada e agitou lentamente para homogeneizar esta solução, permanecendo em repouso por 15 min. O processo com água destilada repetiu-se mais duas vezes usando 25 mL, e intervalos de repouso de 15 min. Em seguida, realizou-se a secagem do biodiesel utilizando o sulfato de sódio anidro.

Lavagem com HCI 1%, seguida de centrifugação

Para acelerar o processo, pode ser aplicado o método da centrifugação, mas o uso de centrifugas consome energia, tornando o processo mais caro. A etapa de decantação pode durar entre 1 a 8 h, porém, o biodiesel obtido ainda pode apresentar teores elevados de impurezas, se comparados as normas estabelecidas pela ANP (CAVALLARI, 2012).

Este método consistiu em adicionar 25 mL de HCl 1 % (v/v), agitar lentamente e deixar em repouso durante 15 min para separação de fases. Após a retirada da fase inferior adicionou-se 20 mL de água destilada, permanecendo em repouso por 10 min. Repetiu-se esta etapa duas vezes.

Posteriormente a esta lavagem, os biodieseis foram enviados a centrifuga por 10 min. Após a retirada do biodiesel da centrifuga foram levados a estufa a 110°C, durante 1 h para fazer o processo de secagem.

Lavagem com HCI 2% e estufa de secagem

Para realizar este método adicionaram-se 25 mL da solução aquosa de HCl 2 % (v/v) e agitou vagarosamente e permaneceu em repouso durante 15 min para a separação de fases. Após a retirada da fase inferior lavou o biodiesel com 25 mL de água destilada, e agitou lentamente, permanecendo em repouso por 10 min. Repetiu-se três vezes esta etapa, mas a segunda e terceira o tempo de repouso foi 5 minutos. Posteriormente estas amostras foram enviadas para a estufa durante 3 h, para realizar o processo de secagem.

Após a produção e lavagem dos biodieseis seguiu-se para a etapa da caracterização do biodiesel produzido por meio de análises físicas e químicas: rendimento, índice de acidez, porcentagem de ácidos graxos livres, densidade e umidade. Todas estas análises foram realizadas de acordo com a metodologia descrita por Moretto e Alves (1986) e Moura (2010).

RESULTADOS E DISCUSSÃO

A Tabela 1 apresenta os resultados dos índices de acidez das amostras do biodiesel de acordo com os diferentes métodos de lavagem e purificação do biodiesel.

Tabela 1 Índice de acidez dos métodos de lavagem e purificação.

	ÍNDICE DE ACIDEZ
MÉTODOS	(mg KOH/g). ANP: 0,5
1-Lavagem padrão	0,725
2-Lavagem via úmida	0,452
3- Lavagem via úmida eseca	0,52
4-Lavagem com HCl 1% secagem por centrifugação	0,5
5-Lavagem com 2% e secagem por estufa	1,49

De acordo com a análise do parâmetro de acidez, como pode ser verificado através da tabela 1, observou-se que o biodiesel bruto produzido foram purificados por 5 métodos diferentes de lavagem e secagem. A partir destes resultados constatou-se que os métodos 2 e 4 satisfazem às exigências da resolução nº 45 de 2014 da ANP, ou seja, máximo de 0,5 mg KOH/g. O resultado na lavagem com via úmida e seca ficou levemente acima do máximo permitido pela ANP. Este fato pode ser devido a um erro operacional, na leitura do ponto final da titulação, já que o acréscimo foi na segunda casa decimal. Mais repetições desta análise poderia minimizar este resultado. O resultado de acidez para a lavagem com 2% HCI e secagem por estufa apresentou índice de

acidez de 1 mg KOH/g, acima do ideal para o biodiesel. Neste método a acidez elevada pode ser decorrente do tempo de secagem na estufa, que provavelmente tenha ocorrido a reação de hidrólise e, consequentemente o aumento do parâmetro analisado. Estudos com diminuição do tempo de secagem poderiam ser estudadas para este método para avaliar o comportamento da acidez.

Tavares (2012) concluiu que o índice de acidez de um óleo é o indicador da qualidade do mesmo, e isso está diretamente ligado às formas de armazenamento, extração e manuseio do óleo durante a produção.

O biodiesel com elevada acidez é indesejável, pois é responsável por processos corrosivos e formação de depósitos dentro do motor. As condições em que ocorre a reação de transesterificação podem afetar a acidez final do biodiesel (MORAIS et al., 2013).

De Paula et al. (2011), fez um estudo da purificação do biodiesel através das vias úmidas e seca e verificou que estes método é eficiente, já que diminuiu consideravelmente a acidez do biodiesel quando comparados com os métodos de Geris (2007) ou método padrão.

Faccini, (2008) realizou a lavagem do biodiesel comparando diferentes métodos técnicas em diferentes concentrações e H₃PO₄ e via seca com a sílica e magnesol. Encontrou-se uma melhor qualidade de biodiesel com a aplicação de 1% de magnesol e 2% de sílica.

A Tabela 2 apresenta os resultados da porcentagem dos ácidos graxos realizados nos métodos de lavagem e purificação do biodiesel.

Tabela 2Porcentagem de ácidos graxos após métodos de lavagem e purificação.

MÉTODOS	ACIDEZ (%). ANP: 3%
1-Lavagem padrão	9,28
2-Lavagem via úmida	1,29
3-Lavagem via úmida e seca	2,80
4-Lavagem com HCl 1% secagem por centrifugação	2,52
5-Lavagem com 2% e secagem por estufa	2,13

De acordo com a Tabela 2 pode-se observar que em quase todos os métodos de lavagem a porcentagem de ácidos graxos ficou dentro das normas vigentes ANP, ou seja, menor que 3%. Segundo Araújo et al. (2008) a porcentagem de ácidos graxos está diretamente relacionada com índice de acidez.

Entretanto, o 5° método apresentou um índice de acidez elevado e a porcentagem de ácidos graxos dentro dos parâmetros da legislação vigente.

A porcentagem de ácidos graxos no óleo corrobora a elevada acidez, a qual pode estar relacionada ao tratamento dado às sementes durante o armazenamento ou a colheita (ALMEIDA, 2011).

Segundo Medeiros (2011), baixos níveis de ácidos graxos livres, contribuem para a manutenção da integridade da composição química do biodiesel, pois os mesmos em presença de umidade elevada catalisam os processos hidrolíticos de degradação do biodiesel.

A Tabela 3 dispõe os resultados da densidade do biodiesel realizados nos processos e métodos de lavagem e purificação do biodiesel.

Tabela 3Valores de densidade após métodos de lavagem e purificação.

MÉTODOS	DENSIDADE, g/ml
	ANP: 0,850-0,900
1-Lavagem padrão	0,88
2-Lavagem via úmida	0,88
3-Lavagem via úmida e seca	0,88
4-Lavagem com HCI 1% secagem por centrifuga	0,88
5-Lavagem com 2% e secagem por estufa	0,882

Através da Tabela 3, pode-se observar que todos os métodos de lavagem apresentaram resultados dentro dos parâmentos exigidos pela ANP, que estabelece, que para ser comercializado, o biodiesel deve apresentar a massa específica, variando entre 0,850 a 0,900 g/mL (ANP, 2014).

A massa específica decorre da composição relativa dos ésteres graxos e também da presença de impurezas no biodiesel (OLIVEIRA, 2007).

Dapieve et al. (2014) verificou em seu trabalho que a densidade do biodiesel, é ligeiramente superior a do óleo diesel convencional, e exerce efeitos diretos sobre o desempenho do motor devido ao fornecimento de uma massa ligeiramente maior de combustível.

A densidade do combustível, de uma maneira geral, influencia a partida e pressão da injeção, além da pulverização do combustível, de modo a interferir no desempenho do motor de combustão e na emissão de gases, pois altas densidades podem gerar fumaça negra e emissão excessiva de material particulado (BAHADUR et al. apud CAVALCANTE, 2010).

A Tabela 4 apresenta os resultados da análise de umidade realizados nos processos e métodos de lavagem e purificação do biodiesel.

Tabela 4Porcentagem de umidade após os métodos de lavagem

	UMIDADE (%) ANP: 0,02
MÉTODOS	
1- Lavagem padrão	0,0025
2-Lavagem via úmida	0,028
3- Lavagem via úmida e seca	0,006
4-Lavagem com HCL 1% secagem por centrifuga	0,004
5-Lavagem com 2% e secagem por estufa	0,0052

A partir da Tabela 4 é possível verificar que apesar das análises de todos os métodos de lavagem e purificação por umidade apresentaram valores baixos, somente a lavagem padrão encontrou-se mais próximo do máximo permitido pela legislação vigente (0,02%).

Segundo Knothe et al. (2006) a umidade da matéria-prima é um parâmetro importante, pois na presença de água os ésteres podem hidrolisar a ácidos graxos de cadeia longa, causando o aumento na acidez do biodiesel. Segundo Silva (2008) a presença de água no meio reacional promove a desativação do catalisador (quando este for básico) e, posteriormente forma ácidos graxos livres.

Lima Lobato (2011), afirma que a água, em quantidades indesejáveis favorece a saponificação, consumindo o catalisador e diminuindo-se assim a eficiência da reação de transesterificação alcalina.

Outra análise foi o cálculo de rendimento que contribuiu para verificar qual dos métodos de lavagem e purificação obtiveve os melhores resultados a este quesito. A Tabela 5 mostra esses rendimentos.

Tabela 5Rendimento após métodos de lavagem.

PROCEDIMENTO	RENDIMENTO DA LAVAGEM (% m/m)
1-Lavagem padrão	72
2-Lavagem via úmida	79,3
3-Lavagem via úmida e seca	86,6
4-Lavagem com HCl 1% secagem por centrifuga	80
5-Lavagem com HCl 2% e secagem por estufa	62

Observa-se através da Tabela 5 que quase todos os métodos de lavagem e purificação obtiveram um resultado viável, mais o que se destaca com o maior rendimento (86,6%) foi o método de lavagem via úmida e secagem com sulfato de sódio anidro (Na₂SO₄). O método de lavagem com HCI 2% e secagem em estufa apresentou o menor rendimento, de 62%, e acidez fora dos parâmetros da ANP, indicando que, teoricamente podemos descartar este método, pois além de apresentar uma acidez alta também não obteve um rendimento satisfatório.

Por fim e de forma resumida, pode-se observar que quase todas as análises apresentaram resultados adequados, dentro das normas da ANP, que estabelece regras de qualidade para aceitação do biodiesel no mercado. Este trabalho pode apresentar vários métodos de lavagem com intuído de obter novos métodos de lavagem e purificação com menor custo, rapidez e eficiência e dentro das normas da ANP. A partir dos métodos realizados quatro métodos foram satisfatórios.

O método de lavagem padrão é mais usado, no

qual se espera a separação das fase com soluções ou água no biodiesel. Observa-se nesse trabalho que os métodos de lavagem e purificação usados, são completamente diferentes em termos de tempo, soluções e secagem, contudo, o uso do métodos de menor tempo e sem uso do NaCl obteve o melhor resultado, dentro dos parâmetros estabelecidos pela ANP para a maioria dos quesitos analisados. Isso indica que pode haver métodos melhores ambiental e economicamente. O exemplo é cloreto de sódio (NaCl), que não foi usado em nenhum dos processos de lavagem; dessa forma ocorreu uma redução na etapa do processo de lavagem, e mesmo assim manteve-se os padrões do biodiesel. Isso indica que o método padrão não é um método a ser seguido, e que há outras métodos para lavar e purificar o biodiesel e obter a mesma qualidade.

O uso do processo de degomagem também foi muito importante pois ajudou na redução dos fosfolipídios e, consequentemente, nos parâmetros de qualidades dos biodieseis. Da Silva (2013) verificou a eficiência da degomagem do óleo a partir da determinação de fosfolipídios e realizou a análises físico-químicas com este óleo degomado, e obteve a redução de fosfolipídios em 83,19%.

CONCLUSÃO

Com esta pesquisa concluímos que o biodiesel quando não é tratado contém várias impurezas como excesso de glicerol, álcool, água, sedimentos e odores. É necessária uma etapa de lavagem e purificação do biodiesel adequadas para gerar um produto de qualidade.

Os métodos lavagem via úmida, e lavagem com HCl 1% secagem por centrifuga foram considerados os melhores, exceto para a porcentagem de umidade.

Os resultados obtidos nos diferentes métodos de lavagem e purificação foram satisfatórios. A partir deste fato constatou que o método padrão não é um método a ser seguido, e que pode haver outras

formas de se purificar o biodiesel com a mesma qualidade e com maior economia e sustentabilidade.

A purificação por via úmida descrita neste trabalho é uma alternativa viável para o biodiesel, sendo considerado um método eficiente, no qual não se utilizou solução de NaCle sim solução de ácido fosfórico (H₃PO₄), diminuindo, portanto a porcentagem de água usada na lavagem, e consequentemente, minimizando os impactos ambientais.

REFERÊNCIAS

ANVISA- Agência Nacional de Vigilância Sanitária. **REGULAMENTO TÉCNICO PARA ÓLEOS E GORDURAS VEGETAIS.** 2014. Disponível em: http://www4.anvisa.gov.br/base/visadoc/CP/CP%5B 8994-1-0%5D.pdf.Acesso: 14/02/2015.

ANP- Agência Nacional de Petróleo, Gás natural e Biocombustíveis. **BIODIESEL**. 2014. Disponível em: http://www.anp.gov.br/?pg=73292&m = &t1 = &t2 = &t3 = &t4 = &ar = &ps = &cachebust = 1424488404756.

ALMEIDA DE PAULA, et al. Utilização de argilas para purificação de biodiesel. **Quim. Nova**, v. 34, n. 1, p. 91-95, 2011.

ARAÚJO, A. M. M. Caracterização dos índices de acidez e ácidos graxos livres dos óleos de girassol, mamona e dendê visando à produção de biodiesel. **32ª Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química**, 2008.

BERNI V J ; et al. Produção, Caracterização e Purificação de Biodiesel de Blenda de óleo de Fritura e Sebo Bovino. III Congresso Nacional de Engenharia de Petróleo, Gás Natural e Biocombustíveis 2015.

BIODIESEL BR- Biodiesel Brasil. **BRASIL.** 2012 Disponível em:

http://www.biodieselbr.com/biodiesel/historia/oleos-vegetais-biodiesel-brasil.htm Acesso: 15/02/2015.
CAVALCANTE, R. M. Predição Da Densidade De Biodiesel Proveniente De Diferentes Matérias -

primas. 2010 (Dissertação) mestrado em Tecnologia de Processos Químicos e Bioquímicos, Universidade Federal Do Rio De Janeiro, Rio de Janeiro. 2010.

CAVALLARI, P.I.; Avaliação dos processos de purificação do biodiesel por via seca. 2012. 46p. Trabalho de Conclusão de Curso apresentado ao Departamento de Engenharia Química da Escola de Engenharia de Lorena - Universidade de São Paulo.

DA SILVA.W.L.T; Otimização e Avaliação do Impacto Ambiental de uma Unidade de Extração e Purificação de óleo de Mamona; Área de concentração em gestão e tecnologia ambiental; Santa Cruz do Sul, 2013.

Dall'Agnol, A. **Por que fazemos biodiesel de soja**. Dez. 2007. Disponível em: 5 ago. 2008

FACCINI.S.C Uso de Adsorventes na purificação de Biodiesel de óleo de soja. UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRENDE DO SUL; Instituto de Química, 2008

GERIS, R.et al. Biodiesel de soja :reação de transesterificação para práticas de química orgânica. **Química Nova,** v. 30, n. 05, p. 1369-1373, 2007.

KNOTHE, G; et al. **Manual de biodiesel.** São Paulo: Edgard Blucher, 2006.

LIMA Lobato, A. K. C. et al. Caracterização de mistura de óleo de mamona e soja visando a produção de biodiesel. Trabalho apresentado ao 6° Congresso Brasileiro de P&D em Petróleo de Gás, Florianópolis, 2011.

MORETTO, E; ALVES, R. Óleos e Gorduras Vegetais. Editora da UFSC, Florianópolis, 1986.

MORAIS et al. Cor ASTM: Um Método Simples e Rápido Para Determinar a Qualidade ao Biodiesel Produzido a Partir De Óleos Residuais de Fritura. **Química Nova**, v. 36, n. 4, p. 587-592, 2013.

OLIVEIRA, A. P.; et al Congresso da Rede Brasileira de Tecnologia de Biodiesel: livro de resumos, Brasília, 2007.

RAMOS, L. P. et al. Tecnologias de Produção de Biodiesel. **Revista Virtual de Química,** v. 3, n. 5, p. 385-405, 2011.

SILVA, G.A.M. Síntese enzimática, caracterização físico-química e térmica de biodiesel de sebo bovino por rota etílica. 2009. 99 p. Dissertação (Mestrado em Engenharia Química). Escola de Engenharia de Lorena, Universidade de São Paulo, Lorena.

SILVA, L. L. Estudo de óleos residuais oriundos de processo de fritura e qualificação desses para obtenção de monoésteres (Biodiesel). 2008, 52 p. Dissertação (mestrado em Engenharia Química).

Universidade Federal de Alagoas. Centro de Tecnologia. Maceió.

TAVARES, D.C. Estudo do efeito das misturas de óleos de pinhão manso, fritura e sebo bovino na produção de biodiesel. 2012, 112 p. Dissertação (Mestrado em Engenharia Química). Instituto de Tecnologia, Universidade Federal Rural do Rio de Janeiro, Seropédica.

VENTURINI, O. J.; LORA, E. E. S. **Biocombustíveis** vol. 1. Rio de Janeiro: Interciência, 201

72 RQI - 2° trimestre 2018

Síntese da 2-amino-1,4-naftoquinona pela reação de staudinger

Synthesis of 2-amino-1,4-naphthoquinone by staudinger reaction

Henrique José Coroado dos Santos e *Raphael Salles Ferreira Silva

Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia do Rio de Janeiro (IFRJ), Campus Rio de Janeiro. *raphael.silva@ifrj.edu.br

Submetido em 12/04/2018; Versão revisada em 07/05/2018; Aceito em 07/05/2018

Resumo

A 2-amino-1,4-naftoquinona é um intermediário sintético empregado na preparação de vários produtos em Química Medicinal. Este trabalho apresenta um método alternativo de preparação desse intermediário por meio da reação de Staudinger. O método desenvolvido neste trabalho proporcionou a síntese da 2-amino-1,4-naftoquinona com rendimento de 77 % em uma reação em rápida e segura.

Palavras-chave: Naftoquinona, Redução de azidas, Reação de Staudinger.

Abstract

2-Amino-1,4-naphthoquinone is a synthetic intermediate used for the preparation of several products in Medicinal Chemistry. This work presents an alternative method for the preparation of this intermediate by the Staudinger reaction. The method developed in this work has furnished the 2-amino-1,4-naphthoquinone with yield of 77% through a fast and safe process.

Keywords: Naphthoquinone, Azide reduction, Staudinger reaction.

INTRODUÇÃO

A 2-amino-1,4-naftoquinona (1) é um intermediário químico versátil que já foi empregado na síntese de diversos compostos com potencial interesse farmacológico (ALY et al. 2012; DA SILVA et al. 2018). Entre as mais relevantes está a N-(1,4-Dioxo-1,4-diidronaftalen-2-il)-benzamida (2) que apresenta uma promissora atividade para o tratamento de doenças neurodegenerativas especialmente o mal de Parkinson (JOSEY et al. 2013). Aeken e colaboradores empregaram a 2amino-1,4-naftoquinona para a síntese do oxazol (3) e análogos (AEKEN et al. 2011). Jordão e colaboradores sintetizaram N,O acetais (4) em uma reação multicomponente com álcoois, formaldeído e 1, os quais apresentaram atividade antibacteriana (Jordão et al. 2013). Análogos do antimalárico parvacona (5) também foram sintetizados por meio de uma reação via radical livre entre 1 e a cicloexilhidrazina mediada por ácido-iodoxibenzóico (PATIL & AKAMANCHI 2017).

Figura 1: Usos da 2-amino-1,4-naftoquinona em química medicinal.

A 2-amino-1,4-naftoquinona já foi preparada na primeira metade do século XX a partir da 1,4-naftoquinona e azida de sódio em ácido acético (FIESER & HARTWELL 1935) com rendimentos moderados. Outro método publicado na literatura de

preparação da 2-amino-1,4-naftoquinona envolve a hidrólise ácida da 2-azido-1,4-naftoquinona gerada *in situ* pela reação da 1,4-naftoquinona e ácido hidrazoico (HN₃) (COULADOUROS et al. 1997) embora o rendimento desse processo seja de alto, ele não é muito seguro, visto que o ácido hidrazoico é exatamente tóxico e explosivo,

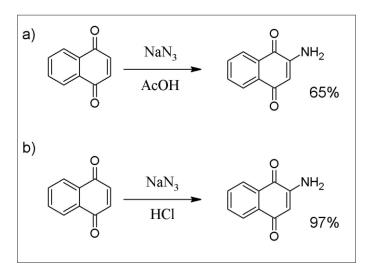


Figura 2: Métodos de síntese da 2-amino-1,4-naftoquinona.

A reação de Staudinger promove a conversão do grupo azida em amina pela ação da trifenil-fosfina em meio aquoso, mesmo em reações que a amina é gerada *in situ* para a síntese de derivados nitrogenados derivados de carboidratos (MISHRA et al. 2017) e em reações multicomponentes (XIONG et al. 2017). Esse trabalho propõe a preparação da 2-amino-1,4-naftoquinona pela redução do derivado azida, mas em condições mais brandas e seguras por meio da reação de Staudinger.

MATERIAIS E MÉTODOS

Reagentes

Os reagentes 2-Bromo-1,4-naftoquinona, trifenilfosfina e azida de sódio foram adquiridos comercialmente da empresa Sigma-Aldrich LTDA.

Preparação 2-amido-1,4-naftoquinona

237 mg (1 mmol) de 2-bromo-naftoquinona e 97 mg (1,5 mmol) de azida de sódio foram dissolvidos

74 RQI - 2° trimestre 2018

em etanol e submetidos a agitação magnética por 1,5 h quando 393 (1,5 mmol) de trifenilfosfina foram adicionados, após o termino da liberação de N_2 (15 minutos) 10 ml de água foram adicionados à mistura ocorrendo à precipitação de um sólido amorfo marrom escuro. O solvente foi evaporado a pressão reduzida e o sólido formado foi filtrado a vácuo e cromatografado em coluna de gel de sílica sendo eluído com uma mistura de Hexano-Acetato de etila 9:1 sendo isolado após evaporação do solvente como um sólido alaranjado (134 mg, 77 % de rendimento).

Identificação e elucidação estrutural

A 2-amino-1,4-naftoquinona teve sua estrutura determinada por Ressonância Magnética Nuclear de Hidrogênio (¹H-RMN) e Espectroscopia de Infravermelho por Transformada de Fourier (IV-FT). As análises por ¹H-RMN foram realizadas em um Espectrofotômetro de Ressonância Magnética Nuclear por Transformada de Fourier de campo baixo-90 MHz- marca Anasazi (Indianapolis, IN, EUA). As análises por IV-FT foram realizadas em um equipamento de Espectroscopia de Infravermelho por transformada de Fourier modelo Alpha marca Bruker (Billerica, MA, EUA). Os dados físicos da 2amino-1,4-naftoquinona já estão disponíveis na literatura (COULADOUROS et al. 1997) assim os dados de ponto de fusão, IV-FT e ¹H-RMN obtidos experimentalmente neste trabalho foram comparados com os dados publicados na literatura onde foi evidenciado que 2-amino-1,4-naftoquinona foi sintetizada com sucesso.

Dados físicos

2-amino-1,4-naftoquinona (COULADOUROS et al. 1997).

Sólido laranja.

Ponto de Fusão: 202-204 °C

IV (sólido) 3392, 1685, 1618 cm⁻¹

¹H NMR (200 MHz, CDCl3) δ 8.07 (m, 2H), 7.68 (m,

2H), 6.01 (s, 1H), 5.14 (s, 2H)

2-amino-1,4-naftoquinona (dados experimentais

obtidos neste trabalho).

Sólido laranja.

Ponto de Fusão: 202-204 °C

IV (sólido) 3394, 1686, 1620 cm⁻¹

¹H NMR (90 MHz, CDCl3) δ 8.11 (m, 2H), 7.73 (m,

2H), 6.05 (s, 1H), 5.31 (s, 2H)

RESULTADOS E DISCUSSÃO

O intermediário chave da síntese da 2-amino-1,4-naftoquinona é a 2-azido-1,4-naftoquinona já que o grupo azida pode ser hidrolisado seja em maio ácido ou pela reação de Staudinger ou reduzido para fornecer o grupo funcional amina (CHANDRASEKHAR et al. 2006; AHAMMED et al. 2011). O intermediário 2-azido-1,4-naftoquinona já foi eficientemente preparado partir da 2-bromo-1,4-naftoquinona em bom rendimento (SARKAR et al. 2015).

Entretanto, os métodos mostrados na **Figura 2** baseiam-se na geração do intermediário 2-azido-1,4-naftoquinona *in situ* e posterior hidrólise ácida do grupo azido a amina. Esses métodos demandam grande excesso do íon azida, meio fortemente ácido e longos tempo de reação.

Nossa abordagem teve como principais pontos a geração da 2-azido-1,4-naftoquinona *in situ* a partir da 2-bromo-1,4-naftoquinona e a hidrólise do grupo azida pela reação de Staudinger visando a síntese da 2-amino-1,4-naftoquinona em condições mais seguras e em menor tempo de reação.

A síntese da 2-amino-1,4-naftoquinona foi então realizada conforme mostrado na **Figura 3**, o emprego do etanol se mostrou mais adequado que outros solventes por possibilitar dissolução adequada da azida e da 2-bromo-1,4-naftoquinona, rapidamente a solução reacional alterou sua cor de amarelo para a laranja, após uma hora e meia foram adicionados trifenilfosfina e água para a realização da reação de Staudinger, após isolamento e purificação a 2 - a m i n o - 1 , 4 - n a f t o q u i n o n a a

2-amino-1,4-naftoquinona foi obtida em 77% de rendimento.

Figura 3: Síntese da 2-amino-1,4-naftoquinona pela reação de Staudinger.

O mecanismo proposto para a síntese da 2-amino-1,4-naftoquinona a partir da 1,4-naftoquinona está mostrado na **Figura 4** onde na primeira etapa ocorre o ataque nucleofílico do ácido hidrazoico ao carbono sp^2 na posição 2. As demais etapas envolvem a tautomerização e posterior eliminação de nitrogênio gasoso e tautomerização final para fornecer a 2-amino-1,4-naftoquinona.

Figura 4: Mecanismo de reação proposto para a síntese da 2-amino-1,4-naftoquinona a partir da 1,4-naftoquinona.

O mecanismo proposto para a síntese da 2-amino-1,4-naftoquinona a partir da 2-bromo-1,4-naftoquinona está mostrado na **Figura 5** onde na primeira etapa ocorre o ataque nucleofílico do íon azida ao carbono sp^2 na posição 2 ligado ao átomo de bromo, formando um aduto que posteriormente ocorre a saída do átomo de bromo formando o intermediário 2-azido-1,4-naftoquinona que sofre então a reação de Staudinger. O ataque nucleofílico da trifenilfosfina ao átomo de nitrogênio terminal do grupo azida que após rearranjo e eliminação de nitrogênio gasoso foram uma espécie de ilídeo iminofosforano, que é posteriormente hidrolisado para fornecer a 2-amino-1,4-naftoquinona e oxido de trifenilfosfina.

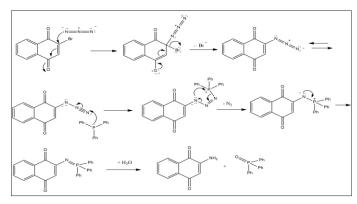


Figura 5: Mecanismo de reação proposto para a síntese da 2-amino-1,4-naftoquinona a partir da 2-bromo-1,4-naftoquinona.

A diferença de velocidade entre as duas reações, 15 h para a reação descrita na Figura 4 e 1,75 h para a reação descrita na Figura 5 pode estar associada aos mecanismos de reação. O ácido hidrazoico é muito menos nucleofílico que o íon azida e o íon brometo é uma base fraca o que o torna um grupo de saída estável favorecendo a reação de substituição. Esses fatores fazem com o que o processo desenvolvido neste trabalho apresente condições termodinâmicas mais favoráveis que levaram a uma cinética mais rápida para reação de Staudinger.

CONCLUSÃO

O trabalho apresenta um método eficiente, seguro e rápido para a preparação da 2-amino-1,4-naftoquinona. A reação de Staudinger se mostra eficiente para redução de intermediários azida gerados *in situ*.

AGRADECIMENTOS

Os autores também agradecem ao CNPq, ao IFRJ pelo apoio financeiro (Edital PROCIÊNCIA) e pela bolsa de estudos de Henrique José C. dos Santos (Edital PIBICT/CNPq). Os autores também desejam expressar seus sinceros agradecimentos a química Maria do Carmo F. R. Pinto e ao Laboratório de Multiusuário de Análises por RMN do Instituto Walter Mors de Pesquisa de Produtos Naturais da UFRJ pelas análises por RMN.

76 RQI - 2º trimestre 2018

REFERÊNCIAS

AEKEN, S. V.; DEBLANDER, J.; DE HOUWER, J.; MOSSELMANS, T.; TEHRANI K. A., Unexpected reaction of 2-amino-1,4-naphthoquinone with aldehydes: new synthesis of naphtho[2,1-d]oxazole compounds. **Tetrahedron** v. 67, p. 512-517, 2011.

AHAMMED, S.; SAHA, A.; RANU, B. C., Hydrogenation of Azides over Copper Nanoparticle Surface Using Ammonium Formate in Water. **Journal of Organic Chemistry**, v.76, p. 7235-7239, 2011.

ALY, A.A.; ISHAK, E.A.; ALSHARARI, M.A.; ALM UAIKEL, N.S., BEDAIR, T.M.I., Aminonaphthoquinones in heterocyclization. **Journal of Heterocyclic Chemistry**. v. 49, p. 9-20, 2012.

CHANDRASEKHAR, S.; PRAKASH, S. Y.; RAO, C. L., Poly(ethylene Glycol) (400) as Superior Solvent Medium against Ionic Liquids for Catalytic Hydrogenations with PtO₂ **Journal of Organic Chemistry**, v. 71, p. 2196-2199, 2006.

COULADOUROS, E. A.; PLYTA, Z. F.; HAROUTOUNIAN, S. A.; PAPAGEORGIOU, V. P., Efficient Synthesis of Aminonaphthoquinones and Azidobenzohydroquinones: Mechanistic Considerations of the Reaction of Hydrazoic Acid with Quinones. An Overview. **Journal of Organic Chemistry**. v. 62, p. 6-10, 1997.

DA SILVA, W. A.; DA SILVA, L. C. R.P.; CAMPOS, V. R.; DE SOUZA, M. C. B. V.; FERREIRA, V. F.; DOS SANTOS, A. C. P. B.; SATHLER, P. C.; DE ALMEIDA, G. S.; DIAS, F. R. F.; CABRAL, L. M.; DE AZEREDO, R. B. V.; CUNHA, A. C., Synthesis and antitumor evaluation of hybrids of 5,8-dioxo-5,8-dihydroisoquinoline-4-carboxylates and carbohydrates. **Future Medicinal Chemistry**. v. 10, p. 527-540, 2018.

FIESER, L. F. & HARTWELL, J. L. The Reaction of

Hydrazoic Acid with the Naphthoquinones. **Journal** of the American Chemical Society. v. 57, p. 1482-1484, 1935.

JORDÃO, A. K.; NOVAIS, J.; LEAL, B.; ESCOBAR, A. C.; DOS SANTOS JR H. M.; CASTRO, H. C.; FERREIRA, V. F., Synthesis using microwave irradiation and antibacterial evaluation of new *N*, *O*-acetals and *N*, *S*-acetals derived from 2-amino-1,4-naphthoquinones. **European Journal of Medicinal Chemistry**. v. 63, p.196-201, 2013.

JOSEY, B. J.; INKS, E. S.; WEN, X.; CHOU, C. J., Structure–Activity Relationship Study of Vitamin K Derivatives Yields Highly Potent Neuroprotective Agents. **Journal of Medicinal Chemistry**, v. 56, p. 1007-1022, 2013.

MISHRA, K. B.; AGRAHARI, A. K.; TIWARI, V. K., One-pot synthesis of oxazolidine-2-thione and thiozolidine-2-thione from sugar azido-alcohols. **Carbohydrate Research**. v. 450, p. 1-9, 2017.

PATIL, P. C. & AKAMANCHI, K. G.; A new combination of cyclohexylhydrazine and IBX for oxidative generation of cyclohexyl free radical and related synthesis of parvaquone. **Tetrahedron Letters**, v. 58, p. 1883–1886, 2017.

SARKAR, S. K.; SAWAI, A.; KANAHARA, K.; WENTRUP, C.; ABE, M.; GUDMUNDSDOTTIR, A. D., Direct Detection of a Triplet Vinylnitrene, 1,4-Naphthoquinone-2-ylnitrene, in Solution and Cryogenic Matrices. **Journal of the American Chemical Society**. v. 137, p. 4207-4214. 2015.

XIONG, J.; WEI, X.; YAN, Y. M.; DING, M.W., One-pot and regioselective synthesis of 3,4-dihydroquinazolines by Sequential Ugi/Staudinger/aza-Wittig reaction starting from functionalized isocyanides. **Tetrahedron**. v.73, p. 5720-5724, 2017.

RQI - 2º trimestre 2018

Electroflocculation as a tool for teaching design of experiments

Eletrofoculação como ferramenta para o ensino de delineamentos experimentais

Danilo M. Itokagi, Karine F. Zancanaro, Marcos R. G. Leal, Jacqueline L. Gregol, Emerson O. Figueiredo, *Isabel M. Fraga

Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia de Mato Grosso Campus Cáceres - Prof^o Olegário Baldo. Cáceres-MT, Brasil

*isabel.fraga@cas.ifmt.edu.br

Submetido em 07/07/2017; Versão revisada em 16/03/2018; Aceito em 07/05/2018

Abstract

This work aimed at presenting the electroflocculation treatment of water as well as the statistical tool called Design of Experiments to evaluate factor effects on methyl orange percent removal from aqueous solution. Two factors, reaction time and amount of support electrolyte, were evaluated at two levels: 5 and 10 minutes, and 0.585 g and 2.930 g of NaCl salt, respectively. The results showed that main and interaction effects were statistically significant at 95% level. The average removal of methyl orange from aqueous solution reached 99.83 % as the reaction time and the amount of NaCl salt factors were fixed at high levels – 10 minutes and 2.930 g, respectively. The interaction plot showed that reaction time effect depends on the level fixed for the amount of salt factor. The reaction time effect is greater when the other factor is at low level.

Keywords: electroflocculation, experimental design, chemometrics.

Resumo

O presente estudo teve como objetivo apresentar o tratamento de eletrofloculação da água, bem como a ferramenta estatística denominada delineamento experimental para avaliar o efeito dos fatores na remoção de percentual de alaranjado de metila de soluções aquosas. Dois fatores, tempo reacional e quantidade de eletrólito de suporte, foram avaliados em dois níveis: 5 e 10 minutos, e 0,585 g e 2,930 g de sal NaCl, respectivamente. Os resultados mostraram que os efeitos principal e de interação apresentaram um nivel de significância estatística de 95%. A porcentagem de remoção média do alaranjado de metila das soluções aquosas foi 99,83%, quando os fatores tempo reacional e quantidade de NaCl foram fixados nos maiores níveis (10 minutos e 2,930 g, respectivamente). A curva de interação mostra que o efeito do tempo reacional depende do nível da quantidade de NaCl fixada. O efeito do tempo reacional será maior quanto menor for o fator quantidade de NaCl.

Palavras-chave: eletroflocução, delineamento experimental, quimiometria.

78 RQI - 2° trimestre 2018

INTRODUCTION

This educational work has two goals. One is to present the eletroflocculation treatment of waste water and the other is to show the application of the statistical tool, design of experiments, to evaluate quantitatively two factors that affect the performance of that process in removing dye compounds from aqueous solution.

The conventional treatment methods for removal of organic matters from waste waters employ biodegradation, but it takes longer time and is not efficient as the effluent contains great amount of toxic organic contaminants such as azo dyes. The electrochemical process might be a better alternative since it is faster and not sensitive to toxic organics because it doesn't rely on microorganism activity.

The electrolytic cell is composed of two active electrodes (cathode and anode), generally made of aluminum or iron, a source of continuous current and the electrolytic recipient where resides the problem solution. A support electrolyte must be added in order to increase the amount of current in the system. Iron and aluminum are usually the chosen metals because they are abundant and produce trivalent cations (M³+) which hydrolyze and transform into insoluble hydroxides that form colloidal particles responsible for the adsorption of the dye molecules or other small particles, forming agglomerates that settle down.

The organic dyes are removed from the aqueous medium in the eletroflocculation process not only by adsorption onto colloidal particles as previously mentioned. Metal atoms, dye and water molecules undergo oxidation at the anode. Due to water oxidation, oxygen gas is released from it. At the cathode the metal cations, which were generated at the anode, are reduced as well as water molecules and that's why hydrogen gas is also released from this electrode.

Neto et al., (2011) have recently presented an educational paper suggesting an experiment about electroflocculation for undergraduate students. In

their work besides a good explanation of the mechanism by which an organic contaminant is removed and broken down by that process, they also showed the influence of three parameters that affects orange II dye removal efficiency: type of active electrode, current density and temperature. They concluded that the electroflocculation system produces better dye removal results when aluminum active electrode, high temperature and high current density are employed.

In this study we chose to work with methyl orange compound (MO), which is similar to the azo dye orange II as the target molecule to be removed from the aqueous solution. Since the previous work also mentioned that aluminum is better than iron, we decided to select aluminum as the active electrode and two factors or parameters were quantitatively evaluated: reaction time and amount of NaCI salt added as support electrolyte.

Instead of one-at-a-time approach in which the analyst fixes one factor at one level whilst vary the levels of the other factor, in this study we set up a factorial design. By this approach each factor level is combined with the levels of the other factor. If k factors are combined in two levels, 2^k different experimental conditions or treatments will be generated. Since two factors were studied at two levels, the number of different experiments were $2^2 = 4$. In order to assess the statistical significance of the factor effects the error must be estimated that is why in this work one replicate for each experiment were also performed generating a total of 8 experiments.

Guedes et al., (2013) reasoned about the lack of educational work on chemometrics and described a simple experiment to evaluate the influence of three factors - cooling temperature, dissolution temperature and gelatin to water ratio (m/m) - on setting-time of comercial gelatins.

Krawczyk, Slupska and Baj, (2015), presented an educational article which studied the influence of three factors - hemin, NaOH and urea hydrogen peroxide concentrations - on the light

emission length (seconds) of luminol during its oxidation. The statistical analysis involved the calculated effects (mains effects and interactions), an ANOVA table and the predicted values. Ligouri (2017) described a tasting experiment to teach statistical experiment designs. The author studied the effect of two factors, lemon juice and baking powder amount (grams) on the taste of lemon cakes. The author built up a mathematical model, plotted the three dimensional graph of the factors against the response variables (fluffiness, lemon taste and overall rating) and constructed the contour plots. After, s/he validated the model comparing some experimental results to predicted values.

Both works in the previous paragraph are excellent, but the first one uses some expensive chemicals, such as luminol, and the second is very time consuming as it takes long to make the cakes and to collect the variable response which is based on sensory panels (it requires lots of people to taste the cakes and grade them). The experiment we suggest uses cheaper chemicals and it only takes about 3 hours or less if all the materials and reagents are previously arranged by the laboratory technician.

MATERIALS AND METHODS

Aluminum wires that might be bought from an electrotechnical store; 12 V continuous current source; 500 mL volumetric bottle for MO stock solution; 50 mL volumetric bottles for work problem solutions; 5 mL micropipette; 50 mL beakers as the electrolytic cell recipient; 250 mL Erlenmeyers to collect the filtrates; Filtration funnel; Qualitative filter paper; Methyl Orange (C₁₄H₁₄N₃NaO₃S Dinâmica); NaCl salt (Sigma-Aldrich 99-100,5%); Spatula; Glass rod; Spectrophotometer UV-Vis model NOVA 6100 UV; a wood disk with two holes distant from each other by 2 cm (this is the electrode support in the electrolytic cell) acquired from the carpentry sector of the Institute Federal of Mato Grosso.

Calibration of the spectrophotometer UV-Vis

- 1) 500mL of stock solution of MO (methyl orange) 100 mg L⁻¹ were prepared using distilled water as solvent.
- 2) The six work solutions were prepared in 50 mL volumetric bottles from stock solution. The concentration of each work solution was 1.0 mg L⁻¹, 2.0 mg L⁻¹, 5.0 mg L⁻¹, 10.0 mg L⁻¹, 20.0 mg L⁻¹ and 30.0 mg L⁻¹. See Table 1.
- 3) The spectrophotometer was calibrated using the previous work solutions and the absorbance readings were performed at 464 nm wavelength.

Table 1Preparation of the work solutions

Work Solution Concentration	Aliquots of the Stock Solution
1.0 mg L ⁻¹	0.5 mL
2.0 mg L ⁻¹	1.0 mL
5.0 mg L ⁻¹	2.5 mL
10.0 mg L ⁻¹	5.0 mL
20.0 mg L ⁻¹	10.0 mL
30.0 mg L ⁻¹	15.0 mL

Electroflocculation experiment

- 1) The MO concentration used in the electroflocculation experiment is 30.0 mg L⁻¹ which is the upper limit of the calibration curve.
- 2) The amount of b₁ grams of NaCl salt (0.585 or 2.930 grams) were weighed in each beaker according to the experiment identification in Table 2.
- 3) 50 mL of 30.0 mg L⁻¹ MO solution were added to each 50 mL beaker.
- 4) The aluminum electrodes were inserted into the wood disk support.
- 5) The mixture was mixed with a glass rod for 40 seconds to dissolve the salt.
- The electrode set was fit over the 50 mL beaker containing MO solution and the 12V source turned on.
- 7) The process took b₂ minutes according to the experiment identification in Table 2.
- 8) The power source was turned off and the

80 RQI - 2° trimestre 2018

treated solution left for 10 minutes in a water bath to cool down.

- 9) The mixture was then filtrated and the absorbance reading at 464 nm was performed for each final filtrate.
- 10) The percent removal of MO from the aqueous solution, which is the response variable, were calculated according to the following equation 1.

$$R = \left(\frac{C_{filtrate} - 30}{30}\right) 100 \tag{01}$$

R - MO removal %.

C_{filtrate}- final concentration of MO (mg L⁻¹) in the filtrate.

The 2² Factorial Design

In the electroflocculation process we aimed at evaluating two factors, reaction time and amount of NaCl at two levels: reaction time from 5 to 10 minutes and amount of salt from 0.585 to 2.930 grams (which correspond to salt molar concentrations of 0.2 and 1.0 mol L⁻¹, respectively). The combination of each factor level with one another produces 4 different experiments. Those would be enough to evaluate the main factor and interaction effects, but to statistically verify the significance of them we must perform replicates so that we can compare the effect values to the standard deviation (MONTGOMERY, 2005; BRUNS, SCARMINIO and NETO, 2007; HUNTER, HUNTER and BOX, 1978). In Table 2 the 2² factorial design is presented with 8 experiments in which each of the original four combinations are replicated.

Table 2Design of a 2² factorial experiment with replicates

Order	Experiment Identification	Amount of NaCl (A)	Reaction Time (T)	x_l	x ₂
4°	1	0.585 g	5 min	-1	-1
3°	2	2.930 g	5 min	1	-1
80	3	0.585 g	10 min	-1	1
5°	4	2.930 g	10 min	1	1
6°	5ª	0.585 g	5 min	-1	-1
7°	6ª	2.930 g	5 min	1	-1
2°	7ª	0.585 g	10 min	-1	1
1°	8ª	2.930 g	10 min	1	1

a: these array of experiments are replicates of experiments 1 to 4.

The two last columns presented the variables in the coded form:

$$x_{coded} = \frac{b_{natural} - \left(\frac{b_{high} + b_{low}}{2}\right)}{\left(\frac{b_{high} - b_{low}}{2}\right)}$$
(02)

In which $b_{natural}$ is the natural variable value, b_{high} and b_{low} are its natural values at high and low levels. For example for the amount of salt factor (x_2) the coded value are calculated by equation 3.

$$x_2 = \frac{b_2 - \left(\frac{10 + 5}{2}\right)}{\left(\frac{10 - 5}{2}\right)} \tag{03}$$

In which b₂ is the reaction time values.

In order to prevent the cofounding of the nuisance factors (uncontrollable and unknown influences) with the effects, the randomization of the experiments must be done before performing them (BRUNS, SCARMINIO and NETO, 2007; HUNTER, HUNTER and BOX, 1978). The first column in Table 2 shows the order in which the experiments were carried out.

RESULTS AND DISCUSSION

Table 3 shows the MO percent removal for each experiment. When we look at this table it seems no meaningful information can be extracted from it. But in Figure 1 the data were arranged in such a way that we can see the factor effects. The square corners represent each of the four original experiments. The left signal in the corner represents the level of x_1 (amount of salt) and the right one, the level of x_2 (reaction time). For instance, the corner " - - " is the experiment performed at lower amount of salt

(0.585 g) during less time (5 minutes). The corner "+-" represents the experiment performed at higher amount of salt (2.93 g) during less time (5 minutes) and so on.

 Table 3

 MO percentage removal from the problem solution

Experiments	x_l	Х2	x_{12}^{2}	R1 ⁶ (%)	R2b (%)	Rs ^c (%)	Varianced
1 e 5	-1	-1	1	46.71	45.67	92.38	0.55
2 e 6	1	-1	-1	92.24	91.90	184.14	0.06
3 e 7	-1	1	-1	74.00	75.90	149.90	1.81
4 e 8	1	1	1	99.90	99.76	199.67	0.01

a: this column results from the multiplication of x₁ and x₂ columns and accounts for interaction effect; b: R1 and R2 are MO removals of the replicates 1 and 2 respectively; c: Rs is sum of R1 and R2; d: variance of the replicates R1 and R2.

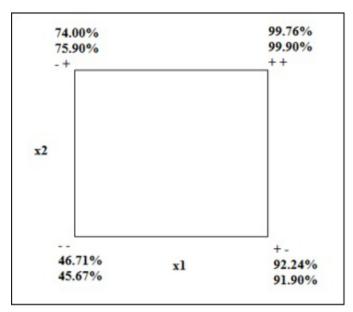


Figure 1. Square representation of the effects

We can clearly see as the amount of salt increased (x_1 ranged from -1 to +1) the process removed greater amount of MO from aqueous solution - the removal percentages ranged from [46.71 and 45.67%] to [92.24 and 91.90%]. As the reaction time increased (x_2 ranged from -1 to +1) the MO removals also increased – the results changed

from [46.71 and 45.67%] to [74.00 and 75.90]. And as both factors are changed from -1 to +1, the MO removal increased further from [46.71 and 45.67%] to [99.76 and 99.90%].

Just by inspecting the square in Figure 1, without going into the statistic tests of significance we notice that the two factor effects are impacting, because it is clear that corner-to-corner differences are greater than differences inside each corner, which means the effects have overcome the noise and were visually detected.

Two main effects and one interaction effect might be estimated by a 2^2 factorial experiment design. The main effects were named A and T for amount of NaCl salt and reaction time, respectively. The first order interaction effect was AT. Using the data presented in Table 3 we can easily determine the effects by calculating the contrasts related to each factor. Considering columns, x_1 , x_2 and x_{12} , as coefficient vectors, the contrast for each factor is determined using (MONTGOMERY, 2005).

$$contrast = x^{t}Rs$$
 (04)

Then the effects might be calculated using equation 5.

$$effect = \frac{2}{n2^k} contrast \tag{05}$$

In which n is the number of replicates and k the number of levels of each factor. In this work n and k equal to 2.

In order to estimate de standard deviation of the effects first we calculated the variance of the replicates for each experimental combination:

$$S_i^2 = \frac{\sum (R - \overline{R})^2}{n - 1} \tag{06}$$

82 RQI - 2º trimestre 2018

In which i ranges from 1 to 4 as there were four original designed experiments and is the mean of each array of replicates. The variances were already presented in Table 3. From this table we obtained the pooled standard deviation:

$$S_p = \sqrt{\frac{\sum S_i^2(n-1)}{i(n-1)}}$$
 (07)

In which n is the number of replicate for each experimental combination.

The standard deviation of the effects was calculated according to the following equation:

$$sd_{effects} = \frac{2S_p}{\sqrt{n2^k}}$$
 (08)

In which k stands for the number of factors and n for the number of replicates.

As we can notice in Table 4, the main (A and T) and interaction (AT) effects are greater than the effect standard deviation which indicates their significance as they are way higher than the noise (sd_{effects}). In order to show their statistical significance a 95% confidence intervals were built for each effect:

effect value –
$$t_{0.025,df}sd_{effect} < \mu_{effect} < effect value + t_{0.025,df}sd_{effect}$$

Lower limit Upper Limit (09)

The subscript 0.025 stands for the probability in the lower and upper tail of the t distribution, and df is the degree of freedom used to calculate the effect standard deviation, which in this case is 4.

Table 4The statistical significance of the effects

Factors	Effects	$\mathrm{sd}_{\mathrm{effects}}$	95% confidence intervals		
			Lower Limit	Upper Limit	
A	35,38	0,55	33,85	36.90	
T	18,26	0,55	16,73	19.79	
AT	-10,50	0,55	-12,02	-8,97	

None of the 95% confidence intervals includes the zero value, which shows that all the effects are statistically significant. The statistical analysis might also be performed by analysis of variance (ANOVA), applying an F test to show the significance of each effect. The ANOVA approach will come to the same conclusion. Ferreira and Teófilo, (2006), developed Excel spreadsheets useful to statistical analysis of experimental designs and their work might be a good resource to build ANOVA tables as well as confidence intervals for the effects. The article has an excellent brief explanation about this statistic field as it further covers complete factorial designs, fractional factorial designs, central composite and Doehlert designs, and surface response methodology.

Since the interaction effect AT were found significant we must not analyze the main effects separately because the effect of each factor depends on the level of the other factor. We can notice in Figure 1 that time effect changes according to the amount of salt level. The difference between the average of the -+ corner and the average of the -- corner is 74.95 – 46.19 = 28.76%. This is the time effect when the amount of salt is fixed at the lower level, but if the salt amount is at higher level, the time effect, calculated by the difference between the average of + + corner and the average of the + - corner, is 99.83 – 92.07 = 7.76%. Briefly, the T factor doesn't behave the same way at both factor A levels.

The AT interaction might be showed in an interaction plot in which the averages of the replicates are plotted according to Table 5, that's why this plot is also called mean plot.

Table 5
MO Removal Averages

A\T	5min	10min	
0,585g	46.19%	74.95%	
2,930g	92.07%	99.83%	

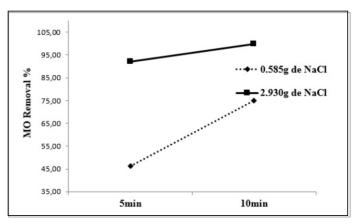


Figure 2. Interaction plot of the MO removal values against each factor

The two lines in Figure 2 show clearly that the increase in MO removal due time change is greater when A factor is fixed at lower level. If no interaction were significant the lines would be parallel to each other.

The NaCl salt in aqueous solution are in the form of Na⁺ and Cl⁻ ions. They increase the electric current going through the system so that oxidation and reduction rates increase, causing the formation of more aluminum hydroxide particles, which adsorbed more MO molecules, besides rising the oxidation rate of these molecules at the anode.

Reaction time had little effect on MO removal at higher concentrations of salt, but greater at lower salt concentrations. This observation is important since the step of support electrolyte addition is one of the drawbacks of the electroflocculation process, since it generates an effluent that will certainly need further treatment steps to remove the salts. So by inspection of Figure 2, it seems possible to decrease the amount of salt and increase the reaction time in order to achieve results as good as the experiment combination + +.

The statistical signicance of the main effects, A and T, as well as the their second order interaction, AT, might be determined through analysis of variance. First we determined the total sum of squares (SSTotal) then the sum of squares of main and interaction effects (SSA, SST and SSAT) and the sum of squares due to error (SSE).

From the sum of squares we calculated the

mean squares. By using the F statistic the mean square of each effect was compared to the error mean square to evaluate its significance.

All sum of squares was determined according to the following equations (MONTGOMERY, 2005):

$$SSTotal = \sum_{1}^{8} (R_i - \overline{OR})^2$$
 (10)

$$SSA = \frac{(contrast_A)^2}{n^{2k}}$$
 (11)

$$SST = \frac{(contrast_T)^2}{n2^k}$$
 (12)

$$SSAT = \frac{(contrast_{AT})^2}{n2^k}$$
 (13)

$$SSE = SSTotal - (SSA + SST + SSAT)$$
 (14)

The term R_i is each of the removal results (%) in Table 3.Or is the overall mean. The contrast terms for each effect are calculated according to equation (4). The total degree of freedom is N-1, whereas N is the total number of results (in this case, 8). So the total degree of freedom is 7. Each effect accounts for one degree of freedom so that the degree of freedom left to error is 7 - 3 = 4. The effect and error means squares were determined by dividing each sum of squares by its correpondent degree of freedom and the ANOVA table constructed.

Table 6 ANOVA table

Source of variation	SSª	DF^{b}	MSc	F^d	p-value	% of variation
A	2504	1	2504	4124	0.0000	73.78
T	667	1	667	1099	0.0000	19.65
AT	221	1	221	363	0.0000	6.50
Error	2	4	0.61			0.07
total	3394	7				

a: sum of squares; b: degree of freedom; c: mean squares; d: the calculated F statistic.

The ANOVA table shows that the sum of squares associated with the effects are way greater than error sum of squares, which means that each

effect accounts for the major variation in the data. For example, the A effect accounts for (2504/3394)*100 = 73.78% of the variation. And all effects account for 99.93% of the variation. The nuisance factors (unkown and uncontrollable factors) account for only 0,07% of the total variation. The p-values for the effects are close to zero. So the analysis of variance showed, as already indicated by the confidence intervals, that all effects are statistically significant and most of the variation are due to factor A effect.

CONCLUSION

The experiments showed that in order to achieve almost 100% MO removal, the amount of salt and the reaction time factors must be fixed at high levels. The interaction plot also demonstrated that time effect depends on the fixed level of the amount of salt factor. In lower level of salt amount, time has a greater effect. So since the addition of salt as support electrolyte is a disadvantage of the electroflocculation process, the amount of NaCl could be reduced and the reaction time further increased to achieve MO removal close to 100%.

The electroflocculation experiment proposed in this work might be used in any course related to analytical chemistry or chemometrics for undergraduate students. It is simple and uses cheap chemicals and materials, which are easily found in any analytical chemistry laboratory. The experiments might be performed in a 3-hour laboratory class if the materials and reagents are previously arranged by the professor or the lab technician. The data might be readily collected and analyzed by the Excel software since the calculations presented here are simple. Lots of scientific works in literature still uses the one-at-atime approach to evaluate factors that affect a system response, but this approach is usually time consuming and larger number of experiments are required. The factorial design takes a smaller number of experiments and still accounts for interaction effects.

Technical students collaborated to the development of this work, and as they performed the

experiments they got overwhelmed by the multitude of chemical reactions taking place: oxygen gas are formed in the anode; hydrogen gas are formed in the cathode; the anode electrode undergoes corrosion; the cathode has its mass increased as the aluminum is reduced; they also saw the aqueous MO solutions losing their color and the formation of insoluble hydroxides which adsorbs MO molecules. All these effects were visually noticed as well as time and amount of salt effects which were further statistically detected.

REFERENCES

BRUNS, R. E.; SCARMINIO, I. S.; NETO, B. B. **Como fazer experimentos.** 3th ed., Campinas: Unicamp, 2007.

FERREIRA M. M. C.; TEÓFILO, R. F. Quimiometria II: planilhas eletrônicas para cálculos de planejamentos experimentais, um tutorial. **Revista Química Nova**, v. 29, n°2, p. 338-350, 2006.

GUEDES, T. L. M. et al. Investigation of the setting-time of commercial gelatins: an experiment from a chemometric course for undergraduate chemistry students. **Revista Quimica Nova**, v. 36, n° 3, p. 480-483, 2013.

HUNTER, J. S.; HUNTER, W. G.; BOX, G. E. E. **Statistics for Experimenters**, 1th ed., Wiley: New York, 1978.

KRAWCZYK, T.; SLUPSKA, R.; BAJ, S. Applications of Chemiluminescence in the Teaching of Experimental Design. **Journal chemical education**, v. 92, n° 2, p. 317-321, 2015.

LIGOURI, L.; J. Tasty Approach to Statistical Experimental Design in High School Chemistry: The Best Lemon Cake. **Journal chemical education**, v. 94, n°4, p. 465-470, 2017.

MONTGOMERY, D. C. **Design and Analysis of Experiments.** 6th ed., Wiley: New York, 2005.

NETO, S. A. et al. Tratamento de resíduos de corante por eletrofloculação: um experimento para cursos de graduação em química. **Revista Quimica Nova**. v. 34, n° 8, p. 1468-1471, 2011.

NOVAS NORMAS PARA SUBMISSÃO DE ARTIGOS À REVISTA DE QUÍMICA INDUSTRIAL

(aprovadas pelo Conselho Editorial em 14 de setembro de 2014)

A Revista de Química Industrial (RQI) publica artigos técnico-científicos relacionados à área industrial e à pesquisa, desenvolvimento e inovação (P&D&I), inclusive o desenvolvimento de técnicas analíticas. Também publica resenhas de livros e outros tópicos das áreas de engenharia química e da química industrial.

Serão aceitos estudos de caso quando contribuírem para aumentar o entendimento acerca de aspectos como riscos à saúde, impactos ambientais, ecoeficiência, emprego de novos materiais etc.

São também bem-vindos artigos versando sobre Educação e História da Química que estabeleçam um elo com a área industrial.

INSTRUÇÕES GERAIS

- a) A submissão de um artigo à RQI implica que ele não foi previamente publicado, salvo na forma de resumo ou parte de um trabalho acadêmico (monografia, dissertação, tese), não está sendo submetido simultaneamente a outra revista e não será submetido futuramente, caso aceito para publicação na RQI. Subentende-se que o autor responsável pela submissão tem o consentimento dos demais coautores e das respectivas instituições a que pertençam. Os autores ficam desde já cientes de que todos os direitos autorais do artigo submetido pertencerão à Associação Brasileira de Química, caso o mesmo seja aceito para publicação.
- b) Os artigos poderão ser escritos em Português ou Inglês. No caso de artigos em língua inglesa, o texto que não possuir qualidade mínima apropriada a uma publicação em periódico será devolvido aos autores.
- c) Todos os artigos devem ser digitados em fonte Arial corpo 11, espaçamento 1,5 entre linhas, margens 2,5 cm e alinhamento justificado. O arquivo deve estar em um dos formatos .doc, .docx ou .rtf e não pode conter qualquer tipo de marcação.
- d) A primeira página deverá conter na parte superior o título do artigo (em português e inglês), os nomes completos dos autores e suas respectivas instituições de vínculo (nome e endereço completo, incluindo cidade, estado e país). O autor responsável pelo artigo deve incluir um e-mail de contato. A seguir, deverá constar o resumo, limitado a 150 palavras, três palavras-chave (separadas por vírgulas) e a tradução de ambos para a língua inglesa (abstract, keywords). O resumo deve citar sucintamente o propósito do artigo, os resultados mais relevantes e as conclusões principais.
- e) Os artigos submetidos devem enquadrar-se em uma das categorias abaixo:

Artigo completo: refere-se a estudos completos e inéditos. Deve ser estruturado de acordo com a ordem: Introdução - Materiais e métodos - Resultados e discussão – Conclusões – Agradecimentos - Referências.

Comunicação: também se refere a estudo inédito, mas com uma quantidade reduzida de dados experimentais que, contudo, possuem impacto significativo para justificar uma publicação.

Nota técnica: seção destinada à divulgação de métodos analíticos, técnicas laboratoriais ou industriais e aparelhagens desenvolvidas pelos autores do artigo. Deve seguir a mesma estrutura apresentada para os artigos completos.

Revisão: serve à divulgação do estado da arte de uma determinada área da química pertinente ao escopo da RQI.

Opinião: pesquisadores e profissionais renomados de uma determinada área da química abrangida pela RQI podem, a exclusivo convite do Editor, ser convidados a redigir um artigo versando sobre pontos específicos de suas áreas, tais como: política industrial, perspectivas econômicas, mercado de trabalho, investimentos em P&D&I etc.

Para a preparação de seu artigo, a íntegra das normas de submissão pode ser consultada acessando http://www.abq.org.br/rqi/instrucoes-para-submissao-de-artigos-tecnicos-científicos.html.

86 RQI - 2º trimestre 2018



SINDIQUIM/RS

Conduzindo o desenvolvimento da Indústria Química do Rio Grande do Sul

Atualmente nossas indústrias estão comprometidas com a sustentabilidade do planeta através da Química Verde que provém da natureza e de onde surge a química para o nosso cotidiano.



SINDICATO DAS INDÚSTRIAS QUÍMICAS NO ESTADO DO RIO GRANDE DO SUL

Avenida Assis Brasil, 8787 - Sistema FIERGS/CIERGS

Fone: (51) 3347-8758 - Fax: (51) 3331-5200 - CEP 91140-001 - Porto Alegre - RS

e-mail: sindiquim-rs@sindiquim.org.br - site: www.sindiquim.org.br