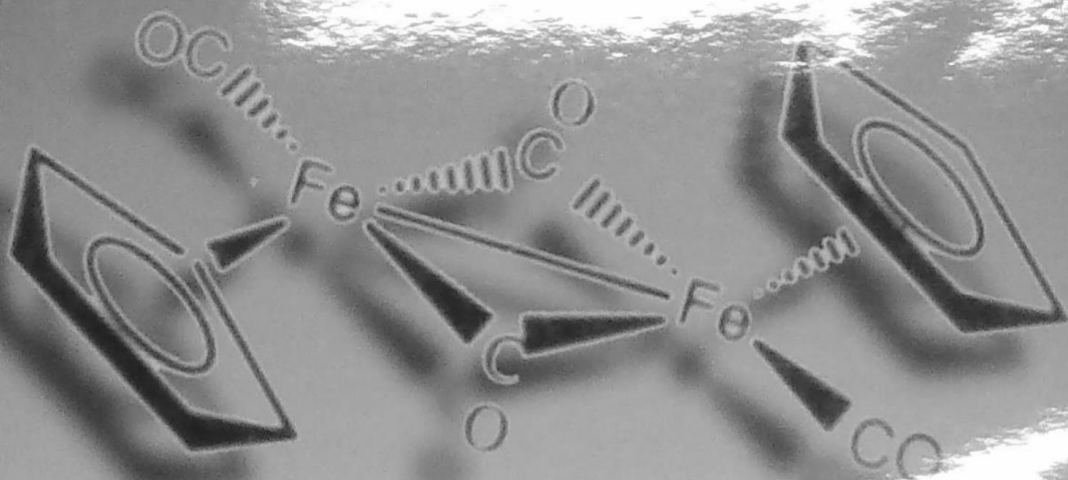
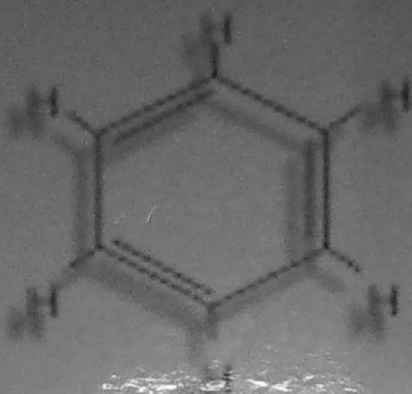


# ECLÉTICA

Química



ALTERNATIVAS DE INVESTIGACIÓN EN QUÍMICA

ALTERNATIVAS DE INVESTIGACIÓN EN QUÍMICA

ALTERNATIVAS DE INVESTIGACIÓN EN QUÍMICA

ALTERNATIVAS DE INVESTIGACIÓN EN QUÍMICA

ALTERNATIVAS DE INVESTIGACIÓN EN QUÍMICA

ALTERNATIVAS DE INVESTIGACIÓN EN QUÍMICA



**ECLÉTICA**  
Química

ALTERNATIVAS DE INVESTIGACIÓN EN QUÍMICA

ALTERNATIVAS DE INVESTIGACIÓN EN QUÍMICA

UNIVERSIDADE ESTADUAL PAULISTA

*Reitor*

*Marcos Macari*

*Vice-Reitor*

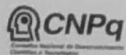
Herman Jacobus Cornelis Voorwald

*Pró-Reitor de Pesquisa*

José Arana Varela

ELECTICA  
1982


Este número foi editado com recursos do Programa de Apoio a Publicações Científicas:



Ministério  
da Educação

Ministério da  
Ciência e Tecnologia



unesp 

Universidade Estadual Paulista



# ECLÉTICA

Química

ISSN 0100-4670

ECQUDX

ISSN 1678-4618 on-line

Eclética Química

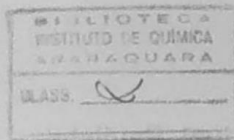
São Paulo

v. 33

n. 4

p. 1 - 88

2008



# ECLÉTICA

Química

*Editor*  
Antonio Tallarico Adorno

*Editores Associados / Associate Editors*  
Antonio Eduardo Mauro  
Assis Vicente Benedetti

---

*Comissão Editorial / Editorial Board*

Heloise de Oliveira Pastore	(Instituto de Química – Unicamp)
Lúcio Angnes	(Instituto de Química – USP)
Assis Vicente Benedetti	(Instituto de Química – Unesp)
Antonio Eduardo Mauro	(Instituto de Química – Unesp)
Antonio Tallarico Adorno	(Instituto de Química – Unesp)

---

*Conselho Consultivo / Advisory Board*

Pere Lluís Cabot	(Facultad de Química – Universitat de Barcelona)
Julien F. C. Boodts	(Instituto de Química – UFU – Uberlândia)
Oscar L. Malta	(Departamento de Química Fundamental – UFPE)
Jairton Dupont	(Instituto de Química – UFRGS)

---

*Assessoria Técnica / Technical Advisory*

Valéria Aparecida Moreira Novelli  
Manoel Augusto da Silva Guerreiro  
Thayz Cristina Boni

*Publicação trimestral / Quarterly publication*

*Assinaturas / Subscriptions*  
Instituto de Química - Unesp  
Caixa Postal 355  
14801-970 Araraquara-SP

*Distribuição e Permutas / Distribution and Exchanges*

Coordenadoria Geral de Bibliotecas da Unesp  
Avenida Vicente Ferreira, 1278 – C. P. 603  
17515-000 Marília – SP

ECLÉTICA QUÍMICA

São Paulo, SP - Brasil 1976  
1976-2007, 1-32  
2008, 33 n.1-2-3-4  
ISSN 0100-4670  
ECQUDX

Os artigos publicados na *Eclética Química* são indexados por:  
*The articles published in Eclética Química are indexed by :*

Abstracts Journal (Referativnyi Zhurnal); CAB Abstracts; Chemical Abstracts; SciELO; SciFinder Scholar; Red Alyc.

## Sumário Contents

---

Determination of atenolol in pharmaceutical formulations by diffuse reflectance spectroscopy. Determinação de atenolol em formulações farmacêuticas por espectroscopia de reflectância difusa <i>M. A. Gotardo, R. Sequinel, L. Pezza, and H. R. Pezza</i> .....	7
Dinâmica molecular: teoria e aplicações em planejamento de fármacos. Molecular dynamics: theory and applications in drug design. <i>A. M. Namba, V. B. da Silva, C. H. T. P. da Silva</i> .....	13
Otimização multivariada e aplicação do sorvente SiO <sub>2</sub> -Nb <sub>2</sub> O <sub>5</sub> para determinação <i>em linha</i> de Ni(II) em matriz aquosa. Multivariate optimization and application of silica gel chemically modified with Niobium (V) oxide for the determination of Ni (II) in aqueous matrices in an on-line system. <i>J. N. Bianchini, R. Mior, E. Martendal, J. S. Carletto e E. Carasek</i> .....	25
Thermodynamic quantities of solvation and dilution for some acetanilide derivatives in octanol and water mutually saturated. <i>Y. Baena, H. Barbosa, and F. Martínez</i> .....	33
Spectrophotometric determination of metronidazole through Schiff's base system using vanillin and PDAB reagents in pharmaceutical preparations. <i>K. Siddappa, M. Mallikarjun, P. T. Reddy and M. Tambe</i> .....	41
Inhibitors of <i>Clostridium histolyticum</i> collagenase. Inibidores da collagenase do <i>Clostridium histolyticum</i> . <i>S. R. A. Leite</i> .....	47
Determination of phenolic compounds and evaluation of antioxidant capacity of <i>Campomanesia adamantium</i> leaves. Determinação de compostos fenólicos e avaliação da capacidade antioxidante das folhas de <i>Campomanesia adamantium</i> . <i>I. D. Coutinho, R. G. Coelho, V. M. F. Kataoka, N. K. Honda, J. R. M. Silva, W. Vilegas and C. A. L. Cardoso</i> .....	53

Synthesis and characterization of solid 2-methoxycinnamylidenepyruvic acid. Síntese e caracterização do ácido 2-metoxicinamalpirúvico. <i>C. T. de Carvalho, A. B. Siqueira, E. Y. Ionashiro, M. Pivatto, M. Ionashiro</i> .....	61
Desenvolvimento e aplicação de método GC-MS/MS para análise simultânea de 17 HPAs em material particulado atmosférico. Development and application of GC-MS/MS method for simultaneous analysis of 17 PAHs in airborne particulate matter. <i>J. Cristale, F. S. Silva, M. R. R. Marchi</i> .....	69
Degradação hidrolítica e fotoquímica da amoxicilina na presença de $\beta$ -ciclodextrina. Hydrolytic and photochemistry degradation of the amoxicillin in $\beta$ -cyclodextrin. <i>R. A. Bariccattí, C. Silva, M. L. Souza, C. A. Lindino, M. F. Rosa</i> .....	79
Índice de Assuntos.....	85
Subject Index.....	86
Índice de Autores / Authors Index .....	87
Instruções aos autores / Instructions for Authors.....	88

## Índice de Assuntos

Amoxicilina, 79  
ácido 2-metoxicinamalpirúvico, 61  
Análise por injeção em fluxo, 25  
Atenolol, 7  
Atividade anti-HIV, 13  
Atividade antioxidante, 53  
 $\beta$ -ciclodextrina, 79  
Campo de força, 13  
*Campomanesia adamantium*, 53  
Chalconas, 53  
*Clostridium histolyticum*, 47  
colagenase, 47  
Dinâmica molecular, 13  
espectroscopia de reflectância difusa, 7  
F AAS, 25  
Flavononas, 53  
Formulações farmacêuticas, 7  
Fotodegradação, 79  
GC-MS/MS, 69  
Hidrocarbonetos policíclicos aromáticos, 69  
inibidores, 47  
interação enzima-ligante, 47  
IR, 61  
material particulado atmosférico, 69  
MS, 61  
Níquel, 25  
NMR, 61  
p-cloranil, 7  
Planejamento de fármacos, 13  
síntese, 61  
 $\text{SiO}_2\text{-Nb}_2\text{O}_5$ , 25



## Subject Index

- F AAS, 25  
2-methoxycinnamylidenepyruvic acid, 61  
Acetanilide derivatives, 33  
Airborne particulate matter, 69  
Amoxicillin, 79  
Anti-HIV activity, 13  
Antioxidant activity, 53  
Atenolol, 7  
 $\beta$ -cyclodextrin, 79  
*Campomanesia adamantium*, 53  
Chalcones, 53  
*Clostridium histolyticum*, 47  
Collagenase, 47  
Diffuse reflectance spectroscopy, 7  
Docking, 47  
Drug design, 13  
Flavanones, 53  
Flow injection analysis, 25  
Force field, 13  
GC-MS/MS, 69  
Inhibitors, 47  
IR, 61  
Metronidazole, 41  
Molecular dynamics, 13  
MS, 61  
Nickel, 25  
NMR, 61  
Octanol, 33  
Partition coefficient, 33  
p-chloranil, 7  
PDAB, 41  
Pharmaceutical analysis, 41  
Pharmaceutical formulations, 47  
Photodegradation, 79  
Polycyclic aromatic hydrocarbons, 69  
 $\text{SiO}_2\text{-Nb}_2\text{O}_5$ , 25  
Solution thermodynamics, 33  
Solvation, 33  
Spectrophotometry, 41  
Synthesis, 61  
Vanillin, 41

**Índice de Autores**  
**Authors Index**

- A. B. Siqueira, 61  
A. M. Namba, 13  
C. A. L. Cardoso, 53  
C. A. Lindino, 79  
C. H. T. P. da Silva, 13  
C. Silva, 79  
C. T. de Carvalho, 61  
D. Coutinho, 53  
E. Carasek, 25  
E. Martendal, 25  
E. Y. Ionashiro, 61  
F. Martínez, 33  
F. S. Silva, 69  
H. Barbosa, 33  
H. R. Pezza, 7  
J. Cristale, 69  
J. N. Bianchin, 25  
J. R. M. Silva, 53  
J. S. Carletto, 25  
K. Siddappa, 41  
L. Pezza, 7  
M. A. Gotardo, 7  
M. F. Rosa, 79  
M. Ionashiro, 61  
M. L. Souza, 79  
M. Mallikarjun, 41  
M. Pivatto, 61  
M. R. R. Marchi, 69  
M. Tambe, 41  
N. K. Honda, 53  
P. T. Reddy, 41  
R. A. Baricatti, 79  
R. G. Coelho, 53  
R. Mior, 25  
R. Sequinel, 7  
S. R. A. Leite, 47  
V. B. da Silva, 13  
V. M. F. Kataoka, 53  
W. Vilegas, 53  
Y. Baena, 33