

Livro de Resumos do 13º Congresso Interno de Iniciação Científica do Programa PIBIC no CNPEM

Apresentação

É com enorme satisfação que realizamos, no dia 14 de agosto de 2015, o 13º Congresso Interno do Programa Institucional de Bolsas de Iniciação Científica (PIBIC) do Centro Nacional de Pesquisa em Energia e Materiais (CNPEM). Entre agosto de 2014 e julho de 2015, cerca de trinta alunos de graduação participaram do programa PIBIC do Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq). Esses estudantes, provenientes dos cursos de Física, Química, Biologia e Engenharias de várias universidades de Campinas e região, desenvolveram trabalhos em diferentes áreas do conhecimento, incluindo física de aceleradores, materiais nano-estruturados, estrutura e função de proteínas e bioprocessos voltados à geração de biocombustíveis. Os detalhes dos projetos apresentados pelos alunos no 13º Congresso Interno do PIBIC/CNPEM estão reunidos neste livro de resumos.

Aproveitamos a ocasião para agradecer ao CNPq pelas bolsas concedidas ao nosso programa e a todos do CNPEM que de alguma maneira contribuíram para a realização deste evento. Gostaríamos de agradecer especialmente aos membros dos Comitês de Avaliação Internos e Externos pelos trabalhos prestados e aos alunos e orientadores que, com muita dedicação e empenho, desenvolveram seus projetos com extremo rigor científico.

Atenciosamente,

Coordenação do Programa PIBIC para o CNPEM

O Programa PIBIC no CNPEM

O Centro Nacional de Pesquisa em Energia e Materiais (CNPEM) coordena e viabiliza, através de seus Laboratórios Nacionais, o Programa Institucional de Bolsas de Iniciação Científica (PIBIC), financiado pelo Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq).

O PIBIC tem como principal objetivo estimular a formação científica de estudantes de graduação e representa o primeiro passo na trajetória profissional de jovens que pretendem atuar em pesquisas nas áreas de ciência e tecnologia. Essa oportunidade de contato direto com as atividades científicas enriquece o currículo e beneficia o futuro profissional dos estudantes. A iniciação científica de excelência disponibiliza ao aluno a base necessária para a construção e a consolidação de uma sólida carreira profissional. Nesse sentido, o PIBIC é um valioso mecanismo de incentivo aos jovens talentos.

O PIBIC no CNPEM promove a participação ativa dos alunos em projetos de pesquisa com mérito científico e potencial para serem continuados na pós-graduação. Os Laboratórios Nacionais do CNPEM oferecem ainda um ambiente de pesquisa com infraestrutura e instrumentação científica de excelente qualidade.

Esse cenário favorece o sucesso do Programa. A maioria de nossos ex-alunos de iniciação científica estão cursando a pós-graduação, muitos deles continuam trabalhando nos laboratórios do CNPEM enquanto outros estão atuando no setor privado. Dessa forma, reconhecemos a importância do Programa e acreditamos que o PIBIC/CNPEM atinge seu principal objetivo de contribuir significativamente para a formação de nossos alunos.

Atenciosamente,



Celso Benedetti
Coordenador do PIBIC para o CNPEM



CNPEM
Centro Nacional de Pesquisa
em Energia e Materiais

Resumos apresentados no 13º Congresso Interno de Iniciação Científica do Centro Nacional de Pesquisa em Energia e Materiais (CNPEM)

Programa Institucional de Bolsas de Iniciação Científica (PIBIC) do CNPq

Campinas, 14 de Agosto de 2015



CNPEM
Centro Nacional de Pesquisa
em Energia e Materiais

Análise temporal de expressão gênica de AtTOR em *Arabidopsis thaliana* e *Setaria viridis*.

Bolsista: Aline Yochikawa

Universidade: Universidade Estadual de Campinas

Orientador: Dra. Camila Caldana

Resumo

A via da quinase TOR (Target of Rapamycin), o qual é conservada em eucariotos, tem sido apontada como uma das principais vias de regulação do crescimento em plantas. Estudos com a planta modelo *Arabidopsis thaliana* revelaram que a quinase TOR é essencial nos primeiros estágios de desenvolvimento da planta, uma vez que o knockout do gene é letal para o embrião. Por outro lado, a redução nos níveis de transcrito por meio do silenciamento condicional do gene TOR resultou em plantas menores, que remobilizaram o fluxo de carbono para o armazenamento de substâncias de reserva como amido e triacilgliceróis. Outros estudos apontaram que a via TOR responde a uma série de estímulos como glicose no meio de cultivo in vitro como fonte de carbono, o status nutricional da planta, a presença de hormônios e condições de estresse biótico e abiótico. Dada a importância da via TOR na regulação de crescimento em plantas, e considerando que crescimento é um parâmetro intimamente associado com o acúmulo de biomassa, nosso grupo tem focado em dissecar como a via TOR regula o crescimento e metabolismo em plantas com o intuito de aplicar futuramente os conhecimentos gerados em organismos modelo para espécies agrônomicas de interesse do laboratório, como a cana-de-açúcar. Mais especificamente, estamos interessados em estudar a influência de fatores como fotoperíodo na sinalização da via TOR e comparar as alterações no metabolismo e crescimento decorrentes do aumento da expressão ou silenciamento condicional da quinase TOR em dois organismos fotossinteticamente diferentes, a *Arabidopsis*, como modelo de plantas C3 e a *Setaria viridis*, como modelo de plantas C4. Neste sentido, deseja-se analisar os padrões de expressão gênica nos tecidos de *Arabidopsis thaliana* e *Setaria viridis*, que podem evidenciar a atuação de TOR nas diferentes vias metabólicas. Para tanto, linhagens transgênicas expressando fusão de diferentes tamanhos de promotor do gene TOR e o gene beta-glucuronidase serão geradas em *Arabidopsis* e *Setaria*. Tais linhagens serão analisadas em diversos estágios de desenvolvimento e fotoperíodos.

Resiliência de biomoléculas em simulações de superfícies planetárias

Bolsista: José Carlos Salles Junior

Universidade: Universidade Estadual de Campinas

Orientador: Dr. Douglas Galante

Resumo

Este trabalho pretende analisar processos de preservação e degradação de moléculas de importância biológica por técnicas espectroscópicas. Dentre as técnicas utilizadas estão a espectroscopia Raman e de Infravermelho, que permitem sondar modos vibracionais das moléculas em estudo, e espectroscopia de absorção de raios X (XAS), que permite o estudo da vizinhança eletrônica de átomos específicos de um dado material. No atual relatório parcial, pretende-se apresentar as técnicas e suas possíveis aplicações em estudos de bioassinaturas em campo, missões espaciais ou laboratório. O modelo de biomolécula adotada como bioassinatura é a classe das porfirinas, em sua forma nativa e também degradada (em especial do grupo heme). A análise da degradação do grupo heme será feita principalmente pelo estudo do comportamento do íon metálico central (Fe), por XANES, e dos grupos químicos vizinhos, por Raman e Infravermelho. Procura-se, inicialmente, entender como a presença ou substituição do íon metálico pode ser usada como indicador da presença de vida e do paleoambiente que causou a alteração da molécula.

Organização de dados do projeto “Sustentabilidade da irrigação no setor sucroenergético”

Bolsista: Iuran de Souza Gonçalves

Universidade: Universidade Estadual de Campinas

Orientador: Dr. Fábio Vale Scarpore

Resumo

O presente trabalho explicita as atividades desenvolvidas durante o período de Agosto de 2014 à Julho de 2015. Primeiramente realizou-se um trabalho de análise e obtenção de dados em escritório, tornando possível o desenvolvimento de um banco de dados. Posteriormente ao banco de dados, as atividades voltaram – se para as operações de campo na Agência Paulista de Tecnologia dos Agronegócios (APTA - Polo Centro Oeste), localizada na cidade de Jaú (SP), realizando a análise de lisímetros, onde sua correta instalação está diretamente relacionada ao tipo de solo utilizado. Os dois métodos existentes para instalação, monólito indeformado e amostra deformada, foram aplicados e analisados em um solo do tipo Latossolo Vermelho cultivado com cana-de-açúcar. Observou-se que ambos os procedimentos de instalação podem ser utilizados no tipo de solo em questão, sendo a instalação por camada deformada mais indicado, pois o processo por monólito indeformado apresentou grande suscetibilidade a compactação e consequente impermeabilização do solo no equipamento. Por fim, foi realizado um treinamento para uso do software Rootsnap, afim de fazer a análise da dinâmica de desenvolvimento das raízes da cana-de-açúcar da região estudada.



CNPEM
Centro Nacional de Pesquisa
em Energia e Materiais

**Estudo de enzimas aplicadas na evolução dirigida de leveduras industriais:
“Prospecção de micro-organismos extremófilos produtores de glicosil hidrolases”**

Bolsista: Bianca Torres dos Santos

Universidade: Pontifícia Universidade Católica de Campinas

Orientador: Dr. Roberto Ruller

Resumo

A grande quantidade de indústrias e automóveis no mundo levou a uma intensa procura por petróleo, o que promove grande poluição atmosférica, aumentando a emissão de gases do efeito estufa, trazendo malefícios ao meio ambiente. O biocombustível que é de grande valor econômico e provindo da biomassa renovável é benéfico para o ambiente, diminuindo a emissão de gases do efeito estufa, passando a ser uma alternativa significativa. A busca por microorganismos extremófilos que possam produzir enzimas é de interesse industrial para sua utilização no pré-tratamento da biomassa lignocelulósica. Deste modo, o objetivo deste trabalho é buscar e isolar micro-organismos de ambientes extremófilos, Antártica e Atacama, para utiliza-lo na produção de glicosil hidrolases de interesse para a indústria do bioetanol. Para isso, as amostras de solo e água obtidas foram individualmente cultivadas em condições seletivas para a produção das enzimas de interesse. Isolados bacterianos foram obtidos após diluição seriada e caracterizados taxonomicamente com base na morfologia das colônias e células, além de comparação da sequência do DNAr 16S com outras no banco de dados do NCBI. Paralelamente, um teste de produção de celulasas foi realizado com uma bactéria isolada da Antártica em uma etapa anterior deste projeto. As bactérias selecionadas neste estudo apresentam um grande potencial biotecnológico.



CNPEM
Centro Nacional de Pesquisa
em Energia e Materiais

Avaliação preliminar de um processo Fischer-Tropsch a partir de syngas derivado de bagaço de cana-de-açúcar, integrado a uma planta de etanol de primeira geração usando a biorrefinaria virtual de cana-de-açúcar

Bolsista: Rodrigo Akira Fré

Universidade: Universidade Estadual de Campinas

Orientador: Dra. Mylene Cristina Alves Ferreira Rezende

Resumo

O projeto consiste na avaliação técnica de um cenário de produção de gasolina e diesel a partir de um processo de Fischer-Tropsch (processo FT), tendo como matéria-prima o gás de síntese proveniente da gaseificação de bagaço de cana-de-açúcar excedente de uma biorrefinaria de etanol de primeira geração. Esta aplicação está inserida na rota termoquímica como uma das rotas alternativas de aproveitamento da biomassa para produção de biocombustíveis, matérias-primas para indústria e o energia e calor. Neste trabalho foi realizada uma revisão bibliográfica na literatura científica existente em relação ao processo Fischer-Tropsch, e, posteriormente, foi desenvolvida uma simulação na Biorrefinaria Virtual de Cana-de-açúcar (BVC) do processo de conversão do gás de síntese em biocombustíveis de Fischer-Tropsch a partir da termoconversão da biomassa proveniente da rota bioquímica de etanol de primeira geração. A etapa subsequente ao processo de Fischer-Tropsch, que está relacionada com o hidrocrackeamento e refino dos produtos gerados, também foi simulada, bem como uma etapa de geração de energia elétrica e vapor por meio de um ciclo Rankine. Os processos que antecedem o processo de Fischer-Tropsch, como a gaseificação da mistura de palha e bagaço de cana-de-açúcar, bem como a própria estrutura e composição dessa biomassa e os processos de limpeza e condicionamento do gás de síntese visando adequação ao processo Fischer-Tropsch foram estudados em projetos anteriores para servir de base para a realização da simulação do processo FT. O processo global desde a recepção da cana-de-açúcar até a distribuição do produto final é considerado na BVC e determinante para a integração dos processos. O trabalho permitiu a avaliação da produção de gasolina e diesel via um processo Fischer-Tropsch a partir de gás de síntese produzido por processo de gaseificação de biomassa, sendo que foram obtidos resultados em massa de combustível e volume de combustível produzido por tonelada de cana-de-açúcar processada.



CNPEM
Centro Nacional de Pesquisa
em Energia e Materiais

Avaliação preliminar da etapa de limpeza e condicionamento do gás de gaseificação aplicado à rota de conversão termoquímica do bagaço de cana-de-açúcar visando à síntese de combustíveis, químicos e energia através da biorrefinaria virtual de cana-de-açúcar

Bolsista: Luana Oliveira dos Santos

Universidade: Universidade Estadual de Campinas

Orientador: Dra. Mylene Cristina Alves Ferreira Rezende

Resumo

A Biomassa lignocelulósica é vista como uma fonte promissora de energia, biocombustíveis e produtos químicos. Dentre as diversas rotas de conversão de biomassa lignocelulósica, a rota termoquímica possui um potencial significativo que ainda precisa ser explorado. Diante deste contexto, o presente trabalho propõe avaliar a etapa de limpeza e condicionamento do gás obtido da gaseificação de biomassa lignocelulósica visando à síntese de combustíveis de Fischer-Tropsch (FT) através da ferramenta Biorrefinaria Virtual de Cana-de-açúcar (BVC) – levando em conta aspectos técnicos, econômicos e ambientais dos processos disponíveis e apontando para as tecnologias mais viáveis a serem empregadas. Neste cenário, a biomassa lignocelulósica é obtida de uma planta de produção de etanol de primeira geração (1G), configurado em um cenário de plantas integradas. Uma revisão da literatura mostrou os diferentes métodos empregados nas etapas de limpeza e condicionamento do gás. A modelagem de tais etapas foi realizada no ambiente da BVC objetivando a avaliação técnica das plantas integradas, auxiliando na identificação de gargalos tecnológicos dos processos considerados e orientando a pesquisa, a fim de melhorar o processo considerando sua viabilidade técnica e os impactos econômicos e ambientais.



CNPEM
Centro Nacional de Pesquisa
em Energia e Materiais

Exploração de estratégias para veiculação de cargos utilizando-se aptâmeros de RNA

Bolsista: Igor Frederico de Souza Custodio

Universidade: Universidade Estadual de Campinas

Orientador: Marcio Chaim Bajgelman

Resumo

Aptâmeros de RNA são moléculas de cerca de 70 bases que assumem conformações terciárias passíveis do reconhecimento de epítomos, de forma análoga a anticorpos. É possível selecionar aptâmeros que apresentam alta afinidade e alta especificidade pelo alvo. Em contraste aos anticorpos, os aptâmeros são sintetizados quimicamente e podem ser facilmente modificados. Neste projeto, testamos duas configurações do aptâmero A10, dirigido ao receptor PSMA, para verificar a melhor estratégia de veiculação de cargos de interesse. No caso, as moléculas de aptâmero foram utilizadas para veiculação de fluoróforos que possibilitam rastrear a internalização por células alvo. Uma das estratégias envolveu a ligação direta de uma extensão da região 3' do aptâmero de RNA A10 com um oligo complementar marcado com o fluoróforo FAM, e a outra envolveu a ligação indireta entre o A10 e o fluoróforo FITC através de uma ponte de Biotina-estreptavidina. Os resultados apontaram para uma maior eficiência da metodologia em que utilizamos a ligação da molécula de RNAi com o aptâmero por meio de uma ponte biotina-estreptavidina.



CNPEM
Centro Nacional de Pesquisa
em Energia e Materiais

Uso de modelos biogeoquímicos para estimativa da dinâmica de carbono do solo e de erosão em cana-de-açúcar.

Bolsista: Raysa Gevartosky

Universidade: Escola Superior de Agricultura “Luiz de Queiroz” (ESALQ-USP)

Nome do Orientador: Dr. Marcelo Valadares Galdos

Resumo

A cana-de-açúcar tem espaço significativo no cenário econômico e ambiental do Brasil, sendo apontada como uma das mais favoráveis opções de produção de energia renovável a partir da biomassa. Com a crescente substituição da colheita com queima por colheita mecanizada sem queima, a palha deixada sobre o solo tem sido avaliada como matéria prima para produção de eletricidade e de etanol lignocelulósico. Há uma demanda para avaliar os efeitos da retirada da palha na dinâmica da água, nutrientes e matéria orgânica. Assim, o presente trabalho visa obter respostas preliminares sobre esta questão, a partir do uso do modelo CENTURY. O uso de modelagem biogeoquímica permite avaliar os impactos da remoção da palhada nos estoques de carbono, nitrogênio e erosão do solo, e a partir dos resultados avaliar a sustentabilidade ambiental do sistema de produção. Os dados do projeto “Efeito do plantio direto e do manejo da palha de cana-de-açúcar nos atributos do solo e no desenvolvimento do canavial” foram aplicados no modelo. Também foi efetuado levantamento de dados do projeto temático FAPESP (2002/10.534-8) intitulado: “Rendimento da Cana-de-Açúcar em Ciclos Consecutivos Associado ao Efeito Residual e às Transformações de N e S no Solo, em Sistema Conservacionista”. O modelo CENTURY foi eficiente na simulação do estoque de carbono ao longo dos anos, influenciado por diferentes quantidades de palha, textura do solo e manejo do solo. Solos de textura argilosa tem vantagem no armazenamento de carbono devido ao grande número de sítios de ligação por unidade de solo. O sistema de Plantio Direto incrementa o estoque de carbono do solo, a partir de sequestro de carbono atmosférico, decomposição e incorporação dos resíduos deixados sobre o solo. Diferentes teores de palha resultam em diferentes estoques de carbono do solo, quanto maior a quantidade de palha deixada sobre o solo, mais rápida sua decomposição (EmbrapaCerrados) e maiores os estoques de carbono.



Síntese e atividade catalítica de catalisadores heterogêneos bimetálicos

Bolsista: Jéssyca Nobre Pereira

Universidade: Universidade Estadual de Campinas

Orientador: Dr. Érico Teixeira Neto

Resumo

Neste estudo, o desenvolvimento de uma metodologia de síntese e avaliação do desempenho de catalisadores heterogêneos bimetálicos de AuPd e PtPd, foi investigada. Os catalisadores foram preparados através do método de impregnação dos sais metálicos suportados em TiO₂ e secos em temperaturas determinadas para avaliar o desempenho do processo de secagem. Em outra etapa, os materiais foram tratados termicamente em temperaturas fixas e atmosferas controladas (oxidante e redutora). Para avaliação de desempenho catalítico dos materiais duas reações modelo foram utilizadas, a reação de redução do 4-nitrofenol e oxidação do ácido ascórbico. A redução catalítica do 4-nitrofenol pelos catalisadores bimetálicos de AuPd-TiO₂ e PtPd-TiO₂, utilizando NaBH₄ como agente redutor, foi avaliada sob condições variadas. Diversos parâmetros, entre eles, a concentração do NaBH₄ e do 4-nitrofenol, pH e temperatura influenciam na eficiência da redução e na taxa em que o 4-nitrofenol é catalisado. A reação do ácido ascórbico foi utilizada por ser uma reação amplamente aplicada na verificação da eficiência catalítica de materiais metálicos, utilizando-se do oxigênio dissolvido em água para reagir. Os parâmetros dessa reação foram variados e a condição ótima de reação foi avaliada. Foi possível adaptar o método de análise dos catalisadores bimetálicos para materiais suportados em titânia (TiO₂), para materiais preparados em suporte de nanotitânia, cujo comportamento possui características particulares. Também foi brevemente estudada a reação de catálise da oxidação da glicose com catalisadores de suporte de carbono, com o intuito de aprimorar o método e avaliar o desempenho catalítico de materiais com diferentes suportes. Assim, esse trabalho busca estabelecer as condições e métodos para que a preparação e avaliação de desempenho dos materiais sejam bem descritas e confiáveis.



CNPEM
Centro Nacional de Pesquisa
em Energia e Materiais

Estudo de catalisadores para a conversão da biomassa lignocelulósica em produto de interesse industrial

Bolsista: Gabriel Mathews Viana Pinheiro

Universidade: Universidade Estadual de Campinas

Orientadora: Dra. Cristiane Barbieri Rodella

Resumo

As propriedades físico-químicas dos catalisadores estão intimamente relacionadas ao seu desempenho catalítico. O objetivo desse trabalho foi o estudo da influência da funcionalização da superfície e da adição de metal em catalisadores de carbeto de tungstênio aplicados à reação do ácido levulínico a γ valerolactona. Em termos de porosidade, percebeu-se que os catalisadores, de um modo geral, apresentam valores altos de área superficial específica, que não variavam significativamente com a funcionalização ou com a promoção de Ni. Em termos estruturais, a adição de Ni impactou nas fases de carbeto de tungstênio formadas, bem como na cristalinidade. Cataliticamente, observou-se que os catalisadores não parecem possuir diferenças significativas de atividade catalítica.

Refletância multiespectral aplicada a estimativa de propriedades químicas do solo para uso em agricultura de precisão.

Bolsista: Maria Thereza Nonato de Paula

Universidade: Universidade Estadual de Campinas

Orientador: Dr. Dr. Henrique Coutinho Junqueira Franco

Resumo

O objetivo deste estudo é investigar o potencial da técnica de espectroscopia de infravermelho próximo e infravermelho médio para determinação das propriedades do solo em substituição a análise química do solo. Para o estudo, amostras de componentes químicos presentes no solo serão primeiramente avaliados em laboratório das regiões NIR (800-2500 nm) e MIR (2500-25000 nm) para se detectar a assinatura espectral destes componentes isoladamente. Posteriormente estes componentes serão combinados e novamente avaliados para verificar qual é o melhor espectro de frequência para previsão das propriedades do solo. As mesmas amostras serão então avaliadas com o espectrofotômetro de campo (Fieldspec) para determinar a correlação entre os resultados. Propomos aqui, obter mapas de fertilidade do solo em cana-de-açúcar que podem ser aplicados em agricultura de precisão para prescrição de aplicação de nutrientes a taxa variada. Dados de sensoriamento remoto serão calibrados com medidas realizadas em laboratório. Estes dados de sensoriamento indiretos serão calibrados com dados usando análises baseadas em laboratório tradicionais.

Introdução

Produção de glicerol quinase e uridina monofosfato quinase para determinação da atividade de enzimas do metabolismo de sacarose em cana-de-açúcar

Bolsista: Keila Suemi Kawakami

Universidade: Universidade Federal de São Carlos

Orientador: Dra. Marina Câmara Mattos Martins Soldi

Resumo

A atividade de enzimas representa uma informação integrada dos fatores genéticos e ambientais que afetam a expressão gênica, metabolismo e crescimento vegetal. Por este motivo, medidas de atividade enzimática fornecem informações valiosas para compreender as redes metabólicas que produzem substratos para o crescimento e acúmulo de reservas, como a sacarose em colmos de cana-de-açúcar. Ensaio cíclico são ferramentas extensivamente utilizadas em bioquímica para a quantificação da amplificação de baixos níveis do produto de uma reação, permitindo medidas altamente sensíveis da atividade de enzimas e metabólitos. A gama de enzimas mensuradas utilizando ensaios cíclicos pode ser significativamente aumentada empregando glicerol quinase (GK, EC 2.7.1.30) como enzima adicional acoplada, incluindo UDP-glicose pirofosforilase (UGPase), sacarosefosfato sintase (SPS) e sacarose sintase (SuSy). Infelizmente, nenhuma GK nucleotídeo não específica está comercialmente disponível, restringindo a aplicação de ensaios cíclicos às reações que produzam ATP ou UTP. Apesar de existirem diferentes protocolos para acessar a atividade de SPS em plantas, um envolvendo a conversão do produto UDP em ATP através da enzima UMP quinase (UMPK, EC 2.7.4.22) e posterior ação da GK se mostrou bastante eficaz para tecidos de cana-de-açúcar. Entretanto, esta enzima também não é atualmente comercializada. A importância econômica da cana-de-açúcar (híbridos de *Saccharum* spp) para o setor sucroenergético brasileiro é inquestionável e a compreensão dos processos envolvidos no acúmulo de sacarose é muito importante para o desenvolvimento de cultivares que produzam elevado conteúdo deste açúcar. Neste sentido, é crucial mensurar a atividade de enzimas do metabolismo de sacarose de maneira acurada. No presente projeto realizamos a superexpressão da GK pelo gene GUT1 de *Pichia farinosa* e da UMPK pelo gene pyrH de *Escherichia coli* com a finalidade de determinar a atividade de enzimas importantes do metabolismo de sacarose (SPS, SuSy e UGPase) em cana-de-açúcar.

Estudo do papel do ácido retinóico na padronização dorso-ventral do tubo neural .

Bolsista: Luana Nunes dos Santos

Universidade: Universidade Estadual de Campinas

Orientador: Dr. Hozana Andrade Castillo

Resumo

A expressão da *Raldh2* nos motoneurônios e na placa do teto dentro do tubo neural já é conhecida, porém foi descrito um território de expressão dessa enzima dentro da medula espinhal de embriões de amniotos nunca descrito anteriormente, os interneurônios dorsais 1 (dl1). Esses dados sugerem que os papéis da sinalização pelo AR na organização D-V da medula espinhal se dão através da difusão do AR produzido na placa do teto para progenitores mais ventrais e também pela sinalização autócrina e transiente nos progenitores dos dl1s. Dessa forma a sinalização pelo AR, possivelmente, tem um papel importante na especificação dos progenitores dos dl1, que dão origem aos neurônios que formarão os circuitos proprioceptivos espinocerebelares e aos interneurônios comissurais, que cruzam a medula espinhal. A relação direta da sinalização pelo AR com o estabelecimento das redes gênicas que levam à diferenciação dessa classe de interneurônios ainda não foi determinada. Em Castillo et al., 2010 foi identificado o *enhancer* intrônico no gene *Raldh2* responsável por ativar a expressão endógena desse gene no tubo neural dorsal de embriões de amniotos, a partir do qual foi gerada uma linhagem transgênica. A fim de determinar os papéis da sinalização pelo ácido retinóico na especificação e/ou diferenciação desses interneurônios, estamos trabalhando na realização do *knockdown* da *Raldh2* na medula espinhal, através da eletroporação de morfolidos, seguida da hibridação *in situ* para marcadores dos interneurônios dorsais 1, 2 e 3, tanto no estado proliferativo, quanto diferenciado, além de imunohistoquímica e *Western Blot* para *Raldh2*. Também pretendemos dissecar as vias de sinalização e fatores de transcrição que atuam sobre esse *enhancer* da *Raldh2*, conferindo a ele o padrão de atividade nos diferentes tecidos observados.

Caracterização do complexo Rapamicina-FKBP12TOR em plantas C4

Bolsista: Luís Guilherme Furlan de Abreu

Universidade: Universidade Federal de São Carlos

Orientador: Dra. Camila Caldana

Resumo

O aumento da produção de biomassa está diretamente relacionado ao crescimento vegetal e é dependente da integração entre fatores ambientais, como disponibilidade de nutrientes, e internos, como status energético. Um dos reguladores de crescimento é a quinase “Target Of Rapamycin” (TOR) pertencente à família das fosfoinositol 3-quinases (PIKK). Uma vantagem de estudar esta proteína deve-se a possibilidade de inibição específica pela droga rapamicina, que induz à formação de um complexo entre a droga, TOR e uma imunofilina da família das proteínas FK506, denominada peptidyl-prolyl isomerase FKBP12. Em plantas superiores, ao contrário de outros eucariotos, o tratamento com rapamicina não resulta em um fenótipo claro de inibição de crescimento, devido a alterações nos aminoácidos da proteína FKBP12 que são críticos para a interação com rapamicina, impossibilitando a formação de um complexo estável com TOR. Contudo, resultados preliminares de nosso grupo indicam uma redução no crescimento em plantas de *S. italica* tratadas com rapamicina em comparação com plantas crescidas nas condições controle (DMSO). Assim, este trabalho tem como objetivo principal a caracterização da formação do complexo ternário em *Serratia italica*. Análises comparativas das sequências de aminoácidos de FKBP12 apontam, fortes indícios de que a interação com a droga possa ocorrer em *Setaria*. Além disso, a FKBP12 de *S. italica* foi capaz de complementar parcialmente o fenótipo de cepa mutante de levedura incapaz de expressar FKBP12.

Caracterização e adaptação evolutiva de cepas de Clostridium sp. visando à produção de butanol a partir de hidrolisados hemicelulósicos

Aluna: Beatriz Iara Cabral e Pacheco

Universidade: Universidade estadual de Campinas

Orientadora: Dra. Sindelia Freitas Azzoni

Resumo

A produção de biocombustíveis de segunda geração é uma exigência econômica e ambiental no sentido de tornar este processo tanto sustentável quanto rentável. O Brasil apresenta um grande potencial de ser uma liderança a nível mundial no aproveitamento de biomassa lignocelulósica e, por isso, esforços em pesquisa e desenvolvimento têm sido feitos para se obter hidrolisados de celulose e hemicelulose passíveis de serem fermentados por microrganismos e gerar biocombustíveis. Assim, faz-se necessário determinar as melhores condições de cultivo destes microrganismos no hidrolisado hemicelulósico, determinando sua cinética de crescimento e avaliando o efeito da composição do meio de cultura nos microrganismos, a fim de maximizar seu crescimento e a produção de compostos de interesse. O presente projeto tem seu foco em processos fermentativos de diferentes cepas de Clostridium sp., incluindo teste de diferentes meios e condições de crescimento definidos e complexos, determinação da cinética de crescimento e determinação dos alvos mais significativos para adaptação evolutiva dos microrganismos estudados (tais como resistência aos solventes produzidos, consumo de substrato, adaptação a inibidores presentes no hidrolisado hemicelulósico), visando a produção de butanol de segunda geração. Uma vez determinados os principais gargalos do processo, a cepa considerada mais adequada para crescimento no hidrolisado hemicelulósico passará por diferentes etapas de adaptação evolutiva para a obtenção de microrganismos mais tolerantes e aptos a fermentar o substrato de interesse.



CNPEM
Centro Nacional de Pesquisa
em Energia e Materiais

Desenvolvimento de inibidores da enzima Oxidase Alternativa (AOX) de *Moniliophthora perniciosa*

Bolsista: Jaqueline Sanitá Silva

Universidade: Universidade Estadual de Campinas

Orientador: Dra. Silvana A. Rocco

Resumo

A doença vassoura-de-bruxa que afeta o cacaueteiro (*Theobroma cacao*) é causada pelo fungo basidiomiceto *Moniliophthora perniciosa*, que atualmente constitui um dos maiores problemas fitopatológicos do Brasil. O fungo tem um ciclo de vida hemibiotrófico com uma primeira fase que se instala no espaço apoplástico de tecidos meristemáticos, causando hipertrofia das áreas infectadas, seguido por uma segunda fase de necrose, em que gera cogumelos e fecha o ciclo em esporulação. A grande complexidade da doença vassoura-de-bruxa sugere que o fungo possa estabelecer seu ciclo de vida com sucesso no hospedeiro. Um promissor caminho para o combate da doença envolve a inibição da enzima Oxidase alternativa (AOX). A AOX é uma proteína associada à membrana, que faz parte da cadeia respiratória do fungo, e dessa forma permite que este sobreviva mesmo quando sua via principal de respiração esteja bloqueada (e. g. pela ação de antifúngicos tradicionais). Diante deste cenário o presente estudo objetivou o desenvolvimento de moléculas inibidoras da AOX, que se mostrou uma abordagem promissora no combate da doença vassoura-de-bruxa, uma vez que a inibição desta enzima inviabilizaria as possíveis rotas alternativas de respiração disponíveis para o fungo. Testes preliminares revelaram que derivados de amidas aromáticas seriam eficazes na inibição da AOX, de modo que o estudo desta classe se mostrou fundamental. A rota sintética utilizada para a obtenção dessas amidas envolveu as reações de Schöttem-Baumann, uma clássica e eficiente reação bifásica, em que foram ajustadas de forma a obter melhores rendimentos. Dessa forma, foram sintetizados 45 compostos com rendimento de 15 a 98%, a maior parte delas com alto grau de pureza, embora algumas tenham atingido rendimentos superiores a 100% por ainda apresentarem umidade. Os espectros de RMN comprovaram a identidade dos compostos.

Descoberta e desenvolvimento de fármacos contra o câncer

Bolsista: Bruna Domingues Vieira

Universidade: Universidade Estadual de Campinas

Orientador: Dra. Daniela Barretto Barbosa Trivella

O presente projeto de pesquisa tem como foco principal a identificação de novos inibidores de alvos bioquímicos estratégicos contra câncer. Durante o primeiro semestre de atividades focamos nos estudos com o proteassomo resistente α Sall. O complexo resistente α Sall foi produzido por expressão heteróloga em *E. coli* e purificado por cromatografia de afinidade. Tentativas iniciais de cristalização do complexo foram realizadas no RoboLab e pequenos cristais foram obtidos. Porém, estes não mostraram capacidade de difração adequada para os estudos propostos e o processo de produção e cristalização do complexo α Sall encontra-se em fase de aperfeiçoamento. Em paralelo, conduzimos a expressão, purificação e cristalização da enzima biossintética Cpz8. Cpz8 foi também produzida por expressão heteróloga em *E. coli*, purificada por cromatografia de afinidade e de exclusão molecular. A proteína purificada apresentou excelente padrão de qualidade e foi submetida a ensaios de cristalização. Foram obtidas condições iniciais de cristalização, as quais foram refinadas para melhora do tamanho dos cristais obtidos inicialmente. Conjuntos de dados de excelente qualidade (resolução melhor que 2 Å) foram coletados na linha de luz MX-2. Durante o segundo semestre, foi realizado o faseamento experimental dos cristais da Cpz8 utilizando SAD. A estrutura foi determinada, refinada e analisada. A análise comparativa da Cpz8 com sulfotransferases de eucariotos (*Schistosoma mansoni* e humanas), apesar da baixa identidade sequencial, sugere os sítios de interação com seus dois substratos (aceptor e doador de sulfato). Da mesma forma, o centro catalítico pode ser sugerido, uma vez que as cadeias laterais dos aminoácidos participantes da catálise são bastante conservados na estrutura 3D da Cpz8 e das demais sulfotransferases analisadas. Com o intuito de validar estas hipóteses, conduzimos também experimentos na direção da obtenção da estrutura cristalográfica dos complexos binários e ternários da Cpz8.



CNPEM
Centro Nacional de Pesquisa
em Energia e Materiais

Expressão, purificação e caracterização de receptores nucleares

Bolsista: Izabel Cristina da Rocha Leão Crivelli Nunes da Silva

Universidade: Faculdade Integrada Metropolitana de Campinas – Metrocamp

Orientador: Dra. Ana Carolina Migliorini Figueira

Resumo

Receptores nucleares (RNs) são proteínas que atuam como fatores de transcrição e regulam a expressão gênica na presença ou na ausência de ligantes. Devido a sua capacidade de modular importantes processos do organismo tais como a embriogênese, a homeostase, a reprodução, o crescimento e a morte celulares, os RNs são alvos bastante promissores para o desenvolvimento de novos fármacos. O objetivo do presente estudo foi entender melhor as associações dos RNs com ligantes e também suas interações com outras proteínas. Para tanto, foi preciso expressar, purificar e caracterizar as proteínas na busca de uma melhor compreensão dos RNs e seus modos de ação. A importância deste estudo é contribuir para futuras pesquisas que envolvam a criação de produtos farmacológicos. Nesta pesquisa, de maneira específica, foi investigada a interação do receptor de hormônio tireoidiano (TR) e um possível parceiro, a proteína dissulfeto isomerase (PDI). Nesse sentido, as proteínas foram expressas, purificadas e caracterizadas, individualmente e complexadas, utilizando técnicas como dicroísmo circular e eletroforese nativa. Como perspectiva deste projeto, pretende-se cristalizar este complexo em busca de mapear as interações e, além disso, estudos em células de mamíferos estão sendo feitos em um projeto paralelo para entender o papel desta interação in vivo.

Estudo estrutural do fator de transcrição induzido por hipóxia 3 α (HIF-3 α) na formação de complexos heterodiméricos com HIF-1 α e HIF-1 β

Bolsista: Isis Frigeri Manali

Universidade: Universidade Estadual de Campinas

Orientador: Dra. Juliana Ferreira de Oliveira

Resumo

O fator induzível por hipóxia (HIF) apresenta um papel fundamental na adaptação celular causada por alterações na disponibilidade de oxigênio. HIF é um heterodímero composto de uma subunidade α altamente regulada pela presença de oxigênio (HIF-1 α , HIF-2 α ou HIF-3 α) e uma subunidade constitutivamente expressa, HIF-1 β . Em condições de normoxia, a subunidade α é modificada covalentemente e rapidamente degradada pela via de ubiquitinação, porém em hipóxia esta subunidade é estabilizada, se dimeriza com HIF-1 β e então é capaz de se ligar aos genes alvos, ativando sua transcrição. Qualquer problema nesta resposta adaptativa resulta na desregulação do metabolismo da célula. Recentemente, nosso grupo de pesquisa resolveu a estrutura tridimensional do domínio de dimerização de HIF-3 α , a subunidade menos estudada da família, permitindo a identificação de uma nova e completamente inesperada classe de cofatores intracelulares para HIF-3: lipídeos. Estudos de anisotropia de fluorescência e RMN indicam que mudanças conformacionais são necessárias para que HIF-3 α possa interagir com HIF-1 α e HIF1 β , provavelmente devido à presença do lipídeo em seu interior. Neste projeto, pretendeu-se cristalizar o complexo envolvendo HIF-3 α e a subunidade -1 β para tentar compreender melhor os mecanismos moleculares de formação do heterodímero e as implicações resultantes da presença do lipídeo na subunidade -3 α . Para tal, foi feita a purificação das subunidades HIF-3 α e HIF-1 β separadamente, otimização da condição de formação do complexo e ensaios iniciais de cristalização do complexo, o que resultou na formação de pequenos cristais. Estes cristais encontram-se em fase de refinamento com o intuito de alcançar a resolução estrutural do complexo.



CNPEM
Centro Nacional de Pesquisa
em Energia e Materiais

Desenho e síntese de inibidores irreversíveis da glicose-6-fosfato desidrogenase baseados em esteróides para mapear o sítio de ligação

Bolsista: Jorge Takao Yuzawa

Universidade: Universidade Estadual de Campinas

Orientador: dra. Marjorie C. P. Bruder

Resumo

A glicose-6-fosfato-desidrogenase (G6PDH) catalisa a primeira parte da sequência de reações da pentose-fosfato (PPP, do inglês pentose phosphate pathway), convertendo glicose-6 fosfato (G6P) em 6-fósforo-gliconolactona e reduzindo concomitantemente o NADP⁺ para NADPH. A etapa oxidativa do PPP produz 5fosfato ribose que é a precursora das sínteses dos ácidos nucleicos, e repõe a célula com NADPH para o processo biossintético e proteção contra o estresse oxidativo. A G6PDH é uma importante enzima para a regulação metabólica e por isso, muitos estudos são feitos quanto a sua atividade em relação à obesidade, doenças cardiovasculares e câncer. 1, 2, 3. A atividade da deidroepiandrosterona (DHEA, 1) quanto à inibição da G6PDH de mamíferos foi primeiramente estudada por Mark e Banks em 1960 4 e posteriormente, outros estudos tem mostrado derivados da DHEA, baseados na epiandrosterona (EA (2), e BrEA (3)) como inibidores da G6PDH 5,6,7. Em particular, o mecanismo de inibição desses esteróides foi evidenciado por Gordon et al foi evidenciado como sendo do tipo incompetitivo, ou seja, o esteróide se liga no complexo enzima-coenzima-substrato.8 Em 2010, o grupo de Cordeiro et al. têm mostrado que a inibição da G6PDH dos parasitas da família Trypanosomidae, tem efeito tóxico nesses parasitas.9,10 Os complexos ligante/enzima ainda não são conhecidos do ponto estrutural, tentativas de cristalização destes complexos tendo falhado, provavelmente devido à baixa solubilidade dos esteróides nas condições experimentais. Por isso, foi contemplada a preparação de esteróides com porções eletrofílicas para formar ligações covalentes irreversíveis com os aminoácidos nucleofílicos da enzima. O trabalho desenvolvido neste projeto envolve a síntese de derivados eletrofílicos do esteróide epiandrosterona (EA), com objetivo de formar adutos destes com a enzima G6PDH.

Espectroscopia de absorção de raios X e cálculos ab initio aplicados ao estudo de íons metálicos encapsulados

Bolsista: Guilherme Henrique de Oliveira

Universidade: Universidade Estadual de Campinas

Orientador: Dr. Frederico Alves Lima

Resumo

Este projeto destina-se a elucidar estruturas geométricas e eletrônicas do estado fundamental e durante reações catalíticas de complexos de cobalto do tipo sepulcratos através de experimentos de espectroscopia de absorção de raios X correlacionando os dados experimentais com cálculos teóricos de espalhamento múltiplo e teoria funcional da densidade dependente do tempo. Para isso foram levantadas algumas referências relacionadas ao assunto, contemplando espectroscopia de absorção de raios X, sobre sepulcratos de cobalto e algumas de suas propriedades eletrônicas. Foram realizadas medidas de XANES obtendo informações sobre a redução do complexo metálico quando reagido com NaBH_4 . Em paralelo foram projetados dois mecanismos de fluxos para realizar medidas durante reações catalíticas que serão testados numa etapa futura desse projeto.

Otimização de parâmetros para EBSD por transmissão

Bolsista: Tiago de Oliveira Carvalho

Universidade: Universidade Estadual de Campinas

Orientador: Dr. Johnnatan Rodriguez Fernandez

Resumo

Este trabalho se baseou no estudo da técnica de t-EBSD, buscando as condições ótimas de aplicação de tal técnica no Laboratório de Microscopia Eletrônica do Laboratório Nacional de Nanotecnologia (LNNano). Para isso vários parâmetros foram testados no microscópio de forma consciente, tendo como guia conhecimentos obtidos a partir de uma leitura bibliográfica anterior. Os parâmetros que foram alterados consistem na distância de trabalho do ensaio, cujos valores foram 5mm, 7mm, 10mm, a energia do feixe de elétrons que foram 20 kV e 30 kV e o ângulo de posicionamento de 0, 15 e 25 graus todos medidos em relação a horizontal. Foi utilizada uma amostra padronizada de aço UNS32750 preparada para esse tipo de ensaio. Após obter os melhores parâmetros para a técnica, ainda foram realizados alguns ensaios visando observar a variação da qualidade da imagem com relação a características da amostra, isto é, como a espessura da amostra pode alterar a qualidade da imagem.



CNPEM
Centro Nacional de Pesquisa
em Energia e Materiais

Reconstrução cristalográfica do grão austenítico prévio as transformações alotrópicas

Bolsista: Rodrigo Lenzi Rocha

Universidade: Universidade Estadual de Campinas

Orientador: Dr. Johnnatan Rodriguez Fernandez

Resumo

Esse trabalho baseia-se em utilizar a técnica de difração de elétrons retro espalhados (EBSD), no microscópio eletrônico de varredura (MEV) Fei Quanta 650, para realizar a reconstrução cristalográfica de cristais prévios às transformações alotrópicas em aços de alta resistência e baixa liga processados por soldagem com atrito com pino não consumível (SAPNC), e também de aços que passaram por tratamentos térmicos. Primeiramente foi utilizado um aço A516-60 - com o objetivo de treinar o manuseio correto dos equipamentos envolvidos na pesquisa, e também por ser mais fácil estudar o aço A516 se comparado ao X80, já que ele possui menos fases que o X80 - para depois começar a preparar e realizar as imagens dos aços de alta resistência e baixa liga. O material a ser utilizado durante o processo será o aço: API 5L X80, sendo analisadas amostras que foram processadas por soldagem com atrito com pino não consumível, e outras que foram tratadas termicamente. A reconstrução foi conduzida em etapas, sendo a primeira constituída pela preparação de amostra, posteriormente foram realizados mapas de orientação cristalográfica no MEV, utilizando a técnica EBSD e o software AZtecHKL, esse último, responsável por obter a os dados cristalográficos da amostra, que serão usados no software ARPGE, responsável por gerar o grão austenítico prévio às transformações alotrópicas.

Inversão tomográfica através do uso de GPUS (tomographic reconstruction through graphics processing units)

Bolsista: João Carlos Cerqueira

Universidade: Universidade Estadual de Campinas

Orientador: Dr. Eduardo X. Miqueles

Resumo

A reconstrução de imagens tomográficas a partir de projeções de alta resolução, utilizando raios-X gerados numa fonte de luz síncrotron, é um problema matematicamente muito interessante. Embora o assunto seja bem estabelecido na literatura, com solução analítica conhecida, seu cálculo é computacionalmente custoso. Isso se deve ao cálculo de duas operações matemáticas: a transformada de Radon e a retroprojeção. Estas duas operações são semelhantes, de forma que ambas se tratam de uma integral que deve ser calculada para cada pixel do resultado construído. Este cálculo é computacionalmente custoso, principalmente quando lida-se com projeções de alta resolução. Neste projeto, estudamos o cálculo de ambas as transformadas e sua implementação em GPUS, placas dedicadas de processamento gráfico, de modo a acelerar o cálculo.