



Livro de Resumos do 14º Congresso Interno de Iniciação Científica do Programa PIBIC no CNPEM

Apresentação

É com enorme satisfação que realizamos, no dia 14 de setembro de 2016, o 14º Congresso Interno do Programa Institucional de Bolsas de Iniciação Científica (PIBIC) do Centro Nacional de Pesquisa em Energia e Materiais (CNPEM). Entre agosto de 2015 e julho de 2016, vinte e quatro alunos de graduação participaram do programa PIBIC do Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq). Os alunos, 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 14º 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



Resumos apresentados no 14º 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 setembro de 2016

Otimização da produção de ácido láctico utilizando melão e pentoses provenientes da hidrólise do bagaço da cana de açúcar

Bolsista: Pedro Otávio Marques Schichi

Universidade: Universidade Estadual de Campinas

Unidade CNPEM: Laboratório Nacional de Tecnologia do Bioetanol - CTBE

Orientador: Dr. Carlos Eduardo Vaz Rossell

Co-orientador: Dra. Regiane Alves de Oliveira

Resumo

O ácido láctico é um ácido orgânico de ampla aplicação industrial. Atualmente é um produto de alto valor agregado e possui altos custos de produção, especialmente no que diz respeito aos substratos utilizados durante o processo de fermentação. Neste estudo, utilizou-se o melão e a fração de pentoses provenientes da hidrólise do bagaço de cana de açúcar para produzir ácido láctico via fermentação. Esta molécula é utilizada na fabricação do poli-ácido láctico (PLA), que possui inúmeras aplicações, como produção de plástico biodegradável, utilização na indústria química como molécula base para outras moléculas, utilização na indústria farmacêuticas e de alimentos, além de próteses cirúrgicas. A utilização dos açúcares provenientes da cana de açúcar é interessante, uma vez que esta é uma fonte renovável, de relativo baixo custo e impacto ambiental, e muito bem estabelecida na logística de produção brasileira. Acredita-se que esta estratégia pode auxiliar na redução dos custos da produção de ácido láctico, favorecendo a produção nacional e aumentando as vantagens da produção de PLA em relação aos polímeros derivados de petróleo. Neste projeto concluiu-se que a fermentação para produção de ácido láctico usando melão como substrato tem bons resultados. Também se concluiu que o uso de hidróxido de cálcio é mais recomendado para controlar o pH do processo, pois ao neutralizar o ácido láctico formando produto insolúvel, o mesmo reduz a pressão osmótica nas células exercida por compostos solubilizados. Também se ressalta que o mínimo de extrato de levedura a ser utilizado, sem a necessidade de se acrescentar outros sais e vitaminas ao mosto, é de 20 g/L. Neste sentido, sugere-se que este não seja um problema para a indústria nacional, uma vez que se planeje um processo integrado para a produção de açúcar, etanol 1G e 2G, e ácido láctico 2G, de modo que os custos dos substratos sejam reduzidos, seja para utilização de melão, extrato de levedura ou de licor de C5. Quando se utiliza o licor de C5 no processo fermentativo mostra-se viável e reprodutível, sugerindo uma possível alternativa para o uso desse produto que, ainda hoje, não possui destino certo na indústria 2G. Além disso, foi possível notar efeitos negativos no processo quando se utiliza o licor de C5. Esses efeitos se dão, tanto da ausência de glicose, o que inibe o consumo de xilose, quanto pela presença dos inibidores HMF e furfural. Isso significa que a viabilização deste processo demanda uma otimização no processo fermentativo e de pré-tratamento do bagaço de cana de açúcar para extração dos açúcares hemicelulósicos.

Estudos estruturais com enzimas envolvidas na biossíntese de produtos naturais de interesse farmacêutico

Bolsista: Bruna Domingues Vieira

Universidade: Universidade Estadual de Campinas

Unidade CNPEM: Laboratório Nacional de Biociências - LNBio

Orientadora: Dra. Daniela Barretto Barbosa Trivella

Resumo

Este projeto de iniciação científica iniciou com foco em descoberta de fármacos a partir de produtos naturais, centrado na produção e cristalização de enzimas, as quais eram o alvo biológico dos produtos naturais em estudo. A aluna desenvolveu suas atividades iniciais em conjunto com o aluno de mestrado do grupo Arthur Z. N. Fernandes, as quais foram centradas na produção e cristalização das enzimas proteassomo $\alpha\beta$ e sua forma resistente α Sall. Ao longo do desenvolvimento deste trabalho, a aluna se envolveu na produção e cristalização de enzimas biossintéticas relacionadas a produtos naturais de interesse farmacêutico. Estes projetos se desenvolveram muito bem com resultados bastante animadores. Desta forma, nos últimos semestres a aluna focou suas atividades nestas tarefas, agora de forma mais independente. Foram estabelecidos protocolos de expressão, purificação e cristalização para as enzimas biossintéticas: 1) Cpz8 – na biossíntese dos antibióticos caprazamicina, com baixa identidade sequencial com enzimas de estrutura conhecida; 2) AnsB – proposta recentemente como enzima importante para a biossíntese de cianotoxinas e 3) EpnF e EpxF – envolvidas na biossíntese do farmacóforo epoxicetona em produtos naturais inibidores do proteassomo, eponimicina e epoxomicina respectivamente. Os dados de cristalização e resolução estrutural da Cpz8 foram reportados no relatório anual anterior. As análises estruturais mais aprofundadas e a avaliação evolutiva desta família de enzimas foram realizadas e são base do artigo científico em preparação. A expressão, purificação e cristalização de AnsB e EpnF foram reportadas detalhadamente no relatório parcial. Neste semestre, foram realizadas a coleta de dados dos cristais de $\alpha\beta$ e AnsB; análises complementares (TSA, CD, UPLC-MS) para a Cpz8; ensaios de cristalização, TSA e DLS com a EpnF, e expressão e purificação de EpxF. Estes dados serão detalhados neste relatório.

Espectroscopia de Absorção de Raios X e Cálculos ab initio Aplicados ao Estudo de Íons Metálicos Encapsulados

Bolsista: Leandro de Souza Schenfel

Universidade: Universidade Estadual de Campinas

Unidade CNPEM: Laboratório Nacional de Luz Síncrotron - LNLS

Orientador: Dr. Frederico Alves Lima

Resumo

O hidrogênio (H_2) é considerado um combustível renovável com grandes qualidades que podem ser aplicadas no futuro. A natureza dispõe de formas bastante eficientes de se produzir hidrogênio usando enzimas chamadas hidrogenases (H_2ase), que catalisam a oxidação reversível do H_2 . Essas proteínas têm grande potencial em aplicações tecnológicas, principalmente na aplicação em células solares e na geração de combustível. Porém, o mecanismo molecular de funcionamento da H_2ase no qual prótons são convertidos em hidrogênio molecular é tema de diversos estudos e não se encontra totalmente esclarecido. Nesse sentido, o estudo de sistemas biológicos pode fornecer uma inspiração para se resolver vários aspectos do problema energético, em particular aqueles relacionados às mudanças climáticas. Recentemente, complexos contendo cobalto vem sendo amplamente estudados como catalisadores em processos oxidativos, muito devido à sua alta capacidade de transferência de elétrons. Entre esses complexos há o interesse no estudo de macrociclos formados principalmente por átomos de carbono e nitrogênio. Esses podem se organizar de maneira a formar uma espécie de gaiola isolando o íon metálico, e são chamados sepulcratos. Esse projeto tem como objetivo o estudo de estruturas geométricas e eletrônicas do estado fundamental e durante reações catalíticas de complexos de cobalto do tipo sepulcrato através de experimentos de espectroscopia de raios X correlacionando os dados experimentais com cálculos teóricos de espalhamento múltiplo e teoria funcional de densidade dependente do tempo.

Permeabilidade Hidráulica em meios Porosos

Bolsista: Bruna Moraes Lopes

Universidade: Pontifícia Universidade Católica de Campinas

Unidade CNPEM: Laboratório Nacional de Luz Síncrotron - LNLS

Orientadora: Nathaly Lopes Archilha

Co-orientador: Eduardo Xavier Miqueles

Resumo

O estudo da permeabilidade se faz relevante em diversas áreas. No setor ambiental existem impactos como a contaminação de solos no entorno de áreas onde se tem disposição de resíduos, e, portanto, o conhecimento da permeabilidade é fundamental para quantificar a dificuldade/facilidade do fluxo de água através dos poros do solo. Na construção civil, a permeabilidade é importante para viabilizar cálculos das vazões nos solos, na análise de recalques, e também no estudo de estabilidade. Por fim, para a indústria do petróleo, essa propriedade está diretamente relacionada à dificuldade ou facilidade de se extrair petróleo e/ou gás de um campo produtor. Este trabalho visa estudar, portanto, as equações que regem a vazão em um meio poroso, a fim de determinar analiticamente a permeabilidade deste meio e comparar o resultado com o software comercial, que simula o fluxo e a permeabilidade de um meio a partir de uma imagem tridimensional. Para tanto, elaborou-se o seguinte problema de pesquisa: identificar todas as condições de contorno e simplificações que o software utiliza e, em seguida, resolver essas equações analiticamente para um caso simples, um cilindro de raio constante. As técnicas utilizadas para tal fim foi a dedução da conservação de massa, segunda lei de Newton, juntamente com estudos na área de hidráulica que visam o comportamento dos fluidos, onde foram aplicados os procedimentos mais básicos para as condições aqui inseridas. Por fim observou-se por meio das análises que os resultados demonstraram valores bem próximos na comparação do fluxo e foram discrepantes na comparação da permeabilidade, o que motivou a análise de outras aplicações que o software promove, como a multiplicação do comprimento da amostra.

Condutividade Elétrica Aparente do Solo como Ferramenta para Auxílio na Classificação de Ambientes de Produção nas Lavouras de Cana-de-açúcar

Bolsista: Maria Thereza Nonato de Paula

Universidade: Universidade Estadual de Campinas

Unidade CNPEM: Laboratório Nacional de Tecnologia do Bioetanol - CTBE

Orientador: Dr. Henrique C. Junqueira Franco

Co-orientador: Dr. Paulo Sérgio Graziano Magalhães

Resumo

Produção (AP), definidos em função das condições físicas, hídricas, morfológicas e mineralógicas dos solos. A soma das interações dos atributos de superfície e subsuperfície, o grau de declividade e as condições climáticas definem o “Ambiente de Produção”. As unidades produtoras utilizam a classificação dos ambientes para diversos fins, como alocação de variedades, adubação, definição de épocas de plantio e colheita. No entanto a classificação, na maioria das vezes, é feita por meio de poucos pontos amostrais e baseada na expertise dos profissionais da área. Tal fato proporciona classificações pouco precisas e que não representam a real variabilidade físico-química dos solos. Com o advento das tecnologias da Agricultura de Precisão (AP) para mapeamento das lavouras, o conhecimento da variabilidade espacial dos solos em tempo real já é possível. Uma das ferramentas importantes deste pacote tecnológico da AP são os sensores de condutividade elétrica aparente (CEa), que possuem a capacidade de mapear a variabilidade do estado físico-químico dos solos de maneira rápida, com alta resolução e baixo custo. O objetivo do presente trabalho é evidenciar que, por meio da CEa, é possível conhecer a variabilidade da matriz físicoquímica dos solos, auxiliando a classificação dos ambientes de produção de maneira mais rápida, precisa e que representam a real variabilidade do potencial produtivo das lavouras de cana-de-açúcar. Os resultados mostram que a CEa do solo foi capaz de refletir a variabilidade espacial do conteúdo de argila com alta resolução, evidenciando regiões no campo com diferentes potenciais produtivos e que são manejadas somente de acordo com um único ambiente de produção. Com ambientes de produção mais precisos (zonas de manejo) os produtores de cana-de-açúcar poderão alocar variedades e adubar suas áreas agrícolas de maneira mais adequada e sustentável, potencializando a capacidade produtiva e maximizando a lucratividade das lavouras.

Influência dos compartimentos da palha na qualidade do solo, ciclagem de nutrientes e produtividade do canavial

Bolsista: Michael Alex dos Santos

Universidade: Universidade Federal de São Carlos

Unidade CNPEM: Laboratório Nacional de Tecnologia do Bioetanol - CTBE

Orientador: Dr. João Luís Nunes Carvalho

Resumo

A colheita mecanizada é um importante avanço do setor sucro-energético. Com a promulgação da lei que proíbe a queima da cana-de-açúcar, a palha, constituída por ponteiros e folhas secas, agora permanece sobre o solo. Contudo devido a opções mais atraentes, como a cogeração de energia e atualmente produção de etanol de 2ª geração, esta permanência está sendo questionada. Seguindo tal linha de pensamento o presente projeto visa avaliar a dinâmica da decomposição de ponteiros e folhas secas e a quantidade de água e temperatura do solo sob manutenção destes compartimentos no campo. Foram realizadas avaliações da decomposição da palha e registradas a temperatura e umidade do solo durante o período vigente da bolsa. A taxa de decomposição da palha foi determinada a partir do método de "litter bags", com coletas ao longo do ciclo. A temperatura e umidade do solo foi avaliada a partir de sensores colocados no solo. Verificou-se que a diferenciação dos compartimentos é importante para os processos de decomposição. Foi visto também que a quantidade de folhas secas influencia diretamente na decomposição e a quantidade de palha, sem diferenciar os compartimentos, influencia a temperatura e umidade do solo.

Síntese de nanopartículas luminescentes para uso em bioimagem

Bolsista: Ísis Frigeri Manali

Universidade: Universidade Estadual de Campinas

Unidade CNPEM: Laboratório Nacional de Luz Síncrotron - LNLS

Orientadora: Verônica de Carvalho Teixeira

Resumo

Nanopartículas luminescentes são de grande interesse ao desenvolvimento de técnicas e métodos para bioimagens, com a finalidade de observação de um tecido específico. Neste trabalho, partículas luminescentes de Y_2SiO_5 (YSO) dopadas com Eu e partículas luminescentes de Y_2O_3 dopadas com Eu e Ti foram sintetizadas e seu comportamento óptico foi investigado através da luminescência óptica excitada por raios X (XEOL). As amostras de YSO foram sintetizadas através das metodologias de sol-gel proteico e híbrida, ambas assistidas por água de coco (ACP e MH, respectivamente) e calcinadas em diferentes temperaturas. As amostras de Y_2O_3 foram obtidas pela rota sol-gel, assistida por água (Água) e por água de coco (ACP) e calcinadas a 1000°C . A estrutura cristalina foi avaliada através da difração de raios X (DRX) e a fase única de cada uma das matrizes propostas foi encontrada e comparada a padrões do banco de dados cristalográficos Inorganic Crystal Database Structure (ICSD). As matrizes cristalinas em fase única foram obtidas no YSO pela rota ACP e no Y_2O_3 pela metodologia ACP e Água. A microscopia eletrônica de varredura revelou que as amostras preparadas através do sol-gel assistido por água de coco apresentam partículas de tamanhos nanométricos e formatos esféricos, regulares e uniformes, enquanto aquelas obtidas através do sol-gel assistido por água apresentam formatos irregulares e tamanhos da ordem de centenas de nanômetros. No estudo das propriedades ópticas desses materiais via (XEOL), foi possível observar que o Eu^{3+} é o principal centro emissor tanto nas amostras dopadas com Eu quanto com EuTi , tendo a transição $5D_0 \rightarrow 7F_2$, com máximo 610 nm, como mais intensa. Para as amostras dopadas com Eu e Ti ($Y_2O_3:\text{Eu Ti}$), não se observam transições associadas para o íon em estados $3+$ ou $2+$, o que indica a predominância do Ti^{IV} que não é opticamente ativo. Nas amostras somente dopadas com Ti ($Y_2O_3:\text{Ti}$) são observadas bandas largas, provavelmente associadas à transição ao Ti^{2+} e/ou Ti^{3+} . A emissão no vermelho das amostras que contêm Eu^{3+} , máximo em 610 nm, é compatível com a janela de transparência de tecidos biológicos, 600 - 900nm, permitindo a aplicação desses materiais, por exemplo, em bioimagens.

Desenvolvimento de Inibidores da Enzima Oxidase Alternativa (AOX) de *Moniliophthora perniciosa*

Bolsista: Jaqueline Sanitá Silva

Universidade: Universidade Estadual de Campinas

Unidade CNPEM: Laboratório Nacional de Biociências - LNBio

Orientadora: Dra. Silvana A. Rocco

Resumo

A doença vassoura-de-bruxa que afeta o cacauzeiro (*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 vassourade-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 73 compostos com rendimento de 10 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. Ensaio biológico utilizando a levedura *Pichia pastoris* como modelo para a avaliação dos inibidores da AOX, revelaram estruturas promissoras na inibição da via alternativa. Além da triagem de análogos estruturais ter revelado ao menos um composto ainda mais potente, com a possibilidade de apresentar menor toxicidade frente a planta.

Destoxificação de hidrolisado hemicelulósico para produção de etanol de segunda geração

Bolsista: Grazielle Patrícia Morgado

Universidade: Universidade Estadual de Campinas

Unidade CNPEM: Laboratório Nacional de Tecnologia do Bioetanol - CTBE

Orientadora: Dra. Sarita Cândida Rabelo

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.

Nanocompósitos de materiais grafênicos de carbono obtidos a partir de biomoléculas (açúcares e aminoácidos) suportados em hidróxidos duplos lamelares

Bolsista: Ana Claudia Fingolo

Universidade: Universidade Estadual de Campinas

Unidade CNPEM: Laboratório Nacional de Nanotecnologia - LNNANO

Orientador: Dr. Mathias Strauss

Resumo

Neste projeto apresentamos o estudo da preparação e das propriedades de nanocompósitos de materiais grafênicos de carbono suportados em hidróxidos duplos lamelares (HDL) ou bentonita, preparados a partir de reações de caramelização ou reação de Maillard usando como biomolécula precursora o açúcar refinado, composto principalmente por sacarose, e o glutamato monossódico como fonte de nitrogênio para a reação de Maillard. O HDL foi sintetizado pelo método de co-precipitação em pH variável a partir de cloretos dos metais Mg e Al e hidróxido de sódio. O suporte lamelar foi misturado ao açúcar refinado e à água deionizada e essa mistura foi submetida a micro-ondas por tempo e potência determinados em um estudo fatorial. O material resultante foi submetido a um processo de pirólise em forno tubular, sob atmosfera de N₂, para a formação do material grafênico. Os resultados de DRX mostram que a síntese do HDL teve sucesso. A análise termogravimétrica confirmou a presença de carbono no espaço interlamelar da bentonita nas amostras preparadas com essa argila e mostrou que o carbono formado após a pirólise é termicamente mais estável que o carbono antes da pirólise. A caracterização por microscopia eletrônica de varredura e de transmissão mostrou que o material resultante tem uma estrutura lamelar e a análise por espectroscopia Raman apresentou a banda D e a banda G, como esperado para materiais grafênicos.

Aplicação de cálculo termodinâmico em diagramas de fases para determinação de equilíbrios de fases em superligas à base de Cobalto

Bolsista: Caique de Carvalho Souza

Universidade: Universidade Federal de São Carlos

Unidade CNPEM: Laboratório Nacional de Nanotecnologia - LNNANO

Orientador: Dr. Johnnatan Rodriguez Fernandez

Resumo

Este trabalho tem como finalidade a verificação dos equilíbrios de fases estabelecidos a partir do sistema de ligas Co-Al-W, com foco na região rica em cobalto. O efeito das adições dos elementos de ligas Ni, Ta, Nb, Cr, B e C também foram estudados. As simulações de cálculo termodinâmico foram realizadas com base no método é o CALPHAD (Calculation of Phase Diagrams). Inicialmente, foi revisada a literatura acerca do sistema binários, ternário Co-Al-W na região rica em Co, e as extrapolações para sistemas multicomponentes foram calculadas a partir das adições dos elementos de ligas mencionados anteriormente. Os resultados mostraram uma razoável correlação com os dados da literatura. Entretanto, faz-se necessária a otimização das funções termodinâmicas que descrevem as fases Co (FCC), compostos de estequiometria A₃B, com estrutura ordenada L1₂, referente à fase γ Co₃(Al,W) e as fases minoritárias Co₃W, Co₇W₆ e carbonetos de estequiometria MC, M₆C, M₇C₃, que estão presentes nos equilíbrios estabelecidos em sistemas multicomponentes.

Identificação de moléculas reguladoras da quebra de dormência de gemas axilares em cana-de-açúcar

Bolsista: Vinicius Fernandes de Souza

Universidade: Universidade Federal de São Carlos

Unidade CNPEM: Laboratório Nacional de Tecnologia do Bioetanol - CTBE

Orientadora: Dra. Camila Caldana

Resumo

A importância econômica da cana-de-açúcar (híbridos de *Saccharum spp*) para o setor sucroenergético brasileiro é inquestionável. A cana-de-açúcar é utilizada como matéria prima para a produção de sacarose e bioetanol e o Brasil é atualmente um dos maiores produtores e exportadores do mundo. A cana-de-açúcar é cultivada de maneira sustentável em relação a eficiência de carbono e rendimento bioenergético por hectare. Os cultivares comerciais são propagados de maneira vegetativa e a taxa de brotação da cultura ainda está muito aquém do desejado. A brotação eficiente dos meristemas axilares é de extrema importância para estabelecer e propagar novas plântulas de cana de-açúcar no campo e pouco se sabe sobre as bases moleculares e fisiológicas envolvidas neste processo. Este trabalho teve como objetivo inicial estabelecer um sistema de cultivo in vitro para gemas de cana-de-açúcar, visando a aplicação de moléculas ativadoras da quebra de dormência do meristema axilar como prova de conceito para aumentar a baixa taxa de brotação em algumas variedades. Entretanto, devido à grande dificuldade tanto para isolar os meristemas como para obter plântulas crescendo em meio estéril, o experimento piloto que identificou potenciais moléculas foi repetido em maior escala para validar os resultados obtidos anteriormente. Desta forma, 16 variedades de cana-de-açúcar da RIDESA representativas na indústria brasileira foram avaliadas quanto à taxa de brotação, buscando identificar parâmetros fenotípicos e processos metabólicos que pudessem contribuir para um bom desempenho nesta importante característica agrônômica, geralmente negligenciada. Parâmetros como peso e espessura dos mini-toletes não apresentaram uma correlação clara com a taxa de brotação ou tamanho de plântulas na fase de estabelecimento. Algumas variedades (RB92579 e RB965917) já apresentaram bom desempenho de brotação logo nos primeiros dias de avaliação, enquanto outras tiveram brotação mais tardia e vagarosa (RB937570, RB72454 e RB975201). Entretanto, em nossas condições experimentais, aos 14 dias de experimento todas as variedades apresentaram brotação superior a 80%. Compreender os fatores que afetam a brotação é de extrema importância para aumentar a produtividade do canavial e evitar perda de material que poderia ser utilizado para a indústria.

Produção e caracterização de receptores nucleares visando estudos de interação com outras biomoléculas

Bolsista: Luana Beatriz Sousa dos Santos

Universidade: Universidade ESAMC

Unidade CNPEM: Laboratório Nacional de Biociências - LNBio

Orientadora: Dra. Ana Carolina Migliorini Figueira

Resumo

Este projeto tem como objetivo estudar a formação de complexos entre receptores nucleares, especialmente do TR, com outras biomoléculas, como a proteína GRIP, que atua como coativador da transcrição genica, caracterizando os mesmos. Para tanto, foram desenvolvidos os ensaios de expressão e purificação das proteínas, as quais estavam inseridas em uma fusão, na tentativa de se modificar a forma de produção deste complexo. Entretanto, os resultados obtidos não foram satisfatórios, e verificou-se a qualidade dos clones através de ensaios de digestão. Após este processo, concluímos que uma intervenção nos clones e vetores de expressão em que os genes estão inseridos se faz necessária. Para tanto serão realizadas novas subclonagens em um novo sistema de expressão. Além disso, este projeto engloba a realização de outros experimentos de caracterização biofísica para avaliar a qualidade das amostras e a estabilidade da estrutura secundária das proteínas e complexos.

Construção de vetor viral bicistrônico para veicular cassete de expressão codificando forma truncada da proteína GP120 do envelope viral do HIV e o repórter fluorescente eGFP

Bolsista: Letícia Gama e Silva

Universidade: Universidade Estadual de Campinas

Unidade CNPEM: Laboratório Nacional de Biociências - LNBio

Orientador: Dr. Marcio Chaim Bajgelman

Resumo

Apesar de existirem tratamentos antivirais que possibilitam aumento na longevidade dos pacientes acometidos de infecção por HIV, ainda não se conhece uma abordagem que possibilite a cura. Diversos esforços são empenhados no sentido de eliminar partículas virais, células infectadas ou gerar moléculas que atuem na inibição de replicação viral. Considerando-se que o HIV necessita da célula para se replicar, a eliminação de células infectadas ou bloqueio de replicação viral nas células infectadas seria uma abordagem interessante. Neste projeto, planejamos a construção de um vetor retroviral murino recombinante, que apresenta um cassete bicistrônico contendo o cDNA codificante de uma proteína truncada GP120 derivada do envelope do HIV e do gene repórter eGFP. Este vetor possibilitará a produção de partículas virais recombinantes que serão utilizadas para o estabelecimento de linhagens celulares contendo a proteína viral na membrana e o marcador eGFP no citoplasma. Estas linhagens poderão ser utilizadas para o screening de compostos alvo-específicos que apresentem tropismo por GP120.

Estudos in vitro da interação entre a GTPase RagB e subunidades do complexo Ragulator

Bolsista: Mariana Piccoli Gonçalves

Universidade: Universidade Estadual de Campinas

Unidade CNPEM: Laboratório Nacional de Biociências - LNBio

Orientadora: Dra. Juliana Helena Costa Smetana

Resumo

Vias de sinalização celular são essenciais para a coordenação de diversos processos celulares, como por exemplo o crescimento e proliferação celulares. A via de sinalização mediada pelo complexo mTORC1 está relacionada a diversos tipos de doenças, entre elas, câncer e diabetes do tipo II. Estudos indicam que aminoácidos são essenciais para a translocação deste complexo para a membrana dos lisossomos, onde residem as Rag GTPases, que translocarão o mTORC1 até o seu ativador, Rheb. As Rag GTPases são proteínas ainda pouco estudadas. Sabe-se que são expressas por quatro genes diferentes, traduzidos em quatro proteínas distintas, RagA, RabB, RagC e RagD, sendo que a proteína RagB ainda apresenta três variantes de splicing, entre elas, a variante RagBs. As proteínas Rag são recrutadas para os lisossomos através do complexo Ragulator, constituído por 5 proteínas, p14, MP1, p18, c7orf59 e HBXIP. As proteínas Mp1 e p14 se organizam em um heterodímero, MP1/p14, cujo protocolo de cristalização já foi descrito. A comparação com estruturas de complexos semelhantes indica que as alfa-hélices centrais do dímero MP1/p14 interagem com a GTPase Rag, entretanto, ainda não é conhecido o sítio de interação entre estas proteínas. Este trabalho então objetivou produzir proteína recombinante RagB (RagBs core: sítio de GTPase da RagBs,) em estado solúvel, para ser possível então buscar a interface de interação entre esta proteína e o heterodímero MP1/p14 constituinte do complexo Ragulator. Ao longo do trabalho desenvolvido durante esses meses, conseguimos padronizar um protocolo eficiente de expressão e purificação desta proteína, através de purificação por afinidade e também através da coluna de gel-filtração, ainda que o domínio GTPásico da proteína RagBs seja bastante instável, e precise de diversos cuidados durante suas etapas de purificação. Observamos que o domínio GTPásico da proteína RagBs não interagiu com o dímero Mp1/p14 nas condições testadas, e testes adicionais utilizando uma variante completa desta proteína serão realizados, de modo a verificar se a interação entre as proteínas realmente não ocorre, ou se é necessário que todos os domínios da proteína RagBs estejam presentes para que a interação aconteça.

Papel de efetores bacterianos na interação com prolil- isomerases de plantas

Bolsista: Rafaela Rossi Rosolen

Universidade: Universidade Estadual de Campinas

Unidade CNPEM: Laboratório Nacional de Biociências - LNBio

Orientador: Dr. Celso E. Benedetti

Resumo

O cancro cítrico, causado pelo fitopatógeno *Xanthomonas axonopodis* pv. *citri* (Xac), constitui uma doença que afeta todos os cultivares comerciais de citros e é uma ameaça para a citricultura brasileira. A doença é caracterizada pela formação de lesões circulares nas folhas, frutos e galhos da planta e o desenvolvimento de pústulas dentro destas lesões, devido à hiperplasia e hipertrofia induzidas pela bactéria. A patogenicidade de Xac é dependente do sistema secretório tipo III, que transloca proteínas efetoras (PthAs) pertencentes à família AvrBs3/PthA para dentro da célula hospedeira. Estudos recentes mostram que PthAs funcionam como fatores de transcrição no hospedeiro, transativando genes específicos da planta que irão beneficiar a bactéria ou desencadear uma resposta de defesa. Com o objetivo de entender melhor o mecanismo de ação de PthAs como ativadores da transcrição, nosso laboratório identificou, através da técnica de duplo-híbrido, várias proteínas de laranja (*Citrus sinensis*) que interagiram com diferentes PthAs. Entre elas, destacamos uma ciclofilina (CsCyp), que realiza isomerização de resíduos de prolina. Nossa hipótese é a de que PthAs regulam diretamente a transcrição de genes alvo em citros, incluindo CsLOB1 e CsDIOX, por interação direta com a região promotora desses genes, que é modulada pela atividade da proteína CsCyp. Portanto, a elucidação de como PthA ativa a transcrição é de grande importância para o entendimento do seu mecanismo de ação e desenvolvimento das lesões do cancro. A fim de obter plantas transgênicas superexpressando PthA2, PthA3 ou PthA4, plantas selvagens de *Arabidopsis thaliana* ecótipo Columbia (Col-0) e mutantes para os genes homólogos à CsCyp em *Arabidopsis* ROC1 e ROC3 (*roc1* e *roc3*) foram transformadas com *A. tumefaciens* contendo o vetor pBI121 com construção p35S::PthA1, 3 ou 4. Além disso, buscando identificar uma possível complementação funcional entre CsCyp e ROC1 e/ou ROC3, a construção p35s::CsCyp foi inserida em plantas Col-0, *roc1* e *roc3* através do vetor pCAMBIA 1303 a fim de obter plantas transgênicas superexpressando CsCyp com o objetivo de analisar o papel dessas ciclofilinas em *A. thaliana*.

Análise de custos do plantio de cana-de-açúcar com mudas pré-brotadas (MPB) utilizando a Biorrefinaria Virtual de Cana-de-Açúcar

Bolsista: Tobias Mantelato

Universidade: Universidade Estadual de Campinas

Unidade CNPEM: Laboratório Nacional de Tecnologia do Bioetanol - CTBE

Orientadora: Dra. Terezinha de Fátima Cardoso

Práticas agrícolas adequadas são fundamentais para a sustentabilidade da cultura da cana-de-açúcar, resultando em efeitos significativos na produtividade e longevidade dos canaviais e, conseqüentemente, nos custos de produção. O setor busca adaptar as operações agrícolas com sistemas mais viáveis economicamente. O sistema de plantio de cana-de-açúcar com Mudas Pré-Brotadas (MPB), em desenvolvimento, busca melhorar a qualidade das mudas, evitando a necessidade de replantio pela falha na brotação. Este projeto avaliou a viabilidade econômica da tecnologia MPB de plantio de cana-de-açúcar buscando contribuir para complementação do modelo CanaSoft, que compõe a Biorrefinaria Virtual de Cana-de-açúcar (BVC), em desenvolvimento pela Divisão de Avaliação Integrada de Biorrefinarias (AIB). As respostas do modelo CanaSoft, para o plantio com MPB, precisam ser validadas, comparando com dados reais e ajustando o modelo, caso necessário. Os resultados preliminares apontam que o custo da muda MPB é um fator importante no custo total de produção, assim como longevidade, e produtividade do canavial. Considerando aumento de produtividade média de até 10% e aumento de um corte no ciclo de produção, os valores do sistema com MPB não se mostraram favoráveis economicamente, quando comparados ao sistema de plantio convencional, com os parâmetros adotados neste estudo.

Avaliação do efeito da atmosfera e solo marcianos na ecologia de culturas baseadas em colunas de Winogradsky

Bolsista: Rodrigo A. de O. Abans

Universidade: Universidade Estadual de Campinas

Unidade CNPEM: Laboratório Nacional de Luz Síncrotron - LNLS

Orientador: Dr. Douglas Galante

Resumo

Nos últimos anos, presenciou-se várias descobertas intrigantes a respeito de Marte, como a descoberta de água líquida fluindo declive abaixo, que reforçaram ainda mais o interesse de enviar missões robóticas mais avançadas e até a possibilidade de missões tripuladas ao planeta. Nisto, para que se possa tornar factíveis tais empreendimentos, surgem novos desafios como a habitabilidade de Marte, busca por formas de vida e sistemas de suporte de vida para viagens de longa duração e para colonização. Visto essas questões, a coluna de Winogradsky demonstra grande potencial como uma ferramenta para investigar tais problemas. A coluna foi primeiramente desenvolvida por Sergei Winogradsky (apud Quinn et al., 2014) visando estudar a estratificação de uma comunidade bacteriana sujeita a gradientes de concentração de oxigênio, enxofre e intensidade de luz solar. Desde então, a coluna encontrou diversas aplicações práticas diretas e indiretas como, por exemplo, uma ferramenta didática (Rogan, et al., 2005), no estudo da ecologia microbiana e de mudanças ambientais (Rundell et al., 2014). Também, é possível encontrar aplicações na engenharia espacial, em sistemas de reciclagem como MELISSA (Hendrickx et al., 2005). Todavia, muitos desses sistemas dependem da constante supervisão humana e ocupam um enorme espaço para comportar humanos e plantas. Verseux et al. (2016) sugerem o uso de cianobactérias como colonizadoras iniciais capazes de reciclar CO₂ e produzir O₂ e, interagir com outros organismos de forma a desenvolver um sistema de suporte de vida mais abrangente. Partindo dessa ideia, imagina-se que utilizar uma comunidade microbiana como colonizadora inicial, ao invés de um só tipo de bactéria, traga informações muito interessantes em relação à formação de bioassinaturas, à possibilidade de um grau de microterraformação e até ao estudo da reação de uma comunidade inteira ao ambiente marciano. Nisto, o modelo da coluna de Winogradsky se encaixa perfeitamente como uma ferramenta que permite simular condições ambientais, o cultivo de um ambiente microbiológico extraído in natura e a fácil amostragem de qualquer ponto da coluna. Dessa maneira, baseado na Mars Ecopoiesis Test Bed (Todd, 2006), este projeto tem o objetivo de estudar a evolução de uma microbiota estável e autossustentável sob contato com simulantes do solo e/ou atmosfera marcianas dentro de um modelo baseado na coluna de Winogradsky, de modo a observar a formação de bioassinaturas e a modificação do ambiente e dos organismos em si. Para o design da coluna, escolheu-se mantê-la simples e efetiva nos quesitos de amostragem e vedação. Já o microbioma

a ser utilizado, optou-se em usar o ambiente de lagos hipersalinos na região de Araruama-RJ. Pois, espera-se de que as condições de alto pH (8,7) e a alta atividade fotossintetizante desse ambiente, propiciem uma biota inicial capaz de tolerar ou terraformar o ambiente simulado com alta concentração de CO₂ (95%) da atmosfera marciana. Por fim, na escolha do solo, selecionou-se o solo de crateras hidrotermalmente alteradas. Estudos apontam que a atividade hidrotermal causada por impactos pode durar de dezenas a centenas de milhares de anos, a depender do tamanho da cratera (Abramov & Kring, 2005; Abramov & Mojzsis, 2016). Assim, essas regiões manteriam um fluxo de água líquida e/ou vaporizada que propiciaria um ambiente sustentável ao desenvolvimento de termófilos, por exemplo. Yokoyama et al. (2015) estudaram a alteração hidrotermal dos basaltos em uma cratera em Vargeão-SC visando extrapolar no reconhecimento e estudo desses tipos de crateras em Marte, que são muito comuns

Estudo de propriedades estruturais e magnéticas de compostos da série Tb_{1-x}Pr_xNi₂

Bolsista: Francesco Giuseppe Carotti

Universidade: Universidade Estadual de Campinas

Unidade CNPEM: Laboratório Nacional de Luz Síncrotron - LNLS

Orientador: Dr. Alexandre Magnus Gomes Carvalho

Resumo

Este trabalho foi elaborado com a finalidade de investigar as propriedades estruturais e magnéticas de ligas da série Tb_{1-x}Pr_xNi₂ e suas aplicações a refrigeração magnética criogênica. A refrigeração magnética, amplamente utilizada e muito eficiente em temperaturas próximas ao zero absoluto, é baseada no efeito magnetocalórico (EMC). O EMC é uma propriedade intrínseca de todo material magnético e consiste na variação de temperatura do material quando submetido a uma variação de campo magnético. À procura de melhores núcleos aplicáveis a refrigeração magnética criogênica, propriedades estruturais e magnéticas da série Tb_{1-x}Pr_xNi₂ foram estudadas. Nosso trabalho mostra que o comportamento da temperatura de Curie e do parâmetro de rede é linear e, portanto, ligas ricas em praseodímio são mais indicadas para a refrigeração magnética criogênica.

Estudo espectroscópico das diferentes fases elétricas encontradas no diagrama de fase do $\text{La}_2\text{CuO}_{4+\delta}$

Bolsista: Karine Silva Alcântara

Universidade: Universidade Estadual de Campinas

Unidade CNPEM: Laboratório Nacional de Nanotecnologia - LNNANO

Orientador: Dr. Marco Guarise

Resumo

O objetivo deste projeto, durante o período relatado neste trabalho, foi a obtenção de substratos de SrTiO_3 (STO) com superfícies ordenadas em terraços atômicos, uma vez que este é um pré-requisito fundamental para o crescimento de filmes finos de La_2CuO_4 (LCO), e o conseguinte crescimento destes filmes pela técnica de Deposição por Laser Pulsado (Pulsed Laser Deposition - PLD) incluindo dopagem in situ com oxigênio a fim de torná-los supercondutores. Diversos procedimentos desenvolvidos para tratamento de substratos de STO foram analisados, a fim de se obter o que produzisse melhores resultados nas amostras utilizadas. Através do procedimento escolhido, envolvendo wet-etching e annealing, obtivemos um bom resultado com substratos com superfícies formadas por terraços, o que foi confirmado por microscopia de força atômica (Atomic Force Microscopy - AFM). Após a obtenção dos substratos adequados, foram crescidos filmes de LCO com diferentes níveis de dopagem de oxigênio in situ, e eles foram caracterizados quanto às suas superfícies por AFM, quanto às suas estruturas cristalinas por difração de raios-x (X-Ray Diffraction - XRD) e espectroscopia de absorção de raios-x (X-Ray Absorption Spectroscopy XAS), e quanto às suas propriedades de condução em uma câmara de medida de transporte. Através deste processo de caracterização, pudemos concluir que os filmes crescidos são de fato de LCO, indicando que os parâmetros de crescimento estão próximos dos ideais, entre tanto, nenhum filme crescido até o momento apresentou supercondutividade, de forma que um melhor ajuste dos parâmetros de dopagem ainda é necessário.

Integração de ferramentas de Proteômica ao Galaxy

Bolsista: Tamara Martinelli de Campos

Universidade: Universidade Estadual de Campinas

Unidade CNPEM: Laboratório Nacional de Biociências - LNBio

Orientadora: Dra. Adriana Franco Paes Leme

Resumo

Com o avanço técnico e tecnológico nas áreas computacionais e biológicas, o estudo de dados moleculares se tornou mais rápido, barato e eficaz. Com isso, o acúmulo de dados se torna cada vez maior e a necessidade de lidar com todos esses dados também. Por isso, fica evidente a necessidade da criação de fluxos de trabalhos, também conhecidos como pipelines, para agrupar os dados provenientes de experimentos e automatizar tarefas, já que a maioria das ferramentas disponíveis não executam todos os tipos de análises que os profissionais da área requerem. Para a criação desses pipelines, é necessária a integração de ferramentas de análise de dados moleculares, no caso deste projeto, de ferramentas para proteômica, em uma plataforma unificada e acessível. Por esse motivo, utilizamos a plataforma Galaxy-LNBio, que passou a comportar algumas ferramentas básicas de análise de dados proteômicos que até então encontravam-se separadas. Essas ferramentas foram analisadas e para cada uma delas, foi criada uma interface gráfica no Galaxy-LNBio e uma documentação. Com isso, acreditamos que a rapidez e a facilidade de análise estarão do lado do profissional responsável por esses experimentos e que a partir deste ponto, a criação de pipelines se torne possível e de fácil realização.

Crescimento de filmes finos supercondutores de alta temperatura crítica por ablação a laser pulsado

Bolsista: Jonas Pinheiro Amato

Universidade: Universidade Estadual de Campinas

Unidade CNPEM: Laboratório Nacional de Nanotecnologia - LNNANO

Orientador: Dr. Júlio Criginski Cezar

Resumo

No primeiro semestre do presente trabalho, o tempo foi inicialmente dedicado ao aprendizado sobre os tipos de materiais a serem utilizados durante o projeto, com maior ênfase em relação aos ferroelétricos, com isso o estudo de referências e bibliografia além de acompanhar experimentos em andamento de alguns membros do grupo foram essenciais, e em seguida o aprofundamento do funcionamento dos principais equipamentos do projeto, sendo o PLD o mais importante, durante o semestre foram realizados trabalhos conjuntos para a caracterização e análise do laser e seus principais componentes. Como o PLD é relativamente novo no LNLS, foram necessários ajustes prévios como alinhamento do laser, estudos em relação a balança de quartzo, que tem a finalidade de acompanhar a taxa de deposição de material durante o processo, e RHEED (Reflection High-Energy Electron Diffraction) investigando a correlação entre todos os parâmetros possíveis para cada acessório. Outra condição trabalhada foi com alto vácuo necessário para esse tipo de equipamento, a compreensão do funcionamento de todas as bombas é essencial, para poder trabalhar sem danificar o PLD. Já no segundo semestre, o trabalho se voltou para o desenvolvimento de técnicas de crescimento de filmes finos utilizando o PLD, em conjunto a um constante trabalho de aprimoramento do mesmo. Também foram realizados estudos relacionados aos métodos de análise desses filmes finos, em especial o microscópio de força atômica. As análises foram feitas não só apenas em relação aos filmes finos de materiais ferroelétricos como por exemplo o YMnO_3 , mas também em relação ao principal substrato utilizado o SrTiO_3 . Durante o semestre foram feitos alguns estudos sistemáticos para a determinação dos melhores métodos de “limpeza” e preparo desse substrato, para um posterior uso na confecção dos filmes finos.
