



Livro de Resumos do 15º Congresso Interno de Iniciação Científica do Programa PIBIC no CNPEM

Apresentação

É com enorme satisfação que realizamos, no dia 24 de agosto de 2017, o 15º Congresso Interno do Programa Institucional de Bolsas de Iniciação Científica (PIBIC) do Centro Nacional de Pesquisa em Energia e Materiais (CNPEM). Entre agosto de 2016 e julho de 2017, vinte e dois 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 15º 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 15º 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, 24 de Agosto de 2017

Estudo do preparo de nanopartículas de celulose proveniente de bagaço de cana-de-açúcar

Bolsista: Aline Prudente Botelho

Universidade: Universidade Estadual de Campinas

Unidade CNPEM: Laboratório Nacional de Nanotecnologia - LNNano

Orientador: Dra. Juliana da Silva Bernardes

Resumo

Neste trabalho foi estudado o preparo de nanofibras de celulose a partir do bagaço de cana-de-açúcar com objetivo de se utilizar a biomassa como fonte de matéria-prima para obtenção de géis com possíveis aplicações em cosméticos. Tratamentos químicos, como Polpação Organosolv e Branqueamento foram utilizados para isolar a celulose do bagaço, e tratamento mecânico com Ultrassom de Pontas para o processo de nanofibrilação, sendo que neste processo foram variados a concentração da dispersão, o tempo de sonicação e a potência do equipamento para se verificar a influência destas variáveis nas características da dispersão de celulose. A fim de facilitar a nanofibrilação foi realizado a modificação química da superfície da celulose com reações de oxidação e cationização, inserindo grupos iônicos e verificando a relação entre a funcionalização e nanofibrilação. A morfologia e a estrutura química dos nanomateriais foram avaliadas através de análises e os resultados indicam que a adição de grupos iônicos realmente facilita o processo de fibrilação, produzindo nanofibras com diâmetro em torno de 4 nm que formam géis em meio aquoso.

Negros de fumo condutores de biomassa para construção de dispositivos em papel e polímeros de impressão 3D

Bolsista: Ana Cláudia Fingolo

Universidade: Universidade Estadual de Campinas

Unidade CNPEM: Laboratório Nacional de Nanotecnologia - LNNano

Orientadora: Dr. Dr. Mathias Strauss

Resumo

Neste projeto apresentamos a preparação e caracterização de negros de fumo condutores a partir de diferentes biomassas. As biomassas escolhidas, celulose e lignina, foram pirolisadas a 400 °C e moídas por 72 h em moinho de bolas. Foram realizados tratamentos de redução do teor de oxigênio para tornar os materiais condutores. Estes tratamentos, chamados de annealings reativos, consistem no aquecimento das amostras em atmosfera de nitrogênio com vapor de álcool (etanol ou isopropanol). As análises de XPS por varredura e de alta resolução de carbono confirmaram a redução do teor de oxigênio na superfície das amostras após o annealing, sendo que o tratamento mais eficiente foi com isopropanol. Os bionegros de fumo foram utilizados na preparação de tintas condutoras, com acetato de celulose como dispersante, para fabricação de trilhas condutoras em papel pela técnica de screen-printing. Foi possível fabricar trilhas condutoras a partir de alguns materiais, sendo que o melhor desempenho foi obtido com as tintas feitas com o bionegro de fumo de lignina tratado com isopropanol à 800 °C. Testes de resistência e eletroquímicos foram realizados com as trilhas. Foi possível detectar dopamina utilizando eletrodos feitos com estes materiais.

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

Bolsista: Beatriz Sousa Dos Santos

Universidade: ESAMC

Unidade CNPEM: Laboratório Nacional de Biociências - LNBio

Orientador: Dra. Ana Carolina Migliorini Figueira

Resumo

Este projeto tinha como objetivo estudar a formação de complexos entre receptores nucleares, especialmente do TR (receptor de hormônios tireoidianos) com outras biomoléculas, como a proteína GRIP, que atua como coativador da transcrição genica, além de proceder com a caracterização dos mesmos. Para tanto, foram desenvolvidos 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 sequenciamento e ensaios de digestão do vetor no qual estavam inseridos. Após este processo, concluímos que uma intervenção nos clones e vetores de expressão em que os genes estão inseridos era necessária. Além dos estudos citados, este relatório engloba a realização de outros experimentos de caracterização biofísica para avaliar a qualidade das amostras e a estabilidade da estrutura secundária de proteínas e complexos. Também foram realizadas gel filtração analítica (GF) e anisotropia de fluorescência para projetos paralelos do laboratório.

Desenvolvimento de antagonistas do receptor β 2-adrenérgico empregando uma estratégia “soft drug”

Bolsista: Bianca Alves de Oliveira

Universidade: Universidade Estadual de Campinas (UNICAMP)

Unidade CNPEM: Laboratório Nacional de Biociências - LNBio

Orientador: Dra. Marjorie C.P. Bruder Bolsista

Resumo

Receptores β -adrenérgicos são uma classe de receptores de membrana envolvidos em mecanismos de sinalização celular, relacionado a substâncias agonistas, como a adrenalina, ou antagonistas, chamados de beta-bloqueadores. Os receptores estão distribuídos em tecidos de importantes órgãos. Receptores β 1 podem ser encontrados nos rins e no coração, enquanto receptores β 2 estão localizados nos pulmões e na pele. Antagonistas sintéticos são utilizados para tratamento de problemas cardíacos (receptor β 1), enquanto agonistas do receptor β 2 são utilizados para tratamento de asma. Tais substâncias antagonistas são amplamente estudadas atualmente, uma vez que estes podem estar ligados ao combate ao câncer (inibição de metástase) e o tratamentos de alergias e inflamações na pele. A partir da compreensão sobre a molécula de ICI-118,551, antagonista seletivo do receptor β 2, pode-se entender como ocorre essa seletividade. Assim sendo, propõe-se a síntese e caracterização de compostos que serão avaliados em ensaios biológicos, permitindo a identificação de características estruturais determinantes na seletividade para o receptor β 2. Além disso, foram preparados outros compostos denominados soft drugs, estudados para aplicações em tratamento no câncer e cicatrização da pele.

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

Orientador: 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) EpxF – envolvida na biossíntese do farmacóforo epoxicetona no produto natural inibidor do proteassomo epoxomicina. A expressão, purificação, cristalização e coleta de dados de AnsB, Cpz8 e proteassomo $\alpha\beta$ foram reportados detalhadamente em relatórios anteriores. Mais recentemente foram também reportados os dados de cristalização e resolução estrutural da Cpz8, bem como as análises da atividade catalítica e estudos de estabilidade térmica desta enzima. Neste último semestre de iniciação científica, foram realizados ensaios complementares para averiguar a interação da Cpz8 com seu cofator PAP(S) e o substrato acceptor de sulfato preA. Estes estudos foram baseados em ensaios de fluorescência intrínseca do triptofano na presença ou ausência destes ligantes. Contudo, os dados gerados pelas análises estruturais da Cpz8 por cristalografia de proteínas e estudos biofísicos em solução nos permitiu realizar uma análise mais aprofundada, quanto a sua estrutura, catálise e evolução desta família de enzimas. Nos últimos meses, trabalhou-se também na expressão, purificação e clivagem da enzima EpxF visando sua cristalização.

Identificação de novos inibidores de PBPs, agentes antimicrobianos em potencial.

Bolsista: Caique Camargo Malospírito

Universidade: Universidade Estadual de Campinas

Unidade CNPEM: Laboratório Nacional de Biociências - LNBio

Orientadora: Dra. Andréa Dessen

Resumo

A parede celular bacteriana é formada principalmente por uma estrutura conhecida como peptidoglicano, responsável pela manutenção da forma bacteriana e proteção contra estresse osmótico. O peptidoglicano constitui uma rede tridimensional composta por heterodímeros de ácido NAcetilGlicosamina (NAG) e N-AcetilMurâmico (NAM) conectados através de ligações cruzadas entre cadeias peptídicas associados ao NAM. Os passos finais da associação do peptidoglicano são catalisados no espaço periplasmático pelas Penicillin-Binding Proteins (PBP) que reconhecem as sequências finais da cadeia peptídica e catalisam uma reação de transpeptidação com as cadeias adjacentes conferindo, desse modo, rigidez à estrutura. Os antibióticos beta-lactâmicos são a principal classe de moléculas inibidoras das PBPs, pois se ligam covalentemente ao sítio ativo da molécula causando a perda da sua função e por consequência a desestabilização do peptidoglicano. Com o aumento das linhagens resistentes aos betalactâmicos, à busca por novas moléculas com potencial inibitório são de extrema importância. Nesse estudo mostramos possíveis inibidores para a PBP2x do patógeno humano *Streptococcus pneumoniae*. Durante o screening foram utilizadas bibliotecas formatadas no Laboratório Nacional de Biociências – LNBio contendo frações de extratos de produtos naturais das quais 1920 frações testadas 21 mostraram dose dependente resposta. Diante o surgimento de novas linhagens resistentes a diferentes antibióticos nossos estudos mostram a importância da busca novas moléculas que podem atuar como inibidores de PBP impedindo crescimento bacteriano, sendo necessário estudos futuros para melhor caracterização e otimização das moléculas.

Projeto: Materiais i-calóricos e efeito torsiocalórico

Bolsista: Francesco Giuseppe Carotti

Universidade: Universidade Estadual de Campinas – Unicamp

Unidade CNPEM: Laboratório Nacional de Luz Síncrotron - LNLS

Orientador: Dr. Alexandre Magnus Gomes Carvalho

Resumo

Em busca de investigar as consequências que sucessivas variações de temperatura e pressão causam em polímeros comerciais, coletamos espectros de infravermelho de amostras de NBR, PDMS, borracha natural e silicone. Então, concluímos que NBR e silicone não sofrem alterações estruturais enquanto a borracha natural e o PDMS sofrem mudanças em suas cadeias.

Com a finalidade de complementar o estudo dos efeitos calóricos em polímeros e abrir uma nova linha de pesquisa nesta área, elaboramos um sistema simples e eficiente para a medidas do efeito torsiocalórico em polímeros.

Síntese de nanopartículas fluorescentes de sílica para aplicação em células tumorais

Bolsista: Gabrieli de Cinque Sakamoto

Universidade: Universidade Estadual de Campinas

Unidade CNPEM: Laboratório Nacional de Nanotecnologia - LNNano

Orientador: Dr. Mateus Borba Cardoso

Resumo

Nanopartículas de sílica estão entre os nanomateriais mais estudados devido ao baixo custo associado com a possibilidade da síntese de diversos tamanhos e com uma superfície passível de sofrer modificações que alterem sua reatividade, além de serem biocompatíveis e não apresentarem toxicidade a células humanas. Diante disso, nanopartículas fluorescentes de sílica fluorescentes com diâmetro de 283, 186, 129 e 76 nm foram sintetizadas e caracterizadas através do Espalhamento de Luz Dinâmico e Microscopia Eletrônica de Varredura (MEV). Estudo de termogravimetria permitiram verificar a perda de massa orgânica pela inserção do composto fluorescente com valores obtidos se encontram próximos a 4% que é característico do material empregado (sílica), fazendo necessária a utilização de outras técnicas como análise elementar para um melhor estudo da presença do fluorófilo. Enquanto que a carga superficial por potencial zeta variou entre -63,7 e -48,9 mV e o esperado para sílica seja entre -50 e -35 mV em pH neutro, sendo o possível motivo desse desvio a superfície não ser composta apenas de sílica, contendo composto fluorescente, bem como a variação no diâmetro das mesmas. Além disso, ligações de maior relevância, que se formaram ou se romperam, como Si-O-Si, Si-OH, Si-C, N-H, O-H, C-N e N=C=S foram analisadas por espectroscopia no infravermelho com transformada de Fourier e os melhores comprimentos de onda para absorção (488 nm) e excitação (529 nm) por espectroscopia de fluorescência no UV-Vis. Além disso, iniciaram-se os testes de funcionalização da superfície com zwitteriônico que causa alteração na carga superficial e APTMS para a inserção de grupos NH₂ para acoplamento com ácido fólico, que é um receptor específico para células tumorais, onde serão focados os testes *in vitro* (com organon-a-chip) e *in vivo* deste projeto.

Análises 3D de microtomografia de biomassa de cana-de-açúcar

Bolsista: Giancarlo Maricato Di Bella

Universidade: Pontifícia Universidade Católica de Campinas

Unidade CNPEM: Laboratório Nacional de Tecnologia do Bioetanol - CTBE

Orientador: Dr. Carlos Eduardo Driemeier

Resumo

A biomassa lignocelulósica de cana-de-açúcar é de extrema importância para a substituição das fontes fósseis de carbono, uma vez que é matéria-prima abundante e renovável. Há a necessidade de melhor entender a estrutura interna deste material, sendo possível utilizar a técnica não-invasiva de microtomografia síncrotron de raiosX para a obtenção de imagens tridimensionais (3D) que permitem a observação de estruturas celulares micrométricas. As imagens de microtomografia foram adquiridas na linha de luz IMX do Laboratório Nacional de Luz Síncrotron, gerando grande volume de dados. O presente documento apresentará um trabalho realizado para demonstrar e verificar a viabilidade da utilização de técnicas de Aprendizado de Máquina Não-Supervisionado para o agrupamento e classificação automática de células de bagaço de cana-de-açúcar, em imagens de microtomografia de raios-X. O algoritmo de Aprendizado de Máquina utilizado foi o algoritmo não-supervisionado de agrupamento K-Means, e que foi utilizado para encontrar três agrupamentos distintos, correspondentes aos tipos de célula: parênquima, cantos de células de parênquima, e células de feixe vascular. Foram utilizadas técnicas de processamento de imagens para suavizar bordas e limites, e remoção de ruído, para que fosse possível realizar segmentação das células e extração de dados morfológicos das mesmas. Os resultados obtidos nesta análise exploratória fornecem informações que deverão ser utilizadas para o desenvolvimento de futuras técnicas de modelagem de processos, que auxiliarão na geração de produtos como o etanol de segunda geração.

Estudo do aproveitamento de resíduos de biomassa de bagaço de cana-de-açúcar na produção de (nano)compósitos poliméricos

Bolsista: Guilherme Neves Trindade

Universidade: Universidade Estadual de Campinas - UNICAMP

Unidade CNPEM: Laboratório nacional de Luz Síncrotron – LNLS

Orientador: Dra. Rubia Figueredo Gouveia

Resumo

Devido a busca pela obtenção de compósitos poliméricos reforçados com fibras de celulose obtidas a partir do bagaço, assim como suas diversas aplicações nos setores industriais, as pesquisas deste ramo da ciência tem sido crescente, devido a inúmeras vantagens apresentadas por este tipo de reforço, como o ganho de propriedades mecânicas relacionadas ao módulo de elasticidade, tensão na ruptura e força máxima do compósito, devido a cristalinidade das fibras e maior interação entre as fibras e a matriz polimérica. Sendo assim, o objetivo deste trabalho foi estudar formas de processamento deste compósito, e como a adição de fibras pode influenciar nas propriedades mecânicas do material final e por fim como melhorar a interação das fibras hidrofílicas com o PE de baixa densidade hidrofóbico. Na primeira etapa do projeto foram realizados o refino das fibras de celulose para retirada de impurezas e melhorar a sua compatibilidade com o PE de baixa densidade. Para determinar a melhor condição de fibras na matriz foram feitos dois tipos de processamento utilizando os métodos de homogeneização e homogeneização combinada com método de injeção. No primeiro método avaliou-se a influência do tempo de mistura na preparação do compósito, sendo que a degradação das fibras é um fator limitante no processo. Resultados satisfatórios foram encontrados para tempo de processamento de 2 minutos, enquanto que em 10 minutos já se observa a degradação das fibras para produção dos compósitos. Já para o segundo método avaliou-se a influência da concentração de fibras na matriz polimérica, visando melhoria das propriedades mecânicas do compósito, na qual variou-se até 30% de concentração de fibras. Além disso, pode-se estudar a influência de agente químico hexametildisilazano (HMDS) na modificação da superfície das fibras, a fim de avaliar a compatibilidade entre o polímero e as fibras de celulose, podendo assim observar melhorias nas propriedades mecânicas do compósito. A introdução desse agente químico deixa as fibras mais hidrofóbicas, melhorando a interação entre a matriz polimérica e as fibras. Neste trabalho foram avaliadas duas condições diferentes de modificação química com HMDS, ambas apresentaram melhorias nas propriedades mecânicas finais do compósito. Assim, conclui-se que ao adicionar fibras de celulose no PE de baixa densidade, este apresentou melhorias em suas propriedades mecânicas, principalmente com o uso de HMDS. Os melhores resultados foram obtidos para o compósito com 20% de teor de fibras usando a segunda modificação por hexametildisilazano (HMDS), onde ocorreu por 24h a 80°C, apresentando um aumento no módulo de Young de mais de 350%, quando comparado ao polímero puro.

Síntese de nanopartículas luminescentes para uso em bioimagem

Bolsista: Ísis Frigeri Manali

Universidade: Universidade Estadual de Campinas - UNICAMP

Unidade CNPEM: Laboratório nacional de Luz Síncrotron – LNLS

Orientador: Dra. Verônica de Carvalho Teixeira

Resumo

Nanopartículas luminescentes que apresentam persistência são de grande interesse ao desenvolvimento de métodos para bioimagens, com a finalidade de observação de um tecido específico. Neste trabalho, partículas luminescentes de Y_2O_3 dopadas com Eu e/ou Ti foram sintetizadas através da rota sol-gel, assistida por água em atmosfera estática (Água) e por água de coco, em atmosfera estática (ACP), atmosfera redutora (Atm Red) e via micro-ondas (MW). Pela rota sol-gel via ACP, amostras de Y_2O_3 dopadas com Eu e/ou Ti e/ou Ca também foram sintetizadas. A fase cristalina única foi obtida em todas as preparações e confirmada através da difração de raios X. A morfologia e o tamanho das partículas das amostras dopadas com Eu e/ou Ti, sintetizadas em ACP, Atm Red e Água foram estudados através da microscopia eletrônica de varredura (MEV), nas quais foi possível observar que as amostras preparadas através do sol-gel assistido por água de coco apresentam partículas regulares e uniformes, enquanto aquelas obtidas através do sol-gel assistido por água apresentam formatos irregulares. Essas mesmas amostras foram avaliadas por microscopia eletrônica de transmissão (TEM) e apresentaram alto grau de cristalinidade, e algumas famílias de planos cristalográficos Y_2O_3 foram identificadas. A valência do Ti foi investigada através da espectroscopia de absorção de raios X (XANES), a qual evidenciou uma mistura de valências entre Ti^{3+} e Ti^{IV} . O Ti^{IV} foi o estado de oxidação mais abundante, principalmente no Y_2O_3 dopado com EuTi. Isso ocorre devido à afinidade de Y_2O_3 que é um óxido (base dura) com Ti^{IV} , um ácido duro. O comportamento óptico do óxido de ítrio dopado foi investigado através da luminescência óptica excitada por raios-X (XEOL), fotoluminescência (PL) no UV-Vis no ultravioleta de vácuo (VUV). Foi possível observar que o Eu^{3+} é o principal centro emissor nas amostras dopadas com Eu e/ou EuTi, tendo a transição $5D_0 \rightarrow 7F_2$, com máximo 612 nm, como mais intensa. As amostras dopadas com Ti e TiCa exibiram uma banda larga com um máximo de cerca de 520 nm. Essa transição pode corresponder à emissão de característica Ti^{3+} , mas, como em ambos os casos, existe uma grande quantidade de Ti^{IV} , que não possui atividade óptica, pode ser que haja uma transição de transferência de carga de metal $O_2^- - Ti^{IV} \rightarrow O^- - Ti^{3+}$. No sistema Y_2O_3 dopado com EuTi, observou-se a excitação de Ti^{3+} e/ou Ti^{IV} , mas a emissão do Ti^{3+} não estava presente, indicando um processo de transferência de energia de Ti através da transferência de carga (CTB) para o Eu^{3+} na matriz de óxido de ítrio. Os resultados apresentados neste trabalho, sugerem que o tamanho de partículas em ordem

nanométrica e a emissão em 612 nm, na região do vermelho, compatível com a janela de transparência óptica de tecidos biológicos (600 – 900 nm), são resultados que inserem esses materiais como candidatos a aplicações biológicas, a exemplo, marcadores para técnicas de bioimagens. Além disso, do ponto de vista de ciência básica, são apresentados resultados que sugerem um mecanismo de transferência de energia entre o Ti^{3+} e o Eu^{3+} na matriz de Y_2O_3 , ainda não descrito, auxiliando no desenvolvimento de novos materiais eficientes.

Geração de camundongo nocaute condicional para o receptor nuclear órfão COUP-TFII por CRISPR

Bolsista: Jaqueline de Lima Munhoz

Universidade: Universidade Estadual de Campinas (UNICAMP)

Unidade do CNPEM: Laboratório nacional de Biociências – LNBio

Orientador: Dr. José Xavier-Neto

Co-orientador: Dra. Ângela Saito

Resumo

O sistema CRISPR/Cas9 tem sido amplamente utilizado como uma eficiente alternativa para a geração de modificações específicas no genoma. Esta tecnologia baseia-se no uso de um pequeno RNA capaz de parear no locus de interesse do genoma e direcionar a endonuclease Cas9 para modificação do DNA. Nosso objetivo é utilizar o sistema CRISPR/Cas9 para gerar uma linhagem de camundongos nocaute condicional para o gene *Nr2f2*, o qual codifica o receptor nuclear órfão COUP-TFII, crucial para o desenvolvimento cardíaco e vascular. Ensaios realizados por nosso grupo apontaram para o COUP-TFII como um candidato consistente para a modulação da expressão atrial-específica do gene *slow myosin heavy chain 3 (SMYHC3)*, um transgene indicador do programa de diferenciação atrial em camundongos. Ao longo de todo o Projeto, definimos a estratégia para a deleção condicional do COUP-TFII em camundongos, clonamos a sequência dos RNAs guias (sgRNAs) nos vetores do sistema CRISPR/Cas9, os testamos em cultura de células murinas juntamente com o posterior ensaio in vitro da T7 Endonuclease I e fizemos as transcrições in vitro dos sgRNAs e do mRNA da Cas9. Os primeiros animais oriundos da microinjeção em pró-núcleo em embrião de camundongo dos sgRNAs, mRNA da Cas9 e oligos doadores foram gerados e genotipados. Como esperado, detectamos em um dos animais a inserção de uma sequência LoxP na região a jusante ao exon 3 do gene *Nr2f2*. Entretanto, também tivemos uma recombinação homóloga de uma parte da sequência do oligo doador a montante ao exon 1 neste mesmo locus da região a jusante ao exon 3. Novos sgRNAs para a região a montante ao exon 1 foram desenhados e testados em células e serão utilizados nas próximas microinjeções. O novo oligo doador da região do exon 1 deverá conter menos regiões de homologia com o oligo doador da região do exon 3 de forma a reduzir as chances de recombinação homóloga entre as duas sequências de LoxP que devem ser inseridas.

Algoritmos em Tomografia por Fluorescência

Bolsista: Juliana Leandro Kotsevitis

Universidade: Pontifícia Universidade Católica de Campinas

Unidade CNPEM: Laboratório nacional de Luz Síncrotron – LNLS

Orientador: Dr. Eduardo X. Miqueles

Resumo

The Radon Transform and its generalizations are the main mathematical tools of the medical tomography inverse problems. The transmission tomography is directly associated with the classical Radon Transform, while the emission tomography is directly associated with its generalizations. In transmission tomography (ct), the rays pass through the object, thus being attenuated and detected in the classical way. In emission tomography, the sample emits photons inside the object. These photons go through different paths, where there is an attenuation. The two main types of emission tomography are called spect and pet. Figure 1 shows the geometry of the setup for xfct emission tomography (x-rays fluorescence tomography), which can be measured at a synchrotron facility and is the main focus of this project. The X-ray fluorescence computed tomography(xfct), defined in [8, 6], is a combination of transmission and spect emission tomography techniques, but usually acting over an object with small proportions. In xfct, the beams are monochromatic and have low energy; therefore, when the rays pass through the object, every point of it emits a fluorescence x-ray with low energy. Because of it, new rays are generated from the same point, passing over the object once more, but this time using a different path. With the measurements of these new rays of every point, we have the measurement of the fluorescence. Using these measures to find the fluorescence density in every point of the object is the aim of xfct technique. It allows us to analyze a specific chemical element that excites to a determined energy and, because of that, emits fluorescence inside the object being observed. An example of the application of this technique would be the diagnosis of cancer in samples being analyzed. This project aims to implement and develop algorithms to this technique simultaneous to the acquisition by transmission images.

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 Luz Síncrotron – LNLS

Orientador: Dr. Pedro Schio

Resumo

Este relatório versa sobre estudos do tratamento de superfícies de SrTiO_3 , material utilizado como substratos para crescimento de filmes finos na linha PGM do LNLS. Este estudo é crucial para o crescimento dos filmes finos, uma vez que a estrutura e propriedades dos filmes são diretamente afetadas pelas condições superficiais dos substratos utilizados. Foram analisadas diversas condições para o tratamento da superfície dos substratos de SrTiO_3 . O tratamento empregado é constituído basicamente por uma etapa de wet-etch em ácido seguida de aquecimento do substrato (annealing). Utilizando microscopia de força atômica (atomic force microscopy - AFM) e espectroscopia de fotoelétrons excitados por raios-x (x-ray photoelectron spectroscopy - XPS) caracterizamos, respectivamente, a morfologia e a estequiometria superficial dos substratos tratados. Desta forma, conseguimos obter relações entre as condições de tratamento utilizadas e as características superficiais dos substratos após o processo. Observamos que um dos fatores que mais insere incerteza nos resultados do tratamento dos substratos é o ângulo de corte da sua superfície. Portanto, estamos em processo de medir este ângulo por difração de raios-x (x-ray diffraction - XRD), a fim de adequar o tratamento desenvolvido para cada substrato de acordo com seu ângulo de corte.

Estudos de proteínas recombinantes aplicadas na otimização de um coquetel enzimático termofílico para hidrólise de biomassas vegetais

Bolçsista: Maísa Lopes Apolinário

Universidade: Pontifícia Universidade Católica de Campinas

Unidade CNPEM: Laboratório Nacional de Ciência e Tecnologia do Bioetanol (CTBE)

Orientador: Dr. Roberto Ruller

Resumo

Frente ao declínio das reservas de petróleo e aos problemas ambientais inerentes ao uso extensivo dos combustíveis fósseis, além de impasses político econômicos relacionados com o controle desse recurso, pesquisadores ao redor do mundo tem se aplicado na busca por alternativas que proporcionem segurança energética e sustentabilidade. Estudos tem mostrado otimismo quanto ao progresso no rendimento da conversão de bagaço de cana-de-açúcar em etanol, além de apontar a possibilidade de obter novos produtos de alto valor agregado através da utilização eficiente dos resíduos da indústria do etanol, sobretudo no Brasil, onde são produzidos em grande quantidade. Embora resíduos agrícolas possam ser convertidos em combustível, existem etapas do processo que tornam economicamente inviável a comercialização do produto de modo a atender a demanda por combustível, atestando assim a necessidade de pesquisas que visem aprimorar o processo. Uma das etapas que se encontra na condição acima descrita é a hidrólise enzimática, dado o valor elevado das enzimas utilizadas que, segundo estimativas, consistem em cerca de metade do custo do processo de hidrólise total. Neste sentido, o secretoma de fungos termófilos desempenha um papel importante na hidrólise de açúcares complexos como lignina e celulose, portanto representam uma possibilidade a ser explorada para a conversão de biomassa lignocelulósica em biocombustível por hidrólise enzimática. Resultados demonstram que enzimas de fungos termófilos podem melhorar a hidrólise enzimática de biomassa através da criação e suplementação de coquetéis, trazendo vantagens como termotolerância e tolerância aos líquidos iônicos, o que constitui uma possibilidade de aprimorar o processo de hidrólise, o tornando menos oneroso. Focando-se em otimizar a etapa de hidrólise enzimática, o projeto objetiva prospectar novos fungos termofílicos produtores de coquetel enzimáticos mais eficientes, que serão misturados a um coquetel básico denominado (TA.V01) produzido pelo fungo *Thermoascus aurantiacus* e serão submetidos a testes de suplementação com enzimas recombinantes produzidas (β -glicosidasases, celulasas e endo-xilanasases) desenvolvidos no CTBE. Tendo em conta a necessidade de otimização da etapa de hidrólise enzimática, o projeto visa contribuir para tornar etapa de hidrólise mais eficiente através da bioprospecção de novos fungos produtores de enzimas termofílicas para o desenvolvimento de coquetéis enzimáticos.

Descoberta e desenvolvimento de inibidores da enzima oxidase alternativa (AOX) de *Moniliophthora perniciosa*

Bolsista: Maria Luiza Laurindo Vieira

Universidade: Universidade Estadual de Campinas

Unidade CNPEM: Laboratório Nacional de Biociências - LNBio

Orientador: Dra Silvana A. Rocco

Resumo

O cacau (Theobroma cacao) é muito atingido pela doença vassou-de-bruxa, causada pelo fungo patógeno *Moniliophthora perniciosa*. A doença traz grandes prejuízos para as plantações de cacau, configurando um dos maiores problemas fitopatológicos do Brasil. O fungo citado tem um complexo ciclo de vida hemibiotrófico, com de duas fases, a primeira causa hipertrofia das áreas infectadas; e a segunda fase causa a necrose, gerando cogumelos e fechando o ciclo de esporulação. Todo esse ciclo sugere que a interação planta-patógeno envolve uma série de moléculas para que a doença consiga se estabelecer com sucesso na maior parte dos hospedeiros. Para o combate da doença tem sido estudada a inibição da enzima Oxidase Alternativa (AOX) e os resultados tem sido promissores. A AOX é uma enzima transmembrana, parte da cadeia respiratória do fungo. Sua função é permitir que a respiração do fungo continue mesmo com a via principal bloqueada (ação de antifúngicos tradicionais). Com base nesse cenário, o objetivo dessa pesquisa é projetar e sintetizar moléculas derivadas das N-fenilbenzamidas, que já mostraram significativa atividade inibitória na enzima em testes preliminares, para bloquear a rota alternativa de respiração do fungo. Essa tem se mostrado uma forma promissora de combater a doença Vassoura-de-bruxa. Para a obtenção dessas moléculas foram utilizadas rotas sintéticas baseadas nas reações de Schöttem-Baumann, ajustados para melhorar a pureza e rendimento das moléculas, estabelecendo a melhor rota para a obtenção das N-fenilbenzamidas. Até o presente momento a biblioteca conta com 103 moléculas sintetizadas, 75 do período anterior e mais 28 novas, além das 22 para reposição do estoque. Com rendimento médio de 60% e alta taxa de pureza. A caracterização das moléculas foi feita através de análises de RMN que comprovaram a identidade dos compostos e por HPLC que forneceu a taxa de pureza. Para os testes de atividade de inibição da AOX, a levedura *Pichia pastoris* se mostrou um bom modelo de avaliação. Assim mostrou-se que alguns compostos tem atividade contra a enzima, sendo que um deles, 7J-41, se mostrou com alta atividade e possivelmente menor toxicidade para a planta. O combate dessa doença é de grande importância no cenário da agricultura brasileira, pois esse fungo causa prejuízos de milhões de reais anualmente, causando impacto significativo na economia.

Avaliação da Agricultura de Precisão no Brasil e no Mundo

Bolsista: Maria Thereza Nonato de Paula

Universidade: Universidade Estadual de Campinas

Unidade CNPEM: Laboratório Nacional de Ciência e Tecnologia do Bioetanol (CTBE)

Orientador: Dr. Henrique C. Junqueira Franco

Co-orientador: Dr. Paulo Sérgio Graziano Magalhães

Resumo

As tecnologias e ferramentas que envolvem a Agricultura de Precisão (AP) são inúmeras e estão em constante evolução. Atualmente a aproximação do campo com tais tecnologias buscam avanços rápidos, acessíveis e que apresentem resultados para a produção. O cenário voltado para a agricultura de precisão está em alta no Brasil e no mundo, buscando o tratamento detalhado e direcionado das lavouras. Apesar dos constantes avanços, a adoção das tecnologias ainda é baixa nas lavouras brasileiras, especialmente na cultura de cana-de-açúcar. Para auxiliar a adoção da AP no Brasil, especificamente em cana-de-açúcar, o núcleo de Agricultura de Precisão do Laboratório Nacional de Ciência e Tecnologia do Bioetanol (CTBE/CNPEM) tem como objetivo aplicar e desenvolver ferramentas que permitem extrair conhecimento da variabilidade espacial das lavouras, visando aumentar a lucratividade da produção. Diante deste cenário, o objetivo do presente trabalho foi investigar o desenvolvimento técnico-científico dos últimos 5 anos da agricultura de precisão no Brasil e no mundo. Investigou-se os principais países, culturas e tecnologias estudadas. Por meio de uma extensa revisão bibliográfica mais de 200 artigos científicos foram avaliados. Os resultados mostram que a Agricultura de Precisão vem ganhando espaço reconhecido no mundo agrícola. Apesar do Brasil se colocar como quarto colocado em publicações científica a nível mundial na temática de agricultura de precisão, é necessário investir mais recursos e pesquisas voltadas para a cultura de cana-de-açúcar, que ocupa apenas a 14ª colocada no ranking mundial de pesquisas em AP.

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

Orientador: Dra Juliana Helena Costa Smetana

Resumo

Vias de sinalização celular são essenciais para a coordenação de diversos processos celulares, como crescimento e proliferação. A via de sinalização mediada pelo complexo mTORC1 está relacionada a diversos tipos de doenças como câncer e diabetes. Estudos indicam que aminoácidos são essenciais para a translocação do mTORC1 para a membrana dos lisossomos, onde residem as Rag GTPases, que o deslocarão 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/B/C/D, que se organizam em heterodímeros, 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 a partir da interação de 5 proteínas, o heterodímero MP1/p14 e o heterodímero c7orf59/HBXIP, que por sua vez interage com a proteína p18. Esta etapa deste trabalho teve como objetivo produzir a forma completa da proteína RagBs (RagBs full), com fusão da cauda de histidina (His-tag), para verificar a influência da região além do domínio GTPásico na interação com os heterodímeros MP1/p14 e c7orf59/HBXIP. Também objetivou-se a construção com cauda de GST fundida a cada uma das proteínas RagBs core e RagBs full, de modo a possibilitar outros tipos de análise de interação, como por exemplo pulldown, entre esta proteína e as subunidades do complexo Ragulator. Os clones para produção de GST-RagBs core e GST-RagBs full foram construídos, e expressam suas respectivas proteínas. A proteína His-RagBs full também teve seus protocolos de expressão e purificação padronizados, porém, essa proteína não interagiu com os heterodímeros do complexo Ragulator nas condições dos experimentos realizados. Considerando que em condições fisiológicas a proteína RagB forma dímeros com as proteínas RagC e/ou RagD, levanta-se a possibilidade que apenas a proteína RagB não seja suficiente para interagir com as subunidades do Ragulator, abrindo assim novas possibilidades de experimentos, além dos experimentos de pulldown entre as construções de RagBs e os heterodímeros do complexo.

Aplicação de processos químicos para a purificação e biofuncionalização de nanotubos de carbono

Bolsista: Marina Bachion Mastrelli

Universidade: Universidade Estadual de Campinas

Unidade CNPEM: Laboratório Nacional de Nanotecnologia - LNNano

Orientador: Dr. Diego Stéfani Teodoro Martinez

Resumo

Os nanotubos de carbono (CNTs) têm se mostrado um material promissor para aplicações na área biomédica. Contudo, para esta finalidade, são requeridas a preparação de dispersões estáveis destes materiais em meio aquoso. Além disso, sabe-se que os CNT de comprimento < 300 nm são capazes de penetrar nas células. Entretanto, os CNT brutos (após síntese) apresentam comprimento na escala de μm , além de possuírem propriedades hidrofóbicas e, portanto, não formam dispersões estáveis em água. Dessa forma, o objetivo deste projeto foi avaliar processos químicos (oxidação com HNO_3 e H_2SO_4) e mecanoquímicos (moagem em estado sólido) para a purificação e funcionalização de nanotubos de carbono de paredes múltiplas (MWCNT), visando futuras aplicações biomédicas e estudos toxicológicos. As amostras de MWCNT obtidas pelo processo de moagem seguida de oxidação foram caracterizadas através das seguintes técnicas: curva de centrifugação e espectroscopia UV-vis, análise termogravimétrica (TGA), microscopia eletrônica de transmissão (TEM), microscopia eletrônica de varredura (MEV), espectroscopia de fotoelétrons excitados por raios-X (XPS) e espalhamento de luz dinâmico (DLS). Já para as amostras obtidas pelo processo mecanoquímico, foi avaliada sua estabilidade em meio aquoso por espectroscopia UV-vis. Os principais resultados obtidos foram: (i) o processo de moagem pré-oxidação não modificou as propriedades dos nanotubos e não afetou sua oxidação; (ii) as reações de oxidação com HNO_3 e H_2SO_4 foram as mais efetivas em reduzir o comprimento dos nanotubos, além de terem sido obtidas amostras com alto grau de oxidação e pureza; e (iii) o processo mecanoquímico na presença do polímero comercial F-127 biocompatível foi eficiente na geração de dispersões estáveis de MWCNT em meio aquoso (tampão PBS, pH 7.4), além de ser um processo mais limpo e sustentável.

Síntese de materiais mesoporosos para aplicações em obtenção de Hidrogênio

Bolsista: Matheus da Silva Barbosa

Universidade: Universidade Estadual de Campinas

Unidade CNPEM: Laboratório Nacional de Luz Síncrotron - LNLS

Orientador: Dr. Santiago J. A. Figueroa

Resumo

A queima de combustíveis fósseis em termoelétricas é responsável pela maior parte da emissão de gases associados ao efeito estufa atualmente. Frente a este cenário, o hidrogênio tem se mostrado uma das fontes de energia mais promissora devido ao seu elevado poder calorífico e baixa, ou até por vezes nula, emissão de poluentes. Por sua vez a decomposição catalítica do metano mostra-se como uma alternativa aos processos tradicionais de produção de hidrogênio puro, também por não emitir qualquer poluente COX. Os sólidos mesoporoso são muito aplicados em processos catalíticos, uma vez que possuem propriedades específicas que tendem a melhorar o rendimento da catalise como a facilitação do transporte de massa em sua estrutura são relativamente fáceis de sintetizar e apresentam grande estabilidade. O suporte mesoporoso CMK-3 usa como molde a estrutura da SBA-15, a família de estruturas mesoporosas conhecida como SBA (Santa Barbara Amorphous) é caracterizada por possuir ligações de proporções nanométricas entre seus mesocanais, a SBA-15 possui estrutura hexagonal formada por meio de um mecanismo de crescimento cooperativo onde a micela de surfactante plurônico vai se agregando, passando de micelas esféricas para cilíndricas e depois agregados hexagonais nos quais as moléculas de TEOS se difundem até a interface onde são polimerizados. Quando carbono é introduzido na SBA-15 através da sacarose ele preenche todos os meso e microporos e quando remove-se o suporte a CMK-3 é obtida, uma estrutura hexagonal constituída de tubos com aproximadamente 4 a 14 nm interligados por meio de nanofibras formadas pelo preenchimento dos nanoporos da SBA-15. Usando as instalações do CNPEM espera-se sintetizar amostras de SBA-15 que devem ser usadas como molde para obtenção da CMK-3, impregnação da CMK com nanopartículas de ouro e níquel e caracterização das amostras produzidas. Estudar as características texturais e as propriedades catalíticas da CMK-3 impregnada através de experimentos realizados nas linhas de luz do Laboratório Nacional de Luz Síncrotron (LNLS).

Caracterização molecular de amostras de osteossarcomas.

Bolsista: Matheus Domingos Terrazam

Universidade: Universidade Estadual de Campinas – UNICAMP

Unidade CNPEM: Laboratório Nacional de Biociências - LNBio

Orientador: Dra. Mariana Maschietto

Resumo

O osteossarcoma é um câncer ósseo primário raro, caracterizado por promover intensa destruição óssea e de tecidos moles locais. Apresenta maior incidência e adolescentes, representando de 10 a 15% dos tumores extracraniais nessa faixa etária. Aproximadamente 80% dos casos desenvolvem metástases e o tratamento é composto de cirurgia, quimioterapia sistêmica e também há a possibilidade de se utilizar radioterapia. Estudos sugerem uma alta taxa de variação estrutural em OS, com uma instabilidade genômica frequente e aparentemente ligada ao desenvolvimento da doença. Além disso, resultados preliminares do metiloma de amostras de OSs apontam para alterações de metilação específicas nessa patologia, comparadas ao osso normal, levantando a hipótese de que existe uma expressão alterada das enzimas associadas com o processo de metilação. O presente estudo prestou-se a avaliar a expressão relativa (usando a expressão de GAPDH como referência) de metilases (DNMT1, DNMT3a e DNMT3b) e desmetilases (TET1, TET2 e TET3) em amostras de OS em relação a características clínico patológica ds pacientes. Os resultados obtidos apontam para uma menor expressão de DNMT3a e TET1 ($p = 0,047$ e $0,021$ e $FC = -1,8$ e $-1,8$ respectivamente) em amostras de tumores localizados no fêmur frente a amostras de tumores de outras localizações. DNMT1 e DNMT3b apresentaram uma expressão aumentada em tumores osteoblásticos ($p=0,006$ e $0,044$ e $FC = 2,59$ e $3,30$ respectivamente) comparados a outros tipos histológicos. TET2 apresentou expressão diminuída em amostras de pacientes que apresentaram metástases e também dos que foram a óbito ($p=0,004$ e $0,0003$ e $FC = -2,9$ e $-3,2$ respectivamente). Não houveram diferenças quando comparadas as expressões nos diferentes graus de desenvolvimento tumoral. Adicionalmente, foram realizadas análises do padrão de metilação em genes da família CYP450 em amostras de OS e osso normal. Os resultados obtidos mostram que 36,2% dos sítios analisados apresentaram diferença na metilação em amostras de OS comparada as amostras de indivíduos normais, sendo 91,15% hipometilados, com uma metilação média 22% menor em OS comparados às amostras normais. Em sítios hipermetilados, o aumento médio foi de 18,4% em OS comparados ao tecido ósseo normal. Quanto a localização, os sítios CpG diferencialmente metilados foram localizados em regiões open sea (56,4%), shores (20,1%), shelves (13,4%) e ilhas CpG (10,1%).

Modelagem matemática do processo fermentativo para produção de ácido láctico: uso de algoritmos evolucionários para determinação dos parâmetros cinéticos

Bolsista: Pedro Otávio Marques Schichi

Universidade: Universidade Estadual de Campinas

Unidade CNPEM: Laboratório Nacional de Ciência e Tecnologia do Bioetanol (CTBE)

Orientador: Dr. Edvaldo Rodrigo de Moraes

Co-Orientador: Victor Coelho Geraldo

Resumo

O ácido láctico é um produto com ampla aplicação nas indústrias farmacêutica, alimentícia, médica e química (ANDREOPOULOS; THEOPHANDIES, 1996; SAKAI; YAMANAMI, 2006). Atualmente a maior parte do ácido láctico é produzida por processos fermentativos, o que torna o uso do produto mais atrativo, devido, principalmente, ao seu apelo sustentável (KADAM et al, 2006; VIJAYAKUMAR, 2008; WEE; RYU, 2009). Processos fermentativos em escala industrial sofrem flutuações, e para minimizar possíveis problemas operacionais é preciso um modelo cinético consistente que permita a simulação e avaliação do processo. Neste sentido, esse projeto buscou encontrar um modelo cinético adequado, que descrevesse a produção de ácido láctico a partir a glicose utilizando o microrganismo *Lactobacillus plantarum*, e que estivesse em concordância com trabalhos semelhantes na literatura. Para que o modelo possa ser utilizado adequadamente, é necessário que os parâmetros cinéticos que o constituem sejam ajustados utilizando dados experimentais. Os dados foram retirados de um projeto de doutorado em andamento realizado pela aluna Regiane Alves, nas instalações do CTBE/CNPEM (Processo nº 2013/26290-5). Para tal ajuste um algoritmo de otimização, mais especificamente o método dos algoritmos genéticos (GA), foi utilizado. A aplicação dessa categoria de algoritmos de otimização se mostrou bastante adequada ao estudo proposto, conforme mostrado pelos resultados obtidos. O modelo ajustado mostrou-se capaz de reproduzir os dados experimentais, na medida que o erro experimental permitiu. Além disso, os resultados numéricos e a simulação do experimento foram validados através da análise de variância (ANOVA) e do Teste-F.

Destoxificação de hidrolisado hemicelulósico para produção de etanol de segunda geração.

Bolsista: Rafael Boni

Universidade: Pontifícia Universidade Católica de Campinas

Unidade CNPEM: Laboratório Nacional de Ciência e Tecnologia do Bioetanol (CTBE)

Orientador: Dra. Sarita Cândida Rabelo

Resumo

Nas últimas décadas foram iniciados diversos projetos de pesquisas e desenvolvimento com foco na produção de combustíveis renováveis a partir de biomassas lignocelulósicas. O Brasil busca desenvolver o etanol de segunda geração (E2G) a partir de do bagaço e da palha, os quais oferecem baixo custo, estão disponíveis em grandes quantidades e próximos as instalações industriais, além de apresentarem alto teor de carboidratos. Para a produção do E2G é necessário converter a fração de polissacarídeos em açúcares fermentescíveis para sua posterior fermentação. Para tal conversão é necessária a utilização de operações como o pré-tratamento, cuja função é fracionar a biomassa em suas frações macromoleculares, aumentando assim a sua área superficial, e propiciando ganhos nas etapas posteriores de processo. Entretanto, durante a etapa de pré-tratamento, ocorre a formação de alguns compostos que inibem o processo fermentativo, como, por exemplo, ácido acético, compostos fenólicos, furfural e hidroximetilfurfural (HMF). Para melhoria do processo fermentativo e consequente aumento na eficiência da produção de etanol, métodos químicos e físicos têm sido propostos para diminuir a concentração destes inibidores no meio. O presente trabalho deu continuidade ao projeto realizado por (MORGADO, 2016), no qual utilizou-se do processo de destoxificação de hidrolisado hemicelulósico por meio da extração líquido-líquido. Frente aos dados obtidos anteriormente, estudos de eficiência da técnica de extração líquido-líquido (ELL), considerando múltiplos estágios para a remoção de ácido acético e compostos fenólicos, foram realizados. Para isso foram utilizados quatorze solventes - biodiéseis provenientes de coco e mamona, diisobutilcetona (DIBC), acetato de heptila, terc-metil-butil-éter (MTBE), 1-Decanol, álcool isoamílico, metil-isobutilcetona (MIBK), acetato de butila, acetato de isobutila, acetato de isoamila, butanol, propionato de isoamila e 2-etilhexanol. Para os solventes acetato de isoamila, diisobutilcetona (DIBC) e terc-metil-butiléter (MTBE) foram realizados experimentos de equilíbrio líquido-líquido com sistemas ternário água + ácido acético + solvente, nas temperaturas de 20°C e 40°C, para a construção das curvas binodais e tie lines, complementando assim os estudos realizados por (MORGADO, 2016). Para os sistemas ternários foram realizadas simulações computacionais a fim de se comparar os dados experimentais com os dados gerados pelo simulador de processos Aspen Plus, utilizando, para isso, o modelo termodinâmico UNIQUAC. Outro ponto avaliado foi a solubilidade dos solventes no licor hemicelulósico à uma temperatura ambiente (25°C). Fermentações do hidrolisado hemicelulósico não destoxificado e destoxificado foram

realizados empregando as leveduras *Spathaspora passalidarum* e *Scheffersomyces stipitis* para avaliar a eficiência da etapa de extração dos compostos inibitórios. Os resultados obtidos mostram que o butanol é um excelente solvente para a extração de compostos inibitórios de processos fermentativos, no entanto, devido a sua alta solubilidade no meio ($37,91 \pm 0,58$) g/L, acaba ocasionando um processo inibitório nas leveduras avaliadas. Já o álcool isoamílico apresenta bom desempenho no processo fermentativo além de possuir baixa concentração no meio. Este solvente é de grande interesse uma vez que ele pode ser recuperado dos processos de fermentação das usinas 1G Para os diagramas ternários, os dados experimentais foram coerentes com as simulações para MTBE e DIBC, apresentando grande desvio para acetato de isoamila, em ambas as temperaturas analisadas.

Avaliação de glicosidases bacterianas aplicadas na otimização de coquetéis fúngicos para sacarificação de biomassas vegetais.

Bolsista: Rafael Ferreira da Cunha

Universidade: Universidade Estadual de Campinas

Unidade CNPEM: Laboratório Nacional de Ciência e Tecnologia do Bioetanol (CTBE)

Orientador: Dr. Roberto Ruller

Resumo

A redução nas emissões de gases do efeito estufa encontra como um dos obstáculos a substituição dos derivados de petróleo como combustíveis. O bioetanol, produzido a partir da fermentação do licor açucarado da cana-de-açúcar, aparece no Brasil como potencial alternativa. A produtividade das usinas sucroalcooleiras, no entanto, pode ser ainda maior com os avanços nas tecnologias para o etanol de segunda geração. Este é obtido a partir da fermentação dos açúcares liberados na hidrólise da biomassa residual do processo de produção do bioetanol. Os maiores desafios da produção do E2G encontram-se no pré-tratamento e na hidrólise, etapas chave para tornar o processo menos oneroso. No presente trabalho, utilizou-se a hemicelulase quimérica bifuncional (XAXB patente CTBE INPIBR102013018051), que é constituída por uma endo-1,4- β -xilânase GH11 fusionada a um linker termoestável a uma β -xilósidase GH43, de *Bacillus subtilis*, na suplementação de um coquetel enzimático promissor, proveniente do fungo termófilo *Thermoascus aurantiacus* CBMAI 578. Isso teve o objetivo de melhorar a eficiência de hidrólise em bagaço de cana pré-tratado com 1,5% NaOH m/v a 130°C, 30 min. A enzima, foi adicionada em concentrações crescentes (curva dose-resposta), para a hidrólise do bagaço pré-tratado em microcubos (5% de sólidos) a 50°C e 60°C por 24h. A suplementação do coquetel enzimático, contudo, não apresentou melhoria. A quantidade de açúcar redutor no sobrenadante foi dosada por ART (açúcar redutor total), e indicou que apenas a enzima bifuncional (quimera XAXB) sozinha possui um potencial de hidrólise do bagaço utilizado, demonstrando obter aplicação na sacarificação de materiais lignocelulósicos.

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 do CNPEM: Laboratório Nacional de Luz Síncrotron - LNLS

Orientador: Dr. Douglas Galante

Co-orientadores: Dr. Fabio Rodrigues (Instituto de Química/ USP)

Dr. Ivan G. Paulino Lima (NASA Ames Research Center)

Resumo

Sabendo que missões robóticas de superfície da NASA e China estão previstas para 2020, é imprescindível compreender com maior precisão os possíveis sinais de vida extinta ou existente na superfície e subsuperfície marciana de acordo com sua história geológica, de forma a obter um melhor aproveitamento das missões. Existem várias teorias de que Marte já possuiu um vasto oceano e que talvez grande parte dessa água atualmente esteja na forma de aquíferos (Clifford e Parker, 2001). Nesse passado, microrganismos podem ter se adaptado às condições extremas de salinidade à medida que tais locais iam congelando e/ou secando, tornando a água cada vez mais saturada, até se tornar o planeta frio e seco que se conhece até então. Assim, o objetivo do presente projeto é obter uma microbiota capaz de sobreviver a algumas ou mais condições ambientais marcianas visando o estudo de formação de bioassinaturas num ambiente análogo, partindo de uma comunidade hipersalina contida numa câmara de simulação adaptada do conceito da coluna de Winogradsky¹. Em continuação ao relatório parcial anterior, após o término de dois meses de estabelecimento do microbioma, as colunas foram abertas para as análises. Abaixo, é apresentado um resumo das principais atividades desenvolvidas no decorrer deste projeto no período do presente relatório: a) As colunas foram abertas em fevereiro de 2017, mostrando que as colunas sob fluxo de CO₂ apresentaram um precipitado branco cobrindo toda a superfície. Enquanto que, nas colunas sob atmosfera terrestre, a superfície foi dominada por uma espessa massa cor de rosa, possivelmente bactérias púrpura sulfurosas. b) O mapeamento elementar feito com fluorescência de raios X mostrou que o precipitado branco poderia ser carbonato. Todavia, as diferenças na distribuição de cálcio entre os dois grupos não era significativa e aparentava exatamente o contrário: que as colunas sob atmosfera terrestre teriam um estrato de cálcio mais denso do que àquelas sob fluxo de CO₂. c) Utilizando a difração de raios X, foi possível observar diferenças entre os estratos, mas nada significativa entre os dois grupos de colunas. Principalmente na superfície (o primeiro estrato), não foi possível distinguir entre os tipos de carbonatos em questão (calcita, dolomita e Mg-Calcita). Para tentar contornar essa dificuldade, utilizou-se micro-espectroscopia Raman, mas que, com os lasers disponíveis, não foi possível observar nada além do sinal de fluorescência dos compostos orgânicos. Assim, utilizou-se a espectroscopia por

infravermelho tentar solucionar a questão. No entanto, os principais picos desses carbonatos são muito próximos uns dos outros, e não foi possível distinguir com segurança. d) Para analisar especificamente aquela camada de precipitado, foi utilizado a microscopia eletrônica por varredura acoplada com espectroscopia por dispersão de energia de raios X (SEM/EDS). Foi observada que a camada era composta principalmente de cálcio, com boa correlação com magnésio, e com um hábito cristalino muito similar ao de carbonatos. Em comparação, na superfície do grupo sob atmosfera terrestre, somente foi possível observar biofilmes bacterianos em formato de esferas. e) Por fim, resta ainda analisar os dados recém chegados do sequenciamento de 16S para determinar a diversidade microbiana sobrevivente e correlacionar o metabolismo com a precipitação observada. Ainda assim, pretende-se realizar outra análise com SEM para estudar os carbonatos das camadas analisadas por XRF. Ao mesmo tempo, um estudo está sendo realizado para isolar os efeitos bióticos e entender se o fenômeno de precipitação ainda ocorreria.

Desenvolvimento de software para a geração de nuvem de pontos obtidas por amostragem de modelos CAD e introdução de desvios geométricos e dimensionais: estudo inicial.

Bolsista: Willian Hideak Arita da Silva.

Universidade: Universidade Estadual de Campinas

Unidade CNPEM: Laboratório Nacional de Luz Síncrotron - LNLS

Orientador: Dr. Rodrigo Junqueira Leão.

Co-orientador: Dr. Crhistian Raffaello Baldo (Universidade Federal do ABC)

Resumo

A metrologia dimensional e a especificação de tolerâncias geométricas têm sido alvo de contínuos avanços nos últimos anos. Como exemplo, tem-se o auxílio de softwares computacionais enquadrados na categoria de Digital Mock-Up. Esses softwares proporcionam o intercâmbio das informações durante todo o processo de manufatura de um novo produto, desde a fase de projeto até a produção e montagem. O avanço mencionado também se reflete no contexto da engenharia de projetos mecânicos, cujos métodos de toleranciamento atuais permitem especificar não só tolerâncias dimensionais em um modelo como também tolerâncias geométricas e de forma através de um sistema GD&T (Geometric Dimensioning and Tolerancing). Contudo, devido à natureza estocástica e não previsível dos processos de manufatura, a especificação de tolerâncias de modo a atender os requisitos funcionais de um modelo ou projeto mecânico é uma tarefa complexa e normalmente é assistida por softwares de Computer Aided Design (CAD). Diante da necessidade de uma integração das tolerâncias geométricas às atuais ferramentas CAD, tem-se como objetivo o desenvolvimento de um software que permitirá a geração de uma nuvem de pontos a partir da amostragem de modelos CAD. A ferramenta proposta se enquadra na categoria de softwares de Computer Aided Tolerancing (CAT), e também permitirá a introdução de desvios dimensionais e geométricos na própria nuvem de pontos, compostos por combinações de translações, rotações, erros aleatórios e erros de forma. A nuvem de pontos gerada também poderá, posteriormente, ser utilizada em conjunto com softwares de análise dimensional já citados, permitindo uma análise mais abrangente quanto ao processo de toleranciamento de projetos mecânicos sem a necessidade de fabricação de um protótipo.
