

---

18º Congresso Interno de Iniciação Científica do PIBIC-CNPEM



# LIVRO DE RESUMOS 2020



MINISTÉRIO DA  
CIÊNCIA, TECNOLOGIA  
E INOVAÇÕES



## 1. Apresentação

É com grande satisfação que anunciamos a realização o 18º Congresso Interno do Programa Institucional de Bolsas de Iniciação Científica (PIBIC) do Centro Nacional de Pesquisa em Energia e Materiais (CNPEM). Em função das diretrizes institucionais para manutenção do distanciamento social em todo o Campus do CNPEM, desde início de abril, como medida de enfrentamento da COVID-19, o Congresso Interno dos alunos PIBIC de 2020 foi realizado através de um fórum virtual, substituindo-se assim o tradicional evento de apresentação de pôsteres. Tal fórum, ocorrido em 17 de novembro, contemplou as apresentações dos bolsistas na forma de vídeos, os quais estão disponíveis na página do PIBIC/CNPEM (<https://pages.cnpem.br/pibic/>).

Embora as atividades presenciais dos alunos nas unidades de pesquisa do CNPEM tenham sido interrompidas em função da pandemia da COVID-19, salientamos que os alunos foram orientados a seguir com atividades de revisão da literatura, pesquisas bibliográficas, redação de textos, relatórios e artigos científicos. Assim, os trabalhos dos bolsistas PIBIC do ano 2019/2020, englobando diferentes áreas do conhecimento como física de aceleradores, materiais nano-estruturados, estrutura e função de proteínas e prospecção de compostos biorrenováveis, estão reunidos neste livro de resumos.

Aproveitamos a ocasião para agradecer ao CNPq pelas bolsas concedidas ao nosso programa nos últimos anos e a todos do CNPEM que de alguma forma contribuíram para a realização deste evento. Em especial, gostaríamos de agradecer os 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 muito esmero e rigor científico.

Coordenação do PIBIC - CNPEM

## 2. O Programa PIBIC no CNPEM

Desde 2002, o CNPEM vem, em parceria com o CNPq, coordenando e viabilizando atividades de pesquisa e treinamento de alunos PIBIC através das suas quatro unidades laboratoriais de pesquisa, os Laboratórios Nacionais de Luz Síncrotron (LNLS), Nanotecnologia (LNNano), Biociências (LNBio) e Biorrenováveis (LNBR).

O programa PIBIC no CNPEM tem como principal meta estimular a formação científica e capacitação dos alunos de graduação, proporcionando a eles um ambiente dinâmico para o desenvolvimento de projetos de pesquisa de grande relevância em diferentes áreas do conhecimento, e com uso de infraestrutura e instrumentação científica de classe mundial.

O engajamento desses alunos nas atividades de pesquisa e inovação da instituição representa o primeiro passo na trajetória profissional daqueles que buscam atuar como protagonistas nas diferentes áreas da ciência e tecnologia. Essa oportunidade de convívio direto com as atividades científicas proporciona ao aluno a base necessária para a construção e consolidação de uma sólida carreira profissional. Neste sentido, o PIBIC é um valioso instrumento de incentivo aos jovens talentos. Prova disso é que muitos de nossos alunos resolvem cursar a pós-graduação influenciados pelas experiências vividas nos laboratórios do CNPEM. Dessa forma, reconhecemos a importância desse programa e acreditamos que estamos cumprindo nossa missão contribuindo de forma significativa à educação e formação profissional de nossos alunos.

Atenciosamente,

Celso Benedetti  
Coordenador do PIBIC - CNPEM

### **3. Comitês de avaliação 2020**

#### **Comitê Interno**

Dra. Juliana Helena Costa Smetana - LNBio

Dr. Carlos Costa - LNNano

Dra. Juliana Velasco de Castro Oliveira - LNBR

Dr. Julio Criginski Cezar - LNLS

#### **Comitê Externo**

Prof. Dr. Herculano da Silva Martinho

Centro de Ciências Naturais e Humanas, Universidade Federal do ABC

Prof. Dr. Igor Cesarino

Instituto de Biociências, Universidade de São Paulo

## 4. Resumos

**Projeto:** Estudo de materiais nanométricos pela função de distribuição de primeiros vizinhos

**Bolsista PIBIC:** Amanda Vettorazzo Halsman

**Universidade:** Universidade Estadual de Campinas

**Orientador:** Doutor Jefferson Bettini

**Unidade CNPEM:** LNNano

### RESUMO

A análise de amostras amorfas ou nanopartículas (menores que 5 nm) por imagens ou por difração de elétrons (ambas obtidas por microscopia eletrônica) pode apresentar limitações por causa de sua reduzida coerência estrutural. Assim, são necessárias técnicas adicionais para um melhor entendimento (caracterização) destes materiais. Uma destas técnicas é a análise do espalhamento total (imagens de difração de elétrons) via “pair distribution function” (PDF). O PDF, por sua vez, é uma função que descreve a distância entre um átomo qualquer do material e seus vizinhos, formalmente, é uma função que descreve a probabilidade de encontrar um átomo a uma determinada distância, assumindo uma posição atômica como a referência inicial, sendo possível assim obter mais informações da amostra analisada. Essa técnica é comumente empregada em laboratórios de luz síncrotron, ou laboratórios que possuem uma fonte de espalhamento de nêutrons. Recentemente, o uso da Microscopia Eletrônica de Transmissão (MET) tornou esta técnica mais acessível, por necessitar de menor quantidade de amostra e por ser mais barata. Além disso, a microscopia eletrônica apresenta a vantagem de obter, na mesma área de observação, o espalhamento total da amostra (modo difração) e a imagem do objeto observado, possibilitando assim a escolha da área da amostra que será medida. Em 2018, foi estabelecido um protocolo inicial para a obtenção de PDF utilizando a microscopia eletrônica do Laboratório Nacional de Nanotecnologia. O presente projeto de pesquisa consiste na otimização deste protocolo inicial. Para isso, visando o entendimento da obtenção do PDF em função destes parâmetros experimentais, foram variados diversos parâmetros: comparação entre diferentes câmeras, diferentes microscópios, dimensão total da imagem, tamanho de pixel na imagem, etc. A meta final é atingir o estado da arte nessa técnica no LME/LNNano, aplicando-a otimizada ao estudo de nanopartículas desenvolvidas no Laboratório Nacional de Nanotecnologia. Neste sentido, foi encontrado o comprimento de câmera que otimiza a relação sinal-ruído para cada câmera e microscópio além do efeito de outros recursos que visam reduzir o ruído da função PDF.

**Projeto:** Avaliação do efeito inibitório dos produtos de degradação de materiais lignocelulósicos no metabolismo de leveduras *Saccharomyces cerevisiae* geneticamente modificadas.

**Bolsista PIBIC:** Gabriel Antônio de Oliveira Bariani

**Universidade:** Universidade Estadual de Campinas - Unicamp

**Orientador:** Dra. Cíntia Regina Sargo; Dr. Edvaldo Rodrigo de Moraes

**Unidade CNPEM:** LNBR

## **RESUMO:**

A busca por uma matriz energética alternativa e sustentável, baseada em recursos renováveis tem sido um dos principais desafios enfrentados pelos países interessados em diminuir a dependência do petróleo de modo a mitigar as emissões globais de gases do efeito estufa e poluição ambiental. O Brasil é reconhecido mundialmente pela sua matriz energética renovável, sendo um dos principais produtores de bioetanol. O aproveitamento de açúcares presentes em resíduos lignocelulósicos é considerado uma alternativa promissora e sustentável para produção de etanol e outros biocombustíveis e bioquímicos. Tal tecnologia geralmente envolve uma etapa inicial de pré-tratamento, permitindo o acesso a estes açúcares, seguida por uma etapa de hidrólise para converter a celulose e hemicelulose em açúcares fermentescíveis e uma etapa de fermentação, em que microrganismos nativos ou geneticamente modificados convertem os açúcares nos bioprodutos de interesse. No entanto, durante a etapa de pré-tratamento normalmente há formação de subprodutos tóxicos ou inibitórios ao metabolismo microbiano, promovendo, de forma significativa, a redução do rendimento e da produtividade no processo fermentativo. Neste contexto, o presente projeto de pesquisa busca avaliar e compreender os efeitos desses inibidores e suas diferentes combinações sobre o metabolismo de uma *Saccharomyces cerevisiae* geneticamente modificada, de modo a contribuir com o desenvolvimento dessa tecnologia promissora.

**Projeto:** Estudo de Xilose isomerases psicrófilas provenientes do metagenoma do solo da Antártica

**Bolsista PIBIC:** Luiza Hesketh Gomes

**Universidade:** Universidade Estadual de Campinas

**Orientador:** Leticia Maria Zanphorlin Murakami

**Co-orientador:** Renan Yuji Miyamoto

**Unidade CNPEM:** LNBR

## RESUMO

Para tornar a produção do etanol de segunda geração economicamente viável, é de fundamental importância a utilização da fração hemicelulósica, composta por pentoses, principalmente D-xilose. A D-xilose, obtida após a sacarificação das estruturas hemicelulósicas, ainda é subaproveitada, principalmente decorrente da incapacidade das leveduras industriais (*Saccharomyces cerevisiae*) em metabolizar esse açúcar para a produção de etanol de segunda geração (E2G). Assim, uma estratégia para ampliar o uso da xilose por leveduras industriais seria a isomerização deste açúcar em xilulose por enzimas denominadas xilose isomerases (XylAs). Entretanto, a maior parte destas enzimas atuam em pHs e temperaturas ótimas incompatíveis com as condições fisiológicas da *S. cerevisiae*, além de apresentarem níveis de expressões bastante ineficientes. Tendo em vista esta problemática, o presente projeto visa a investigação de novos genes de xilose isomerases, que foram previamente selecionados por método *in silico* a partir de dados metagenômicos de solo da Antártica, para atuarem em processos fermentativos na presença da levedura *S. cerevisiae*. Devido às condições extremas da fonte de prospecção, espera-se que as enzimas possuam comportamento psicrófilo. As XylAs foram expressas em cepas de *E. coli* e avaliadas utilizando uma abordagem multidisciplinar que contemplará ensaios de bioquímica e avaliação funcional. Aplicando a ferramenta de rede de similaridade de sequências, selecionou-se 3 Xis para estudo. Os genes foram clonados a partir do DNA metagenômico, e confirmados por sequenciamento. As expressões heterólogas produziram enzimas predominantemente na fração insolúvel, impossibilitando os ensaios funcionais. Desta forma, foi utilizado um plasmídeo sintetizado (GenScript) com os códons otimizados, na qual foi possível obter a AraXI na forma solúvel. Ensaios bioquímicos revelaram um comportamento alcalofílico, e diferentemente do esperado, a enzima prospectada do metagenoma do solo da Antártica apresentou temperatura ótima de atuação a 60 °C, apresentando apenas 4 % da sua atividade máxima a 30 °C.

**Projeto:** Crescimento e caracterização por imagens de microscopia de multicamadas sintéticas antiferromagnéticas para a estabilização de paredes de domínio e skyrmions

**Bolsista PIBIC:** Thiago Moreno Batistel

**Universidade:** Universidade Estadual de Campinas - SP

**Orientador:** Dr. Jeovani Brandão

**Unidade CNPEM:** LMLS

## **RESUMO**

O antiferromagnetismo tem ganhado grande destaque devido às características promissoras para aplicações em possíveis futuros dispositivos tecnológicos. Essas características incluem zero campo dipolar, rápida inversão da magnetização, e geram largos efeitos de magneto transporte. No entanto, ainda se tem pouco conhecimento sobre a manipulação de domínios neste ordenamento magnético, quando comparado ao ferromagnetismo, por exemplo. Este projeto tem como objetivo produzir e estudar estruturas antiferromagnéticas sintéticas, e busca procedimentos para estabilizar skyrmions nestes sistemas. Posteriormente, espera-se realizar medidas de transporte, para estudar o comportamento dos skyrmions antiferromagnéticos sob o efeito de corrente elétrica, essencial para a aplicação em dispositivos.



**Projeto:** Investigação da expressão de genes relacionados com a motilidade em células microgliais derivadas de pacientes com trissomia do cromossomo 21.

**Bolsista PIBIC:** Vinicius Felipe da Rocha

**Universidade:** Universidade Estadual de Campinas

**Orientador:** Bruno Henrique Silva Araujo Torres

**Unidade CNPEM:** LNBio

## **RESUMO**

A síndrome de Down (SD) é caracterizada predominantemente por deficiência intelectual, que se manifesta desde a infância e perdura por toda a vida do indivíduo portador. Estudos a respeito das implicações celulares e moleculares da trissomia do cromossomo 21 indicam uma redução no tamanho e número de ramificações dendríticas nos neurônios do córtex cerebral, além de disfunções nos níveis de neurotransmissores importantes para o desenvolvimento cerebral, como a taurina, a serotonina, a dopamina e o GABA. Nesse sentido, o presente projeto possui uma abordagem recente com enfoque na atuação deficiente das células microgliais, que representam a primeira linha de defesa imune contra patógenos e lesões e cuja morfologia e função parecem estar afetadas nos indivíduos portadores de SD. Trata-se da síndrome de causa genética de maior incidência no mundo, o que justifica a pertinência da pesquisa, ao potencializar opções de tratamento e melhoria de qualidade de vida, além de buscar contribuir para a elucidação de um importante problema no campo da neurociência. Para isso, utilizou-se como modelo as células tronco de pluripotência induzida (iPSC), obtidas a partir de um processo de reprogramação genética de células somáticas retiradas de pacientes com trissomia do 21. Então, foi induzida a diferenciação dessas iPSC em células microgliais, para que se pudesse analisar a expressão de genes específicos ligados ao funcionamento da micróglia, mediante experimentos de qPCR. Porém, com a irrupção da pandemia de COVID-19, a execução dos experimentos foi interrompida. Paralelamente, atuei em um projeto relativo ao cultivo de organoides no mesmo laboratório e na preparação de um manuscrito submetido à revista *Current Neuropharmacology*.

**Projeto:** Estudo dos efeitos de influências externas de vibração e ruído no feixe de elétrons do Sirius

**Bolsista PIBIC:** Leonardo Rossi Leão

**Universidade:** Universidade Estadual de Campinas

**Orientador:** Rodrigo Junqueira Leão

**Co-orientador:** Rodrigo de Oliveira Neto

**Unidade CNPEM:** LNLS

## **RESUMO**

O presente projeto de pesquisa visou a investigação de possíveis correlações entre instabilidades no feixe de elétrons do Sirius, Síncrotron de quarta geração recentemente desenvolvido no Brasil, e fontes de vibração geradas por fontes externas ao prédio do acelerador. Para a medição de vibrações de baixa frequência, uma estação sismográfica comercial foi instalada e programada para realizar a aquisição dos dados de forma sincronizada com o sinal de tempo do acelerador. Para visualização das informações obtidas, foi desenvolvida e implementada uma aplicação web de monitoramento sísmico que permite a visualização dos dados do sismômetro de forma rápida e eficiente, a qual, dentre outras funções, permite a conversão das informações do domínio do tempo para o da frequência, provendo assim condições favoráveis para a realização de análises dos dados coletados pelo equipamento. Este sistema faz parte de um conjunto mais amplo de monitoramento da estabilidade mecânicas das instalações do Sirius, do qual também farão parte um sistema de nivelamento hidrostático, duas estações meteorológicas e um sistema de medição de deformação e temperatura do concreto presente na blindagem de proteção radiológica e nos pisos especiais do Sirius. O resultado desse estudo poderá ajudar na tomada de decisão de tentar tomar providências com relação a possíveis instabilidades no feixe de elétrons e dirimir dúvidas sobre as causas das perturbações.

**Projeto:** Avaliação das propriedades estruturais, morfológicas e ópticas de silicatos luminescentes para aplicações biológicas

**Bolsista PIBIC:** Luís Felipe Rodrigues Teodoro

**Universidade:** Universidade Estadual de Campinas

**Orientador:** Verônica de Carvalho Teixeira

**Unidade CNPEM:** LMLS

## **RESUMO**

O estudante Luís Felipe Rodrigues Teodoro, iniciou seu trabalho de iniciação científica em 01/02/2020, sob minha orientação, com o título: “Obtenção de fontes fotônicas baseadas em carbonatos através da ação de microrganismos”. Durante o primeiro mês de trabalho, Luís Felipe ambientou-se, revisou literatura acerca do tema proposto, apresentou um seminário para o grupo, fez seu plano de trabalho e daria início às atividades de cultivo dos microrganismos e sequente precipitação de carbonatos luminescentes em meados do mês de março, quando, devido à pandemia de COVID-19, tivemos nossos expedientes direcionados para o trabalho remoto. Dada a situação, o estudante passou a trabalhar com tratamento de dados relativos a outro trabalho do nosso grupo, a respeito do qual já dispúnhamos de amostras e dados diversos que precisavam ser analisados e discutidos. Desta forma, ele deu continuidade a esse estudo e se envolveu com diversas técnicas que estarão presentes em seu trabalho relativo às fontes fotônicas precipitadas pela ação de microrganismos. O presente trabalho será apresentado para publicação em breve. Assim, justifico a provisória mudança no título do atual projeto para: “Avaliação das propriedades estruturais, morfológicas e ópticas de silicatos luminescentes para aplicações biológicas.

**Projeto:** Síntese e caracterização de inibidores de tRNA sintetases de bactérias Gram-negativas

**Bolsista PIBIC:** Cláudia Bohun

**Universidade:** Universidade Estadual de Campinas

**Orientador:** Dr Gustavo Fernando Mercaldi

**Unidade CNPEM:** LNBio

## **RESUMO**

A metionina-tRNA sintetase (MetRS) é a enzima reponsável por esterificar o aminoácido L-metionina a RNAs transportadores (tRNA) cognatos que serão usados nas etapas de iniciação e alongação da síntese proteica. Devido a sua importante função biológica e graças a divergências entre as proteínas de patógenos e hospedeiros, há um grande interesse na síntese de inibidores dessas enzimas. Duas formas da MetRS podem ocorrer (MetRS1 e MetRS2), sendo que só a MetRS1, presente majoritariamente em bactérias gram-positivas e protozoários parasitas, tem se mostrado suscetível aos inibidores atualmente conhecidos. Sendo assim, o atual projeto visa viabilizar protocolos para a síntese de compostos inibidores MetRS2, uma vez que estas se encontram presentes principalmente em bactérias gram-negativas e podem apresentar-se como patógenos de plantas, animais e humanos. As primeiras etapas sintéticas foram realizadas com êxito.

**Projeto:** Filmes epitaxiais ultrafinos de manganitas: um estudo dos parâmetros de rede através da simulação do perfil de difração pela teoria dinâmica

**Bolsista PIBIC:** Pedro Caetano Sabino Santos

**Universidade:** Universidade Estadual de Campinas

**Orientador:** Thiago José de Almeida Mori

**Unidade CNPEM:** LNLS

## RESUMO

Em filmes finos com espessura muito baixa, a deformação na célula cristalina decorrente do mismatch com a estrutura do substrato, tem alta influência nas propriedades físicas do material. Isto ocorre pelo fato de não haver camadas o suficiente para um relaxamento completo da estrutura do filme. No processo de estudo de camadas magnéticas mortas presentes em filmes finos de  $\text{La}_{0.67}\text{Sr}_{0.33}\text{MnO}_3$  (LSMO) a baixa espessura tem aspecto fundamental. Faz-se então necessário considerar a deformação nos parâmetros de rede da célula durante sua caracterização. Além disso, a semelhança estrutural entre filme fino, LSMO, e substrato,  $\text{SrTiO}_3$  (STO), faz com que os picos de Bragg na direção [001] fiquem sobrepostos e mascarados pela interferência dos padrões de difração. Uma consequência direta deste tipo de interferência é a ineficácia da teoria cinética da difração para descrição dos resultados experimentais, tornando-se necessária uma abordagem a partir da teoria dinâmica de difração. Este estudo tem como objetivo identificar o parâmetro de rede “c” das amostras ultrafinas de LSMO crescidas sobre um substrato de STO a partir da teoria dinâmica de difração. Para isto foi necessário o cálculo da espessura real de cada filme através de simulações de refletividade de raios X. Conhecendo as espessuras de cada filme, foi então simulado o perfil de difração das amostras e então definido os parâmetros de rede. As simulações apresentaram excelentes parâmetros de acordo com o objetivo proposto, embora haja algumas divergências que serão melhor estudadas durante a sequência do trabalho.

**Projeto:** Estudos funcionais e estruturais de enzimas da família GH43 com potenciais aplicações biotecnológicas

**Bolsista PIBIC:** Jéssica Batista de Lima Correa

**Universidade:** Universidade Estadual de Campinas

**Orientador:** Dr. Mário T. Murakami

**Co- Orientadora:** Dra. Mariana A. B. Morais

**Unidade CNPEM:** LNBR

## RESUMO

A parede celular vegetal é constituída por uma estrutura complexa de polissacarídeos (celulose e hemicelulose), que desempenham funções biológicas que incluem o crescimento, a comunicação entre intercelular e uma importante barreira de defesa contra agentes patogênicos, além de funções tecnológicas como a produção de biocombustíveis, alimentos e bebidas. Portanto, enzimas que degradam essa parede celular são de grande importância para processos industriais. O banco de dados Carbohydrate-Active Enzymes (CAZy) reúne diversas enzimas capazes de degradar, modificar ou criar ligações glicosídicas, dentre elas, encontram-se as hidrolases glicosídicas (GHs) que possuem 167 famílias, sendo classificadas como endo ou exo enzimas. As enzimas de interesse do projeto se encontram classificadas como pertencentes à família GH43, uma das mais abundantes famílias de GHs. Portanto, o objetivo do projeto é a caracterização estrutural e funcional de enzimas do organismo *Xanthomonas axonopodis pv. citri* (Xac). Neste relatório anual, serão apresentados relativos à enzima XAC2533CD, incluindo sua expressão em larga escala, purificação, caracterização enzimática parcial, caracterização biofísica a partir da técnica de dicróismo circular e, além disso, será apresentado um modelo tridimensional de sua estrutura, obtido através de modelagem molecular.

**Projeto:** Abordagens in silico para análises multi-ômicas de comunidades microbianas visando explorar novas estratégias de desconstrução de biomassa lignocelulósica.

**Bolsista PIBIC:** Ana Carolina Teixeira

**Universidade:** Universidade Paulista

**Orientador:** Dra. Gabriela Felix Persinoti

**Unidade CNPEM:** LNBR

## RESUMO

As bactérias são capazes de colonizar uma grande variedade de habitats, incluindo ambientes extremos, bem como outros organismos. Bactérias do gênero *Xanthomonas* são fitopatógenos que infectam uma variedade de plantas economicamente relevantes, causando manchas nas folhas, cancos, murcha, podridão, hipertrofia e hiperplasia. A cana-de-açúcar é uma das culturas mais importantes do Brasil, a qual está sujeita a doenças causadas por bactérias. Uma das doenças que acomete a plantação de cana-de-açúcar é a doença da goma. Doença vascular causada por *Xanthomonas axonopodis* pv. *vasculorum*, a qual foi a primeira doença de cana-de-açúcar reportada na literatura. Os sintomas da doença de goma incluem a principalmente a ocorrência de faixas cloróticas amareladas. Bactérias de gênero *Xanthomonas* possuem um grande conjunto de genes relacionados à expressão de enzimas para degradação e modificação de parede celular de plantas (CWDEs) ou enzimas ativas de carboidratos (CAZymes), as quais podem ser secretadas pelo sistema de secreção tipo II e que podem estar relacionadas à patogenicidade e especificidade de hospedeiro. Nesse trabalho foi utilizado abordagens in silico para analisar a sequência do genoma de uma cepa de *Xanthomonas* isolada de cana-de-açúcar a fim de aprofundar e estabelecer sua relação filogenética com outras espécies de *Xanthomonas*, bem como analisar possíveis genes relacionados à patogenicidade, especificidade de hospedeiro, bem como buscar novas enzimas de interesse biotecnológico.

**Projeto:** Desenvolvimento de interface Orange-Python para processamento de dados hiperespectrais de nanoespectroscopia de infravermelho síncrotron

**Bolsista PIBIC:** João Eduardo Levandoski

**Universidade:** Universidade Estadual de Campinas

**Orientador:** Raul de Oliveira Freitas

**Unidade CNPEM:** LNLS

## RESUMO

Nanoespectroscopia de infravermelho (nano-FTIR) é uma técnica analítica com vasta aplicação, desde a identificação química de compostos até nano fotônica de materiais quânticos. O LNLS combina luz síncrotron com a técnica s-SNOM para a realização de nano-FTIR. Por ser uma técnica recente, ainda não existem interfaces simples e completas (comerciais ou gratuitas) para o processamento dos seus dados experimentais. Síncrotrons são considerados laboratórios multiusuários e multidisciplinares, sendo muitos desses usuários não familiarizados com programação. Portanto, é urgente o desenvolvimento de uma interface simples e intuitiva para a visualização e processamento dos dados experimentais. Este projeto visa o desenvolvimento de uma interface amigável ao usuário, onde seja possível o processamento completo dos dados gerados pelo microscópio s-SNOM. Essa interface é um projeto em colaboração com vários outros síncrotrons, sendo ela parte de um software gratuito para processamento de dados chamado Orange. Com os resultados obtidos até o presente momento os dados podem ser carregados na interface Orange para processamento por transformada de Fourier, normalizados e também podem ser submetidos a um pré-processamento utilizando funcionalidades padrões do software. Esses resultados estão disponíveis no repositório oficial hospedado no GitHub.



**Projeto:** Fracionamento físico do carbono em solos agrícolas cultivados com cana-de-açúcar sob diferentes níveis de remoção de palha

**Bolsista PIBIC:** Aline Barbosa de Oliveira

**Universidade:** Universidade Estadual de Campinas

**Orientador:** Dr. Ricardo de Oliveira Bordonal

**Unidade CNPEM:** LNBR

## RESUMO

A remoção da palha para a produção de bioenergia e outros bioprodutos se tornou uma prática comum nas plantações brasileiras de cana-de-açúcar. Porém, ainda não há um consenso sobre a quantidade de biomassa que pode ser removida de forma sustentável para manter a provisão de serviços ecossistêmicos do solo. Apesar de sua importância na produção de bioenergia e de possibilitar um aumento nos ganhos econômicos no curto prazo, a remoção indiscriminada desse resíduo agrícola pode diminuir os estoques de carbono (C) do solo e comprometer parte dos benefícios ambientais e agrônômicos promovidos pela manutenção da palha no campo. O carbono pode ser encontrado em diferentes frações físicas no solo, e uma distinção importante para o acúmulo e estabilidade do C no solo é a diferenciação entre a matéria orgânica particulada (MOP) e a matéria associada a minerais (MOAM). Essas frações têm diferentes comportamentos no solo e, dessa forma, os impactos no crescimento das plantas, na estrutura do solo e no sequestro de C também variam. O objetivo desse trabalho é avaliar o efeito da remoção da palha de cana-de-açúcar nos estoques de C e nos compartimentos da matéria orgânica do solo (MOS), tais como a matéria orgânica lábil e estável, buscando identificar a forma como o C está sendo armazenado em um Latossolo Vermelho eutroférico de textura argilosa localizado no município de Iracemápolis-SP. Para isso, durante o primeiro semestre foi realizado o levantamento bibliográfico com o intuito de aprofundar o conhecimento científico no assunto e possibilitar o embasamento teórico para o desenvolvimento do estudo. No segundo semestre, tem-se como expectativa executar as avaliações necessárias para determinar os estoques de C do solo, e quantificar as frações de MOP e MOAM induzida pela remoção da palha. Serão elaborados gráficos que auxiliem na interpretação dos resultados, visando obter a relação entre o aporte de C via palha em relação ao acúmulo de C no solo e às diferentes frações da MOS. Espera-se que este projeto forneça informações sobre os mecanismos que controlam a estabilização do C em solos agrícolas afetados pela remoção da palha da cana-de-açúcar.

**Projeto:** Avanços na segmentação de imagens de biomassa obtidas por microtomografia de raios-X

**Bolsista PIBIC:** Jonathan Mello Saccomano

**Universidade:** UNIVESP

**Orientador:** Carlos Eduardo Driemeier

**Unidade CNPEM:** LNBR

## **RESUMO**

A análise de imagens 3D de microtomografia computadorizada de biomassa de cana-de-açúcar requer um fluxo de trabalho computacional que execute as etapas de análise de forma rápida, automática e sistemática. Neste trabalho, desenvolvemos um fluxo de trabalho computacional constituído de oito passos: (1) acesso às imagens; (2) filtragem; (3) segmentação; (4) definição de máscara; (5) extração da rede de poros; (6) visualização dos logs computacionais; (7) visualização da rede de poros; (8) gravação dos dados e repetição do fluxo de trabalho. Cada passo do fluxo de trabalho foi construído por algoritmos em linguagem Python, juntamente aos softwares livres de análise de imagens (Fiji/ImageJ), de extração de redes de poros (Pnexttract) e visualização das redes de poros (Paraview). Esse fluxo de trabalho computacional permitirá a análise sistemática e automatizada de grandes volumes de imagens 3D dos sistemas porosos da biomassa de cana-de-açúcar.

**Projeto:** Desenvolvimento de análise em caracterização mecânica de fitas de Kapton e da técnica de correlação digital de imagens

**Bolsista PIBIC:** Eduarda Nicoletto Ayres de Oliveira

**Universidade:** Universidade Estadual de Campinas

**Orientador:** Dr. Guilherme Calligaris

**Unidade CNPEM:** LNLS

## RESUMO

A caracterização mecânica de materiais usados na eletrônica flexível são fundamentais para o avanço do desenvolvimento da tecnologia atual. Neste contexto, o projeto em questão trabalha caracterizando o Kapton e desenvolvendo uma ferramenta para auxiliar esse tipo de estudo, a correlação digital de imagens (DIC). Neste projeto foi analisado os efeitos de tensões aplicadas em películas de Kapton visando possibilitar ensaios de tensão 2D em baixas temperaturas. Foram avaliados experimentos de tração unidimensional em fitas bidimensionais (cruciformes). Além da caracterização pela curva Tensão X Deformação usual, estudou-se o escoamento de tensão temporal do material em deformação fixa e a resposta mecânica do Kapton em baixas temperaturas via análise do Módulo de Young, interessante para o estudo de filmes finos antiferromagnéticos. Com isso, observou-se que o módulo de Young dessas fitas aumenta com o decréscimo da temperatura e que há decaimento da tensão exercida em amostras fixas. Este projeto também catalisou o aperfeiçoamento técnica de DIC no laboratório, que deve ser utilizado junto com o recém desenvolvido dispositivo 2DMASI (2D Bi-axial Multi-Analysis Strain Instrument). Nesse contexto, um estudo sistemático permitiu encontrar uma solução de padrão artificial de dispersão, necessário para aplicar essa técnica em filmes finos de interesse. Além disso, o projeto avançou nos testes do algoritmo de análise para DIC, já mostrando resultados interessantes como campos de deslocamento e mapas de deformações, com resolução em torno de 30 nm em um campo de visão da ordem de  $6,5 \times 6,5 \mu\text{m}^2$ .

**Projeto:** Estudo do papel de vesículas extracelulares derivadas de macrófagos associados ao câncer (TAM) na modulação e manutenção do microambiente tumoral

**Bolsista PIBIC:** Elyara de Oliveira Safra

**Universidade:** Universidade Estadual de Campinas

**Orientador:** Adriana Franco Paes Leme

**Coorientador:** Ana Karina de Oliveira

**Unidade do CNPEM:** LNBio

## **RESUMO**

O microambiente tumoral é dinâmico e as células que o compõe estão em intensa comunicação e troca de biomoléculas. Sua composição se baseia em um equilíbrio entre células imunossupressoras, que favorecem o estabelecimento do tumor, seu crescimento e metástase, através de processos como a angiogênese, linfanogênese, evasão do sistema imune e degradação e remodelação de componentes da matriz extracelular e regulação negativa de células antitumorais, que atuam no processo de inflamação através de liberação de citocinas e da morte de células tumorais. Uma das principais células envolvidas nesse equilíbrio é o macrófago. No microambiente, ele pode assumir dois fenótipos diferentes, um de perfil pró-inflamatório (M1) e o outro de perfil anti-inflamatório (M2) e pró-tumorigênico conhecido como macrófago associado ao tumor (TAM). Outro componente intimamente relacionado ao microambiente tumoral são as vesículas extracelulares (VEs), pequenas estruturas circulares liberadas a partir das células, que são carreadoras de moléculas entre elas. No câncer já foi demonstrado que VEs estão envolvidas nos processos de tumorigênese, angiogênese, evasão do sistema imune e metástase. VEs podem influenciar o fenótipo de macrófagos, favorecendo o subtipo M2/TAM, que por sua vez realizam modulação do microambiente tumoral de forma a manter um mecanismo de retroalimentação e manutenção do fenótipo pró-tumorigênico. Neste sentido, o objetivo de nosso projeto é estudar o papel de VEs derivadas de macrófagos do tipo M2/TAM na modulação do microambiente imunossupressor. Além disso, VEs podem ser uma ferramenta para estudo e identificação de possíveis marcadores de prognóstico e alvos terapêuticos do carcinoma espinocelular (CEC) de cavidade oral, uma neoplasia com prognóstico desfavorável e alta taxa de mortalidade.

**Projeto:** Avaliação da magnetorresistência em multicamadas ferromagnéticas baseadas em filmes finos e nanomembranas autoenroladas

**Bolsista PIBIC:** Thamiris Cescon dos Santos;

**Universidade:** Universidade Estadual de Campinas (UNICAMP);

**Orientador:** Carlos Cesar Bof Bufon

**Unidade CNPEM:** LNNano

## RESUMO

A investigação da magnetorresistência em materiais nanoestruturados tem potencial para o desenvolvimento e aprimoramento de dispositivos eletrônicos tais como memórias e válvulas de spin. O principal objetivo do presente projeto é investigar a magnetização (anisotrópica e/ou gigante) de estruturas com espessuras nanométricas formadas por camadas e multicamadas ferromagnéticas baseadas em (i) filmes finos e (ii) nanomembranas autoenroladas. Para tanto, processos de microfabricação e deposição de filmes finos foram combinados a técnicas de engenharia que modificam as tensões mecânicas nos filmes finos para produzir dispositivos eletrônicos de dois terminais. As camadas metálicas (Au/Ti/Cr/Au) e magnéticas (Co/Pt e/ou Co) foram depositadas por evaporação térmica e por pulverização catódica, respectivamente. A morfologia dos materiais empregados foi avaliada por microscopia eletrônica de varredura (MEV). Os dispositivos de diferentes geometrias, i.e., planar e tubular, tiveram suas características elétricas avaliadas como função do potencial elétrico e do campo magnético. As características elétricas foram obtidas para 6 valores de campos magnéticos no intervalo de 0 a 0.55 T. Ainda, medidas elétricas foram realizadas para avaliar a magnetização dos dispositivos tubulares em direções ortogonais ao campo magnético externo. Os resultados obtidos neste trabalho indicam que a conformação tridimensional das camadas ativas pode alterar a magnetorresistência dos dispositivos.

**Projeto:** Desvendando a ferroeletricidade de paredes de domínios elásticos e suas estruturas cristalinas

**Bolsista PIBIC:** Larissa Ribeiro Galão

**Universidade:** Universidade Estadual de Campinas

**Orientador:** Flávia Regina Estrada

**Unidade CNPEM:** LNLS

## RESUMO

Nosso objetivo é resolver a estrutura de domínios ferroelétricos em materiais com diferentes simetrias cristalinas para determinar a relação de estrutura cristalina com estrutura de domínios ferroelétricos. Uma das maneiras para caracterizar a estrutura de domínios de forma direta em temperatura ambiente é através de medidas de microscopia de força atômica, AFM, e a microscopia de força piezoelétrica, PFM. Porém, em função da COVID-19, fomos afastados das atividades presenciais no laboratório, o que inviabilizou essa abordagem nesta primeira parte da iniciação científica. Então, durante a pandemia, focamos esforços no tratamento de dados de difração de raios X para o estudo da estrutura cristalina de materiais ferroelétricos em função da temperatura e de suas transições de fase. Nos difratogramas, além de analisar a estrutura cristalina, buscamos entender como a anisotropia microestrutural dos domínios influencia de forma diferente na largura de alguns picos de difração. Utilizamos dados de DRX de amostras de  $(1-x)\text{PbTiO}_3\text{-}(x)\text{CaTiO}_3$  com diferentes concentrações de cálcio em temperatura ambiente coletados com difratômetros de bancada e em função da temperatura coletados usando luz síncrotron. O refinamento de perfis de difração em temperatura ambiente para diferentes composições foi feito usando o software GSAS II e fomos capazes de fazer análises, comparando os três perfis, relacionando grupo espacial e parâmetro de rede com a composição de cálcio em cada amostra. Além disso, foi possível visualizar a transição de fase em função da composição de cálcio da amostra e fazer a comparação entre difratogramas feitos em bancada com difratogramas feitos com luz síncrotron. Notamos que, para as etapas iniciais deste projeto, ambas condições são suficientes e fornecem dados de qualidade. Das análises de dados de DRX em função da temperatura, qualificamos tanto a variação dos parâmetros de rede com uma transição de uma fase ferroelétrica para uma fase paraelétrica, quanto o alargamento de alguns dos picos de difração em baixa temperatura sem ocorrer desdobramento de pico devido a transição de fase. Após essa primeira análise estrutural de transição de fase em função da composição e temperatura, temos como meta para a próxima etapa: 1) visualizar os domínios com o uso AFM e PFM, correlacionando com sua estrutura cristalina; 2) determinar a simetria cristalina que poderá seguir um modelo cristalográfico diferente descrito neste relatório, no limite de resolução no qual dados de difração de bancada se tornam insuficientes; e 3) quantificar efeitos de largura de picos de difração com e a dinâmica de movimento, tensão e estabilidade dos domínios ferroelétricos.

**Projeto:** Estudos comparativos entre a avaliação toxicológica por “Triagem Celular Multiparamétrica de Alto Conteúdo” (HCA) e pelo “Método de Redução do Tetrazolium” (MTT) de onze substâncias de proficiência em modelos de córnea in vitro.

**Bolsista PIBIC:** Mariana Rodrigues da Silva

**Universidade:** Universidade Estadual de Campinas

**Orientadora:** Talita Miguel Marin

**Unidade CNPEM:** LNBio

## RESUMO

A avaliação de segurança ocular de substâncias e produtos iniciou-se com o desenvolvimento do teste de Draize, que se baseia na aplicação da substância teste nos olhos de coelhos e observação dos efeitos sobre o globo ocular (córnea, conjuntiva, íris, etc). Este método é utilizado até os dias de hoje, porém sendo alvo de muitas críticas, devido às questões éticas financeiras e valor de preditivo. Neste contexto vários métodos in vitro para a avaliação de danos oculares foram desenvolvidos, sendo um dos principais o “Teste in vitro de curta duração para danos oculares – STE (OECD TG 491)” que consiste na exposição de células de córnea de coelho à substâncias testes em concentrações de 5 e 0,05% durante um período de 5 minutos, e posterior mensuração da viabilidade celular através do método de redução do tetrazolium (MTT). Sabendo que a maioria dos ensaios in vitro não são capazes de sozinhos categorizarem totalmente as substâncias químicas, este projeto tem como objetivo realizar estudos comparativos entre a avaliação de risco ocular realizada pelo teste STE clássico (MTT) e pelo STE modificado - “triagem celular multiparamétrica de alto conteúdo” (HCA). O teste STE modificado está sendo padronizado através da classificação correta de 11 substâncias de proficiência descritas no guia OECD TG 491(STE clássico). Os resultados obtidos até o momento demonstraram que substâncias que provocaram baixa viabilidade celular no STE clássico promoveram significativas alterações na morfologia celular no STE/HCA, como modificações da área do núcleo e da massa mitocondrial, enquanto as que provocaram alta viabilidade celular promoveram pouca ou nenhuma alteração fenotípica das células. Estes dados podem ser utilizados para identificar mecanismos relacionados à resposta celular, incrementando assim, o poder do teste STE de gerar informações toxicológicas, podendo impactar de forma significativa no processo de desenvolvimento de uma Abordagem Integrativa de Teste e Avaliação (IATA) para identificação de substâncias potencialmente tóxicas aos olhos, fornecendo informações adequadas e mais aprofundadas (AOP) para classificação e rotulagem de acordo com as Sistema Globalmente Harmonizado das Nações Unidas (GHS) e conseqüentemente implicar em ganho e melhora significativos de poder de predição de métodos in vitro.

**Projeto:** Cristalografia na linha de luz MANACA: aplicação de métodos alternativos de preparação da amostra e coleta de dados

**Bolsista PIBIC:** Silas Pontes de Almeida

**Universidade:** Universidade Estadual de Campinas (Unicamp)

**Orientador:** Andrey Fabricio Ziem Nascimento

**Unidade CNPEM:** LMLS

## RESUMO

A conformação estrutural dos materiais está intimamente ligada às suas propriedades. Isso é particularmente notável em proteínas, para as quais a estrutura tridimensional é extremamente importante à sua função. A cristalografia de raios X, nesse contexto, mostra-se uma ferramenta de alta resolução e eficaz na determinação estrutural de proteínas, viabilizando a elucidação de processos biológicos importantes, dentre eles, o transporte intracelular desempenhado por motores moleculares. As miosinas constituem uma superfamília de motores moleculares que utilizam filamentos de actina para converter a energia armazenada no ATP em movimento, promovendo processos como a contração muscular e o transporte intracelular. As miosinas V, por sua vez, fazem parte de uma classe bem conservada evolutivamente, que interage com cargas principalmente pelo domínio da cauda globular (GTD), localizado no C-terminal, orquestrando processos intracelulares como o transporte de vesículas, organelas e modulando vias de sinalização. A regulação da atividade dessas proteínas é um mecanismo vital para modulação desses processos celulares e está relacionada, entre outras coisas, à fosforilação do resíduo Ser1652 presente em um loop flexível (phospho-loop) no GTD das miosinas Va. Entender a conformação assumida pelo GTD, quando fosforilado, representaria um grande avanço no estudo funcional e molecular das miosinas de classe V. Existem, no entanto, alguns fatores limitantes intrínsecos à metodologia da cristalografia de raio X que precisam ser superados. A proteína alvo deve ser cristalizada (formar um monocristal adequado ao experimento de difração) o que, no contexto das macromoléculas, pode ser uma tarefa árdua. Estruturas flexíveis, como o phospho-loop, podem representar barreiras no processo de cristalização. Além disso, para determinação de um modelo de alta resolução, é necessário conhecer as fases das ondas difratadas que, normalmente, não podem ser inferidas diretamente a partir dos dados coletados e a utilização de métodos convencionais de faseamento, como substituição molecular, pode não ser efetiva na determinação da estrutura cristalográfica. Visando a superação desses obstáculos, durante os dois primeiros meses desse semestre, testes de eficiência e expressão foram realizados com o objetivo de determinar a melhor estratégia para a expressão de diferentes mutantes do GTD da miosina Va humana, incluindo mutantes fosfomiméticos (S1652E). A expressão em larga escala também já foi realizada. Os próximos desafios envolvem a purificação e cristalização dos mutantes visando a preservação do phospho-loop e a determinação suas respectivas estruturas a partir de metodologias de faseamento ab initio na linha de luz MANACA do Sirius.



**Projeto:** O uso da biotecnologia no biocontrole de fitopatógenos da cana-de-açúcar

**Bolsista PIBIC:** Maria Vitória Leite de Campos Rodrigues

**Universidade:** Pontifícia Universidade Católica de Campinas

**Orientador:** Juliana Velasco de Castro Oliveira

**Unidade CNPEM:** LNBR

## RESUMO

O etanol é um biocombustível produzido a partir da cana-de-açúcar e que tem potencial de atender à crescente demanda mundial por energia. No entanto, esta cultura é atingida por diversas doenças causadas por microrganismos que ocasionam perdas significativas em sua produtividade. Por outro lado, o uso de agroquímicos para o controle destes fitopatógenos pode causar diversos impactos ambientais, como a contaminação de águas, poluição do ar e a diminuição da saúde e fertilidade do solo. Neste cenário, o uso de microrganismos capazes de produzir compostos orgânicos voláteis (COVs) que atuem como antagonista de fitopatógenos é uma estratégia ambientalmente amigável. Os COVs microbianos são pequenas moléculas de natureza lipofílica derivadas de uma ampla gama de caminhos biossintéticos e seu uso no biocontrole de patógenos da cana-de-açúcar é promissor, pois dada a volatilidade, os COVs podem atuar longe do ponto de produção, mediando interações de organismos a curta e longa distância, sem a necessidade do microrganismo colonizar a planta. Dentre as doenças que acometem a cana-de-açúcar, uma das mais importantes é a podridão vermelha causada pelo fungo *Colletotrichum falcatum*, que causa o apodrecimento do tolete durante a germinação, manchas vermelhas nos colmos, lesões vermelhas na nervura das folhas e perda significativa do açúcar do caldo. Assim, o objetivo principal deste projeto foi obter pelo menos um microrganismo capaz de inibir o crescimento do *C. falcatum* por meio do COVs e identificar os possíveis metabólitos envolvidos. Deste modo, no primeiro semestre, foi feito o screening inicial de isolados bacterianos antagonistas, e 8 foram selecionados pois inibiram em cerca de 50% o crescimento do fungo. Em seguida, para testar o efeito antagonista sobre o fitopatógeno dos melhores isolados, testes com diferentes concentrações de células foram realizados, e verificou-se que quanto maior a concentração de bactérias, maior a inibição. Também foi avaliado se o meio de cultivo bacteriano pode interferir no efeito antagonista, e em dois dos três meios avaliados, as bactérias continuaram inibindo o fitopatógeno, o que mostra que a produção de COVs é dependente do meio de cultura. No segundo semestre, o efeito do CO<sub>2</sub> no sistema foi testado a fim de verificar se ele não seria o responsável pela inibição do fungo, e verificou-se que 3 isolados bacterianos inibiram o crescimento do fungo independentemente da quantidade de CO<sub>2</sub> presente. A identificação dos voláteis de um destes três isolados já havia sido feita previamente pelo grupo, assim 17 COVs sintéticos foram testados para verificar qual(is) seria(m) responsável(is) pela inibição do fungo, e 3 deles inibiram o fitopatógeno em mais de 80%. Ainda, foi realizada a extração e amplificação do fragmento 16S do DNA de um dos 3 isolados bacterianos, com o intuito de realizar a identificação da espécie do mesmo. Infelizmente, as atividades do projeto foram interrompidas devido à pandemia do novo coronavírus (COVID-19), e o

sequenciamento do gene 16S e identificação não foram realizados, bem como outras atividades previstas no projeto. Porém, como conclusão do mesmo, tem-se que bactérias são capazes de inibir o fitopatógeno *C. falcatum* por meio da produção de COVs, e o uso destas bactérias pode resultar em uma alternativa sustentável aos agroquímicos no combate a podridão vermelha na cana-de-açúcar.

**Projeto:** Identificação do mecanismo de ação de uma quinazolina com propriedades antimicrobianas sobre bactérias Gram-negativas

**Bolsista PIBIC:** Thiago Gaspar Inácio

**Universidade:** Universidade Estadual de Campinas (Unicamp)

**Orientador:** Dr. Celso Eduardo Benedetti

**Unidade CNPEM:** LNBio

## RESUMO

Tendo em vista a busca por moléculas com atividade antimicrobiana contra bactérias Gram-negativas, o LNBio vem sintetizando e testando compostos derivados de quinazolininas. Um desses compostos, chamado QX1, apresentou atividade bactericida contra várias espécies de *Xanthomonas*. Embora a atividade antimicrobiana de muitos derivados da quinazolinina seja conhecida, apenas dois principais mecanismos de ação para essas moléculas foram propostos na literatura, porém, os alvos primários de ação não são conhecidos. Portanto, o principal objetivo desse projeto é determinar o mecanismo de ação da quinazolinina QX1 em *Xanthomonas citri*, agente causal da doença cancro cítrico que afeta todas as variedades comerciais de citros. Para tanto, uma abordagem utilizando espectrometria de massas foi usada para identificar proteínas de *X. citri* cuja síntese foi aumentada na presença de QX1. A identificação dessas proteínas e o entendimento de suas funções biológicas poderão trazer pistas sobre o mecanismo de ação de QX1. Dessa forma, proteínas de *X. citri* induzidas por QX1 foram selecionadas como alvos diretos de ligação desse composto para estudos funcionais e estruturais. Esse relatório apresenta portanto uma descrição da função desses possíveis alvos e a estratégia de como esses alvos serão estudados.

**Projeto:** Estudos das subunidades do complexo Ragulator em cultura de células

**Bolsista PIBIC:** Paloma Messias Antunes

**Universidade:** Universidade Estadual de Campinas

**Orientador:** Juliana Helena Costa Smetana

**Unidade CNPEM:** LNBio

## **RESUMO**

A quinase mTOR, através do complexo mTORC1, promove o crescimento celular respondendo aos estímulos de fatores de crescimento, níveis de energia e aminoácidos. O complexo mTORC1 é ativado na superfície lisossomal, sendo ancorado pelas Rag GTPases, que por sua vez são mantidas na superfície lisossomal devido a sua interação com o complexo Ragulator. O Ragulator é um complexo proteico formado por 5 subunidades, denominadas LAMTOR 1-5 e também atua como fator de troca de nucleotídeos (GEF) para as Rag GTPases. A subunidade LAMTOR5 (HBXIP) apresenta duas isoformas: HBXIP long (18 kDa) e HBXIP short (11 kDa). As funções de cada subunidade no contexto celular ainda não são claramente distintas, portanto este trabalho visa resultados que ajudem a caracterizar cada isoforma. Este relatório contempla a 1) purificação de vetores de expressão das subunidades do complexo Ragulator e a padronização das transfecções transientes desses vetores em células HEK293-T; 2) cultivo de diversas linhagens celulares de mamíferos e análise da expressão endógena das duas isoformas da HBXIP nessas linhagens; 3) comparação de anticorpos comerciais de HBXIP. Os plasmídeos purificados foram utilizados nas transfecções transientes e as proteínas expressas foram detectadas por Western Blot. Além disso, o resultado das análises por SDS-PAGE e Western Blot dos extratos de diversas linhagens celulares cultivadas mostrou que a distribuição das isoformas de HBXIP não é homogênea entre as linhagens analisadas, sendo que a isoforma longa foi encontrada em maior quantidade na linhagem celular Vero. Portanto, essa linhagem poderá servir de modelo de estudo da função da isoforma longa da HBXIP. Comparando os anticorpos comerciais foi possível identificar um anticorpo seletivo para isoforma da HBXIP long, com potencial de ser uma nova ferramenta de caracterização da isoforma longa.

**Projeto:** Avaliando a distribuição mineral e orientação cristalográfica como possíveis bioassinaturas em microbialitos

**Bolsista PIBIC:** Marcelo de Paula Fonseca

**Universidade:** Pontifícia Universidade Católica de Campinas - PUC-Campinas

**Orientador:** Douglas Galante

**Coorientadora:** Flavia Callefo

**Unidade CNPEM:** LNLS

## **RESUMO**

A capacidade dos microrganismos de induzir e controlar a mineralização revolucionou a produção mineral da crosta terrestre, além de possibilitar a sua evolução e sobrevivência no planeta. Antes do Neoproterozóico (entre 1 bilhão a 541 milhões de anos atrás) é muito difícil a detecção de bioassinaturas morfológicas, como células e microfósseis bacterianos, mas bioassinaturas mais resistentes, como biominerais, podem ser preservados. Os microbialitos são estruturas organossedimentares produzidas a partir da interação de microrganismos com a dinâmica física, química e sedimentar do meio. São potenciais hospedeiros destas bioassinaturas mais resistentes ao tempo geológico e seus efeitos. Este trabalho visa explorar, através da técnica de difração de elétrons retro-espalhados (EBSD), a presença, distribuição e possível orientação cristalográfica preferencial de biominerais que podem estar contidos em microbialitos, para então avaliar a possibilidade de utilizar este parâmetro como um sinal de biogenicidade de rochas antigas.

**Projeto:** Preparo e Caracterização de Materiais Híbridos de Nanocelulose e Materiais Condutores

**Bolsista PIBIC:** Gabriele Polezi

**Universidade:** Universidade Estadual de Campinas - Unicamp

**Orientador:** Dra. Juliana da Silva Bernardes

**Unidade CNPEM:** LNNano

## **RESUMO**

Neste trabalho, foram preparadas espumas anisotrópicas compostas por nanofibras de celulose catiônica (CNF-catiônica) e oxidada (CNF-oxidada) e carbon black (CB), a partir de liofilização. As espumas híbridas foram caracterizadas por microscopia eletrônica de varredura (MEV), ensaios de compressão e medidas de condutividade elétrica. O tamanho dos poros e a distribuição das nanopartículas de CB ao longo da rede de CNF foram analisados por MEV. O aumento da concentração de partículas condutora no material híbrido aumenta consideravelmente a condutividade em função da compressão do material. As nanopartículas de CB desempenham o papel de um componente condutor nos compósitos CNF/CB, podendo formar uma rede interconectada com preenchimento contínuo na rede de CNF, o que leva ao aumento de condutividade do material. Além disso, a presença de CB na espuma aumenta a espessura das paredes dos poros, o que melhora de maneira significativa suas propriedades compressivas.

**Projeto:** Avaliação do efeito das nanoestruturas de celulose aplicadas como reforço em nanocompósitos biodegradáveis

**Bolsista PIBIC:** Júlia Batista Grillo Prado

**Universidade:** Pontifícia Universidade Católica de Campinas

**Orientador:** Rubia Figueredo Gouveia

**Unidade CNPEM:** LNNano

## RESUMO

A busca por materiais biodegradáveis e suas aplicações na produção de novos materiais sustentáveis é um assunto de bastante relevância científica, tecnológica e sócio-econômica. Materiais feitos de nanocompósitos biodegradáveis estão sendo estudados para uma melhoria ambiental e econômica, por conta de suas propriedades intrínsecas e favoráveis. Os nanocristais e nanofibrilas de celulose (CNC e CNF, respectivamente) são recursos renováveis bastante atrativos para serem utilizados junto a polímeros biodegradáveis devido as suas estruturas altamente cristalinas, tornando-se um material promissor na aplicação como reforço em polímeros com baixas propriedades mecânicas. O presente trabalho consiste na produção de nanocompósitos de poli (butileno adipato-co-tereftalato, PBAT) com CNC e CNF, a fim de compará-los e caracterizá-los, verificando suas propriedades mecânicas, para posterior análise da biodegradação do material otimizado no solo. Os nanocristais de celulose são obtidos comercialmente, já as nanofibrilas de celulose são obtidas por meio de tratamentos químicos do bagaço da cana-de-açúcar, como a biorreação da biomassa para extração de celulose (polpação), branqueamento e submissão da polpa em um Microfluidizador para a produção das nanoestruturas. Para melhorar a afinidade entre o PBAT e a CNC no nanocompósito biodegradável, é necessário realizar a modificação química na superfície dos nanocristais pelo método de acetilação, já que a carga possui caráter hidrofílico e as matrizes poliméricas possuem caráter hidrofóbico. Posteriormente, com os nanocompósitos preparados (tanto com PBAT puro, quanto com PBAT e as nanoceluloses), serão realizadas as análises de suas propriedades mecânicas e morfológicas como carga de reforço no nanocompósito, por um ensaio de tração para comparar os valores apresentados nesses ensaios, verificando a influência da modificação química da nanocelulose nas propriedades finais do nanocompósito. Além disso, determinar as melhores condições de formulação do nanocompósito para posterior teste de biodegradação em solo será investigado, sendo possível prever novos materiais, que poderão ser aplicados em embalagens biodegradáveis.

**Projeto:** Síntese de derivados de quinazolinas com atividade antimicrobiana e identificação do mecanismo de ação

**Bolsista PIBIC:** Bruna Butke de Souza

**Universidade:** Unicamp – Universidade Estadual de Campinas

**Orientadora:** Silvana Aparecida Rocco

**Unidade CNPEM:** LNBio

## RESUMO

O desenvolvimento de novos agentes biológicos é uma necessidade constante, dado o decréscimo observado no número total de novos agentes antimicrobianos aprovados pelo FDA, a necessidade de agentes que atuem por mecanismos de ação diferentes aos dos fármacos em uso, as altas taxas de resistência microbiana e diversas outras razões. Assim, o estudo para a obtenção de novos compostos que exibem atividade antimicrobiana torna-se fundamental. Dentre esses, o núcleo quinazolina é encontrado em vários dos fármacos comercializados atualmente. As quinazolinonas e quinazolininas correspondem a duas classes de moléculas orgânicas heterocíclicas aromáticas de intensa atividade biológica e, portanto, são de grande interesse para a química medicinal. O mecanismo de ação de alguns compostos derivados dessas moléculas já foi elucidado, porém, no que diz respeito às quinazolininas com atividade antimicrobiana, apenas dois alvos primários de ação dessa classe de moléculas têm sido reportados na literatura. O LNBio já vem sintetizando e testando derivados de quinazolininas, com o objetivo de encontrar moléculas com propriedades antimicrobianas contra espécies de *Xanthomonas*. Um derivado de quinazolinina com excelente atividade antimicrobiana, denominado QX1, foi identificado anteriormente pelo laboratório e demonstrou atividade bactericida contra várias espécies de *Xanthomonas*, incluindo *X. citri*, a semelhança de tetraciclina. O projeto objetiva determinar o mecanismo de ação do composto QX1 em *X. citri*, bactéria que está sendo usada como organismo modelo. Também é de interesse realizar a síntese de uma molécula quimera, QX1-Linker-Biotina, o composto QX1 biotinilado. Essa molécula será utilizada para a construção da matriz de afinidade com uma resina de estreptavidina e incubada com proteínas totais de *Xanthomonas citri*, para identificação das proteínas que ficarão retidas apenas na matriz contendo a quimera. Técnicas de espectrometria de massas serão utilizadas para identificar essas proteínas e aumentar as chances de sucesso dessa técnica de “fishing”, a fim de identificar proteínas da bactéria que possam se ligar ao composto QX1.



**Projeto:** Implementação de algoritmos para Tomografia de Campo Escuro por Varredura

**Bolsista PIBIC:** André Antonio Martins Chagas e Silva

**Universidade:** Universidade Estadual de Campinas (UNICAMP)

**Orientador:** Carlos Sato Baraldi Dias

**Unidade CNPEM:** LNLS

## **RESUMO**

Recentemente avanços em microscopia por raios-X tem permitido a formação de imagens no que é conhecido como contraste de fase. Dentre elas, uma das mais simples formas de microscopia de raios-X, a STXM (Scanning Transmission X-ray Microscopy), também pode ser devidamente analisada para a recuperação da informação de fase. Nesse sentido, o presente projeto tem por objetivo introduzir a modelagem física necessária para reconstruir imagens de projeção por contraste de fase e amplitude a partir da técnica de STXM. Além disso, a partir destas mesmas projeções, reconstruir o volume de uma amostra, utilizando o método de tomografia. Por fim, este projeto se encaixa nos desenvolvimentos para a linha Carnaúba do projeto Sirius onde a obtenção de diferentes contrastes no imageamento de amostras permite uma melhor interpretação dos resultados pelo usuário.