20° Congresso Interno de Iniciação Científica do Programa PIBIC no CNPEM / IV CEC 2022

CNPEM
PIBIC
PROGRAMA INSTITUCIONAL DE BOLSAS DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA

LIVRO DE RESUMOS

2022

1. Apresentação

É com enorme satisfação que realizamos o 20° Congresso Interno do Programa Institucional de Bolsas de Iniciação Científica (PIBIC) do Centro Nacional de Pesquisa em Energia e Materiais (CNPEM). O Congresso Interno do PIBIC foi incorporado ao Congresso dos Estudantes do CNPEM (CEC). A quarta edição do CEC (IV CEC 2022) ocorreu entre os dias 22 e 24 de novembro, contemplando as apresentações dos bolsistas de iniciação científica, estagiários e alunos de pós-graduação dos quatro laboratórios nacionais do CNPEM. Ao todo, o evento reuniu 382 participantes, com 128 apresentações de pôsteres, 47 apresentações orais, além das sessões plenárias.

Os trabalhos dos bolsistas PIBIC, que englobam diferentes áreas do conhecimento como física de aceleradores, materiais nano-estruturados, estrutura e função de proteínas e prospecção de compostos biorrenováveis estão reunidos a seguir 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.

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 Biorrenovaveis (LNBR).

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 resolvem cursar a pós-graduação; muitos deles continuam trabalhando nos laboratórios do CNPEM enquanto outros atuam 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,

Aline Ribeiro Passos
Coordenadora do PIBIC – CNPEM

3. Comitês de avaliação 2022

Comitê Interno

Dra. Juliana Helena Costa Smetana - LNBio
Dr. Mathias Strauss - LNNano
Dra. Juliana Velasco de Castro Oliveira - LNBR
Dr. Julio Criginski Cezar - LNLS

Comitê Externo

Prof. Dr. Abner Siervo

Instituto de Física Gleb Wataghin, Universidade Estadual de Campinas (UNICAMP)

Profa. Dra. Clarice Weis Arns

Instituto de Biologia, Universidade Estadual de Campinas (UNICAMP)

Prof. Dr. Roger Frigerio Castilho

Faculdade de Ciências Médicas, Universidade Estadual de Campinas (UNICAMP)

Prof. Dr. Varlei Rodrigues

Instituto de Física Gleb Wataghin, Universidade Estadual de Campinas (UNICAMP)

4. Resumos

Título: Simulações de multipletos atômicos na interpretação de medidas de espectroscopia de absorção de raios X: o caso do Ti4+ no BaTiO3

Bolsista PIBIC: Alessandra Caroline Siqueira Silva
Universidade: Universidade Estadual de Campinas
Orientador: Dr. Julio Criginski Cezar
Unidade CNPEM: LNLS

RESUMO:

Ferroelétricos são materiais que possuem uma polarização elétrica espontânea e que permanecem polarizados mesmo após a retirada do campo elétrico externo. O BaTiO3 é o ferroelétrico mais estudado, no entanto ainda faltam dados experimentais da estrutura eletrônica, que podem contribuir para eventualmente otimizar suas propriedades. A técnica de espectroscopia de absorção de raios X (XAS) pode fornecer esse tipo de resultado através da comparação de resultados experimentais com simulações dos espectros. O fato de óxidos em geral apresentarem ligações químicas do tipo iônicas, permite que espectros de absorção de raios X nesses materiais possam ser interpretados pela teoria de multipletos atômicos. O objetivo deste trabalho é simular os espectros de absorção de raios X nas bordas L23 do titânio no BaTiO3. Esses resultados serão o ponto de partida para futuras medidas de absorção de raios X a serem realizadas no síncrotron SIRIUS.

Título: Propriedades elétricas de filmes finos de Mn3Ge crescidos por epitaxia de feixes moleculares.

Bolsista PIBIC: Beatriz Dalcin Vieira
Universidade: Universidade Estadual de Campinas - Unicamp
Orientador: Dr. Pedro Schio de Noronha Muniz
Unidade CNPEM: LNLS

RESUMO:

O Mn3Ge chama a atenção pois apesar do elevado valor de efeito Hall anômalo continua sendo um composto AFM (antiferromagnético), ou seja, um bom condutor que está menos suscetível aos efeitos de campos magnéticos externos. O projeto pretende o crescimento epitaxial de filme fino de Germanido de Manganês sobre um substrato de Titanato de Estrôncio, e posterior estudo das propriedades elétricas e magnéticas do composto de Heusler. O crescimento será através da MBE (Molecular Beam Epitaxy) utilizando técnicas como sputtering, annealing, LEED, RHEED, entre outras. Até o momento realizamos estudos com o sputtering e com o LEED para entender melhor o posicionamento da amostra e principalmente de seu centro, analisando os dados através das derivadas dos pontos e dos gráficos gerados pelos resultados dos processos e pelas derivadas, além disso também foi feito a preparação do substrato, dimensionando-o, limpando-o e prendendo-o à uma placa de metal para que este pudesse ser colocado no equipamento.

Título: Avaliação do domínio C-terminal da Agrina e seus parceiros de interação como alvos terapêuticos em câncer de boca.

Bolsista PIBIC: Bianca Pasquotto Batista
Universidade: Universidade Estadual de Campinas - Unicamp
Orientador: Dra. Adriana Paes Leme
Unidade CNPEM: LNBio

RESUMO:

A causa do CEC oral é dada por um conjunto de fatores intrínsecos e extrínsecos que atuam em sinergia e levam ao desenvolvimento da doença. Em relação aos fatores extrínsecos podemos citar como principais o tabagismo e o alcoolismo, além das infecções por HPV ou sífilis e a exposição à radiação ultravioleta. Os fatores intrínsecos estão principalmente relacionados a fatores genéticos e epigenéticos que levam a alterações como modificação na expressão de genes relacionados a supressão e promoção tumoral (proto-oncogenes e supressores) e relacionadas ao metabolismo da glicose, absorção de ferro, e outros. O tratamento do CEC oral é realizado principalmente pela ressecção cirúrgica do tumor primário associada à quimioterapia e radioterapia. Atualmente, somente três terapias alvo são aprovadas pelo FDA para tratamento do CEC oral, incluindo o Cetuximab, um anticorpo humanizado que tem como alvo o EGFR3, e as drogas Pembrolizumab e Nivolumab, ambas imunoterápicos inibidores de PD-1. No entanto, a sobrevida em 5 anos desses pacientes ainda permanece baixa, não excedendo 50% dos casos, e novas terapias alvo são necessárias para auxiliar no manejo do CEC oral. Dedicados não apenas à identificação do conjunto de proteínas de uma determinada célula, tecido ou fluido, os métodos de proteômica mais atuais buscam quantificar, compreender modificações estruturais, interações, distribuição espacial e compartimentalização das proteínas, entre outros aspectos. A aplicação de métodos proteômicos pelo nosso grupo vem contribuindo significativamente na compreensão de mecanismos envolvidos no desenvolvimento de câncer oral in vitro, in vivo, em modelos animais, e utilizando amostras de tecido ou saliva de pacientes com CEC oral. Todas essas informações podem eventualmente auxiliar na proposição de alvos terapêuticos e marcadores de diagnóstico e prognóstico, que possam aprimorar a decisão clínica para as modalidades de tratamento e, com isso, melhorar a sobrevida e qualidade de vida dos pacientes. Ao final do projeto esperamos validar o complexo formado entre o domínio C-terminal da Agrina e seus parceiros pela combinação de diferentes metodologias e assim determinar a interface de interação desse complexo. Em seguida, será realizado o desenho racional de peptídeos ou anticorpos que possam contribuir para interferir na formação desse complexo e que possam posteriormente ser utilizados para desenvolvimento de novas estratégias de intervenção terapêutica na doença.

Título: Avaliação da estabilidade de bio-óleos de lignina em diferentes condições de armazenamento

Bolsista PIBIC: Gabriel Ribeiro dos Santos Coelho
Universidade: Universidade Estadual de Campinas - Unicamp
Orientador: Dr. George Jackson de Moraes Rocha
Unidade CNPEM: LNBR

RESUMO:

A lignina é uma macromolécula fenólica e pode ser utilizada como precursora para obtenção de aromáticos monoméricos. No processo de despolimerização hidrotérmica uma das frações geradas, o bio-óleo, apresenta altos percentuais de fenólicos monoméricos. O bio-óleo apresenta composição heterogênea sendo composto por ácidos, álcoois, aldeídos, cetonas etc. Essa mistura de compostos polares e apolares com distintos grupos funcionais pode resultar em reações secundárias, como esterificação e polimerização, e alterar o perfil composicional do bio-óleo durante o tempo de armazenamento. Nesse contexto, a avaliação da estabilidade do bio-óleo e seleção da melhor condição de armazenamento se torna trivial tanto para aplicações como para fins analíticos. Por conseguinte, o projeto visa monitorar e avaliar a composição físico-química de amostras de bio-óleo frente a distintas condições de armazenamento. O bio-óleo foi submetido a variações de tempo de armazenamento, temperatura, aditivos e incidência de luz. A composição dos bio-óleos para avaliação de estabilidade foi monitorada através das técnicas analíticas de cromatografia por permeação em gel (GPC), cromatografia gasosa acoplada à espectrometria de massas (GC-MS) e ressonância magnética nuclear (RMN).

Título: Caracterização biofísica dos mutantes acetil-miméticos de PPARg, no contexto da obesidade e resistência à insulina

Bolsista PIBIC: Giovanna Blazutti Elias
Universidade: Universidade São Francisco - USF
Orientador: Dra. Ana Carolina Migliorini Figueira
Unidade CNPEM: LNBio

RESUMO:

Os receptores nucleares (RNs) são proteínas associadas a processos metabólicos. Eles estão sob o controle de proteínas efetoras de modificações pós-traducionais (MPT). O ativador de proliferação de peroxissomos gama (PPARγ) participa da manutenção da homeostase metabólica, sendo regulador mestre da adipogênese e do metabolismo da glicose. A proteína correguladora SIRT1, uma desacetilase dependente de NAD, desacetila as lisinas 268 e 293 do PPARγ e induz o browning do tecido adiposo branco, processo que reduz a resistência à insulina. Apesar disso, os mecanismos moleculares de interação entre SIRT1 e PPARγ ainda são desconhecidos. Portanto temos como objetivo a produção de mutantes acetil-miméticos e desacetil-miméticos (que bloqueiam a acetilação in vivo) da Lis268 e Lis293 (K268 e K293) do PPARγ para posterior caracterização biofísica, avaliando se sua mutação afeta a estrutura secundária e terciária, bem como em sua termodinâmica. Esses parâmetros foram determinados por Dicroísmo Circular (CD), Espalhamento Dinâmico de Luz (DLS) e pela estabilidade térmica por fluorescência intrínseca. Para mimetizar os estados de acetilação e desacetilação, o aminoácido lisina foi substituído por glutamina (Q) e arginina (R) respecitvamente, por mutagênese sítio-dirigida utilizando domínio de ligação ao ligante do receptor (LBD). O Rh e %Pd das amostras K268Q e K293Q foram 2,80 nm ± 0,35/12,4%; 2,68 nm ± 0,14/5,2% respectivamente, aproximado ao do PPARγ selvagem (WT) 2,68 nm ± 0,24/8,8%. O CD analisa a estrutura secundária da proteína e a Tm encontrada a partir da curva a 222 nm foi de 46,53°C ± 0,67 para K268Q, 45,41ºC ± 0,15 para K268R, 44,09°C ± 0,68 para K293Q, 43,52ºC ± 1,15 para K293R e 45,11°C ± 0,42 para PPARγ WT. Através da fluorescência intrínseca, que analisa a Tm da estrutura terciária, o PPARγ WT foi 52,2ºC ± 0,21, para K268Q foi 52,4ºC; K293Q foi 51,26ºC ± 0,04; K268R de 53,06ºC ± 0,04 e para K293R 53,4ºC. As análises confirmam a pureza da proteína, portanto a diferença de temperatura de desnaturação encontrada entre as amostras comparadas ao WT está relacionada a capacidade de modificação da estrutura causada pela mutação. Ensaios estruturais que investigam as mutações miméticas são base para entender as formas de modulação do receptor a partir de ensaios funcionais, visando a produção de novas moléculas capazes de coordenar a interação do PPARγ com seus moduladores, para o tratamento de pacientes resistentes à insulina.

Título: Estudos de vias metabólicas pelos quais compostos orgânicos voláteis bacterianos de interesse para a agricultura são produzidos

Bolsista PIBIC: Giovanna Gabriele dos Santos Goveia
Universidade: Universidade Estadual de Campinas - Unicamp
Orientador: Dra. Juliana Velasco de Castro Oliveira
Unidade CNPEM: LNBR

RESUMO:

A biotecnologia aplicada à agricultura tem trazido diversos benefícios para o setor e, por consequência, para a sociedade e economia, já que o Brasil é um país que se destaca no cenário agrícola e está entre os maiores produtores mundiais de culturas como a cana-de-açúcar (cana) cuja importância se estende para além da produção de biocombustível e açúcar sendo uma biomassa importante para produção de diversos bioprodutos. Entretanto, esta biomassa é constantemente desafiada por estresses bióticos como as doenças causadas por microrganismos. Uma forma ambientalmente amigável de prevenir e tratar doenças que afetam a cana como a escaldadura das folhas, gomose, podridão abacaxi e a doença carvão é através do biocontrole. Das formas que este controle biológico pode ser feito, nosso grupo estuda bactérias que produzem pequenas moléculas sinalizadoras denominadas compostos orgânicos voláteis (COVs), que podem inibir o crescimento dos fitopatógenos causadores de doenças como: Xanthomonas albilineans (escaldadura das folhas), Xanthomonas axonopodis pv. Vasculorum (gomose), Thielaviopsis ethacetica (podridão abacaxi) e Sporisorium scitamineum (doença carvão). Visando produzir um organismo geneticamente modificado (OGM) que produza de forma constitutiva e em grandes quantidades um bioativo capaz de inibir tais fitopatógenos, é necessário conhecer suas respectivas vias metabólicas. Assim, temos como objetivos: (i) realizar uma busca literária sobre as vias metabólicas dos COVs que inibem o maior número de fitopatógenos investigados no grupo até o momento; (ii) escolher uma ou mais moléculas-alvos e desenhar possíveis alterações metabólicas necessárias para aumentar a produção destes compostos, (iii) determinar quais ferramentas de edição gênica serão utilizadas neste processo, assim como o microrganismo alvo; (iv) iniciar a construção deste OGM. Dos 17 COVs validados como inibidores, 7 inibem ao menos três dos quatro fitopatógenos estudados no grupo. Destes 7, foi possível identificar a via metabólica de produção de quatro compostos: 2-Undecanone, Álcool Benzílico, Dimetil Dissulfeto e 2-Nonanone. A via produtora de Álcool Benzílico foi escolhida como molécula-alvo utilizando o fenilpiruvato como substrato e o microrganismo escolhido foi a bactéria Escherichia coli. Como alternativa para produção de um OGM com potencial biotecnológico, também foi identificada a via de produção do 2,3-Butanediol (2,3-BDO) dado seu potencial para a indústria de biotecnologia agrícola.

Título: Transient response and neuromorphic behavior of liquid-gated transistors based on reduced oxide graphene

Bolsista PIBIC: Guilherme Segolin Selmi
Universidade: Universidade Estadual de Campinas - Unicamp
Orientador: Dr. Rafael Furlan de Oliveira
Unidade CNPEM: LNNano

RESUMO:

The human brain is a machine created by nature able to do approximately 10^15 operations in parallel, using for this around 20 fJ per operation [1]. Devices that can simulate the electrical stimuli produced inside the brain are classified as neuromorphic. One important class of neuromorphic devices, called synaptic, must be able to simulate the behavior of the biological synapses, that are responsible for the modulation of the electrical stimulus that are passed from one neuron to another. The artificial synapses, besides their use in artificial neural networks, may work to discriminate the concentration of molecules, such as dopamine [2], and as motion controller of living beings, like the open of the nodules of the Dionaea muscipula [3]. In the present work electrolyte gated transistors (EGTs) of reduced oxide graphene (rGO) were fabricated using the polyelectrolyte polydiallyldimethylammonium chloride (PDDA) as an adhesive layer for rGO and their electrical response were characterized. More specifically, we measured the transfer curve to confirm the proper function of the device as an ambipolar transistor and we applied square pulses of voltage, known as pre-synaptic, to the gate of the transistor, keeping the channel voltage constant. The short response of the current (less than a minute) was evaluated for different number of pulses (1 – 50 pulses), varying the period (10 ms – 20s) and the time interval between the stimulus (10 ms – 10s). EGTs of rGO showed excitatory postsynaptic current (EPSC) in the range of few seconds. Finally, the change of the current source-drain was analyzed with different electrolytes (KCl, LiCl and a commercial conductor gel from Mercur), showing a possible interaction between the ionic species and the surface of rGO of the transistor.
References: 1 Wan, Q.; Sharbati, M. T.; Erickson, J. R.; Du, Y.; Xiong, F. Emerging Artificial Synaptic Devices for Neuromorphic Computing. Adv. Mater. Technol. 2019, 4 (4), 1900037. https://doi.org/10.1002/admt.201900037. 2 Giordani, M.; Sensi, M.; Berto, M.; Di Lauro, M.; Bortolotti, C. A.; Gomes, H. L.; Zoli, M.; Zerbetto, F.; Fadiga, L.; Biscarini, F. Neuromorphic Organic Devices That Specifically Discriminate Dopamine from Its Metabolites by Nonspecific Interactions. Adv. Funct. Mater. 2020, 30 (28), 2002141. https://doi.org/10.1002/adfm.202002141. 3 Harikesh, P. C.; Yang, C.-Y.; Tu, D.; Gerasimov, J. Y.; Dar, A. M.; Armada-Moreira, A.; Massetti, M.; Kroon, R.; Bliman, D.; Ol

Título: Utilizando raios X para estudar a estrutura eletrônica de materiais magnéticos
Bolsista PIBIC: João Marcos Carneiro de Araújo
Universidade: Universidade Estadual de Campinas - Unicamp
Orientador: Dr. Thiago José de Almeida Mori
Unidade CNPEM: LNLS

RESUMO:

Esta apresentação expõe o progresso do projeto "Utilizando raios X para estudar a estrutura eletrônica de materiais magnéticos". A área principal desse projeto é a magnônica, cujo objeto de estudo é as ondas de spin e suas aplicações em dispositivos. Entre os principais resultados, foram desenvolvidas as bases teórico-computacionais para os estudos dessas excitações com raios X, programas de simulação de propagação de ondas de spin e de excitações de Stoner. Os programas desenvolvidos serão utilizados para simular a propagação de ondas de spin em filmes metálicos magnéticos e para melhor entender o decaimento dessas ondas em excitações de Stoner. Posteriormente, o projeto busca utilizar o equipamento RIXS da linha IPE para realizar experimentos em magnônica de THz e comparar as previsões teóricas dos programas desenvolvidos com resultados experimentais.

Título: Modelagem e simulação da fluidodinâmica de cristais de proteínas em dispositivos microfluídicos

Bolsista PIBIC: João Gabriel Stefani Antunes
Universidade: Universidade Estadual de Campinas - Unicamp
Orientador: Dr. Evandro Ares de Araujo
Unidade CNPEM: LNLS

RESUMO:

A cristalografia de raio X é uma técnica que permite a determinação experimental de parâmetros da estrutura de moléculas complexas em resolução atômica. No entanto, na cristalografia clássica, a coleta de dados é limitada pela fragilidade dos cristais e também pelas criotemperaturas necessárias. De modo a contornar isso, a construção de fontes de laser de elétrons livres de raio X trouxe o adventodacristalografia em série de femtossegundos, possibilitando experimentos em temperaturas ambiente e uso de cristais muito menores. A linha de luz MANACÁ (acrônimo de MAcromolecular Micro and Nano CrystAllography) será a primeira estação do Sirius dedicada à difração de raios X para macromoléculas biológicas (MX), fazendo uso da cristalografia serial. Inicialmente, teve-se como objetivo conduzir simulações de fluidodinâmica em sistemas microfluídicos candidatos a porta amostras na linha MANACÁ dedicados ao carreamento de cristais. Para tal, foi estudada uma geometria em T focalizadora de fluxo de amostra de proteína, tendo como principais intuitos, o estudo da estabilidade do jato, do efeito de mistura induzido entre ligante e amostra e da física envolvida no efeito de focalização. Por fim, foi feito um estudo sobre a transmissibilidade de partículas para duas geometrias distintas.

Título: Dosimetria e efeitos biológicos de radiação ionizante na linha de micro e nano tomografia (MOGNO) do Sirius.

Bolsista PIBIC: Jullyana Mendes Vasconcelos
Universidade: Universidade Federal de São Carlos - UFSCAR
Orientador: Dr. Murilo de Carvalho
Unidade CNPEM: LNBio

RESUMO:

A linha de micro e nano tomografia (MOGNO) do Sirius será capaz de realizar medidas de tomografia com zoom e resolvidas no tempo, graças ao alto fluxo de fótons proporcionado pelo novo acelerador e devido ao feixe cônico de raios X providenciado pela óptica da linha de luz. Essas características viabilizarão a aquisição de imagens 3D de regiões específicas e até de corpo inteiro de pequenos animais. Objetivou-se, na primeira parte do projeto, simular a exposição de dosímetros ao feixe da linha de luz MOGNO em sua condição óptica final. Na segunda parte do projeto, objetivou-se simular a taxa de dose do gerador de raios X Mini-X2 com e sem filtro e padronizar o preparo de amostras para irradiação no Mini-X2 e na linha de luz MOGNO. As simulações do feixe da MOGNO em sua condição final foram realizadas com o código FLUKA, considerando três diferentes tipos de dosímetros, as condições de alta e baixa energia da linha de luz e duas distâncias do foco. A maior taxa de dose obtida pelas simulações foi de (4,97 ± 0,03) Gy/s, com dosímetro do tipo OSLD, na condição de baixa energia e a 6 m do foco. A menor taxa de dose obtida foi de (254 ± 5) µGy/s, com dosímetro de alanina, em alta energia e a 26 m do foco. Os resultados são correspondentes ao esperado, dado o alto fluxo de fótons proveniente da linha de luz MOGNO. A taxa de dose do Mini-X2 foi obtida através de simulações com o software SpeckCalc, que retornou um valor de aproximadamente 3,02 Gy/h com 70 kV, 140 µA e a 30 cm do foco na condição sem filtro e de 0,31 Gy/h com filtro de 2 mm de Al. Os resultados são correspondentes ao esperado, dado o baixo fluxo de fótons da fonte. Para o preparo de amostras, utilizou-se a linhagem de células HaCaT a fim de verificar se uma composição de meio de cultura e agarose poderia permitir que as células ficassem dispostas em placas na vertical e fora da incubadora e ainda assim permanecessem hidratadas e nutridas. Comparou-se com os controles experimentais células mantidas 2h e 19h dentro e fora da incubadora, com e sem agarose. Foi utilizado o ensaio de resazurina para comparação da viabilidade das células e obteve-se, em todas as condições testadas, $p > 0,05$, indicando que não houve variação significativa entre os grupos analisados e o controle. Isso significa que qualquer dano causado às células expostas nessas condições será oriundo apenas da exposição à radiação. Pretende-se expor as células às duas fontes de raios X para comparar as diferenças dos danos biológicos.

Título: Estudo da toxicidade de α-olefinas em leveduras Saccharomyces Cerevisiae
Bolsista PIBIC: Laura de Freitas Naves
Universidade: Universidade Estadual de Campinas - Unicamp
Orientador: Dr. Wesley Cardoso Generoso
Unidade CNPEM: LNBR

RESUMO:

Nesta primeira fase do projeto buscou-se determinar a concentração inibitória de alcenos de cadeia curta e média (9 e 15 carbonos) para cinco espécies de leveduras. Os droptests foram realizados com duas linhagens distintas de S. cerevisiae, PE-2 (utilizada industrialmente para a produção de biocombustíveis) e CEN.PK (usada popularmente em estudos laboratoriais), em meio de cultura mínimo padrão (SCD). Os resultados preliminares indicaram as concentrações de 5 mM para o alceno C15 e 0,75 mM para C9. Estes valores foram então utilizados para os testes iniciais com as demais espécies (Metschnikowia pulcherrima, Rhodosporidium toruloides, Schwanniomyces occidentalis e Yarrowia lipolytica), porém os dados obtidos não foram conclusivos. Desta forma, optou-se pela substituição do meio de cultura para YPD (meio completo para leveduras), de modo a descartar a influência de possíveis insuficiências nutricionais. A tolerância das células aos compostos se mostrou maior nestas condições, chegando a 10 mM de C15 e 2 mM de C9, entretanto as concentrações máximas suportadas ainda estão sendo determinadas.

Título: Avaliação da incorporação de metais e elementos terras raras (REEs) em carbonatos produzidos abioticamente.

Bolsista PIBIC: Letícia Bonavita Mambrini Frezzarin
Universidade: Pontifícia Universidade Católica de Campinas - PUC Campinas
Orientador: Dr. Douglas Galante
Unidade CNPEM: LNLS

RESUMO:

Os minerais de carbonatos de cálcio fazem parte do ciclo do carbono na Terra há aproximadamente 541 milhões de anos. Existem em diversas fases e estão presentes principalmente em ambientes marinhos atuais ou pregressos. A importância do estudo de carbonatos é dada por suas diversas aplicações que abrangem a ciência de base até aplicações econômicas. São formados por processos naturais ou pela biomineralização, feita por ou com auxílio de microrganismos. Esses minerais, quando expostos a elétrons, ou feixe de fótons como a luz visível e os raios X, e quando ligados a alguns elementos químicos e terras raras (REEs), emitem luminescência. O presente trabalho tem como objetivo estudar a emissão de luminescência em carbonatos produzidos abioticamente, com análises qualitativas das amostras a partir de espectroscopia Raman e espectrofluorimetria. Ademais, serão estudos por difração de raio X, microscopia eletrônica de varredura e espectroscopia de energia dispersiva, foram usados para identificar a mineralogia e a morfologia das partículas precipitadas.

Título: Efeito hemolítico de óxido de grafeno e seu híbrido com nanopartículas de prata após interação com proteínas plasmáticas

Bolsista PIBIC: Nathalia Cristine Lima Azevedo
Universidade: Centro Universitário Metrocamp Wyden - UNIMETROCAMP
Orientador: Dr. Diego Stéfani Teodoro Martinez
Unidade CNPEM: LNNano

RESUMO:

O Óxido de Grafeno (GO) é um material 2D promissor no desenvolvimento de novos produtos que, devido suas propriedades físico-químicas pode ser funcionalizado com outras nanopartículas (NPs) e biomoléculas. Por exemplo, a funcionalização de GO com NPs de prata (GO-AgNPs) gera um material híbrido de alta performance antimicrobiana, muito interessante para aplicações biomédicas. Portanto, é necessário avaliar a interação do GO com componentes sanguíneos, uma vez que que o sangue é a porta de entrada ao corpo humano e principal substrato utilizado em plataformas de detecção biológica. Dessa forma, o objetivo deste trabalho foi avaliar atividade hemolítica do GO e GO-AgNPs na ausência e presença da corona de proteínas plasmáticas (denominado P@GO e P@GO-AgNPs), bem como caracterizar as mudanças de superfície dos materiais antes e depois da formação da corona. A topografia por microscopia de força atômica (AFM) demonstrou discreto aumento na espessura e rugosidade da superfície de GO-AgNPs (1,2 nm e 0,5 ± 0,2 nm, respectivamente) em relação ao GO (1,0 nm e 0,4 ± 0,1 nm). Após a formação da corona de plasma houve um aumento significativo da espessura e rugosidade de ambos os materiais, especialmente de P@GO-AgNPs (9 nm e 3,2 ± 0,8 nm; P@GO: 5,5 nm e 1,8 ± 0,5 nm). No perfil da corona plasmática em gel de SDS-Page observa-se bandas proteicas de diferentes intensidades entre 10 e 250 kDa, indicando qualitativamente que há proteínas que apresentam mais afinidade à superfície dos NMs estudados do que outras. Além disso, observou-se uma maior capacidade de adsorção de proteínas no GO que no GO-AgNPs. A composição química dos materiais foi avaliada por espectroscopia de fotoelétrons excitados por raios X (XPS) e infravermelho por transformada de Fourier (FT-IR). Essas técnicas demonstraram mudança significativa na composição química de superfície após a formação da corona de plasma, como redução de grupos funcionais oxigenados. Além disso, esse revestimento proteico reduz o percentual de prata exposto na superfície de GO-AgNPs, o que pode corroborar com a mitigação da hemólise. GO-AgNPs apresentou três vezes mais efeito hemolítico que GO (88% e 27%, respectivamente), enquanto para P@GO e P@GO-AgNPs o efeito hemolítico foi abaixo de 5%. Estes resultados contribuem na direção de caracterização de nanobiointerfaces visando o desenvolvimento de novos materiais a base de grafeno para aplicações biomédicas, além de evidenciar o papel central das coronas proteicas.

Título: Síntese, caracterização e avaliação biológica de derivados de pirido-pirimidin-4-onas e de quinazolina-4-onas como agentes antibacterianos.

Bolsista PIBIC: Pedro Dominguez Branco
Universidade: Universidade Estadual de Campinas - Unicamp
Orientador: Dr. Gustavo Fernando Mercaldi
Unidade CNPEM: LNBio

RESUMO:

A metionina-tRNA sintetase (MetRS) é a enzima responsável por esterificar o aminoácido L-Metionina (L-Met) a RNAs transportadores (tRNA) cognatos que serão usados nas etapas de iniciação e elongação 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. Destaca-se ainda que a aquisição do gene que codifica para MetRS2 resulta no desenvolvimento de resistência a antibióticos que atuam inibindo a MetRS1. Sendo assim, o atual projeto visa viabilizar protocolos para a síntese de compostos inibidores da MetRS2, uma vez que estas se encontram presentes principalmente em bactérias gram-negativas, que podem apresentar-se como patógenos de plantas, animais e humanos, assim como em patógenos gram-positivos resistentes aos inibidores de MetRS1. Sendo assim, foram realizadas etapas sintéticas que envolviam ciclização, clorinação e obtenção do intermediário 2-cloro-quinazolin-4-ona, com subsequente reação de substituição nucleofílica aromática para a inserção de linker 1,3-diaminopropano. A seguir, foram realizadas as etapas de proteção do nitrogênio do aminoácido L-Met com o Boc e acoplamento deste com o derivado da quinazolina com o linker. Além disso, foram feitas otimizações das condições reacionais de diversas etapas sintéticas, o que permitiu alcançar bons rendimentos e solucionar adversidades encontradas durante o processo.

Título: Development of Nb-doped LLZO solid ceramic electrolytes for all solid-state lithium batteries by metalorganic decomposition (MOD)

Bolsista PIBIC: Raphael Martinez Garcia
Universidade: Universidade Estadual de Campinas - Unicamp
Orientador: Dr. Mathias Strauss
Unidade CNPEM: LNNano

RESUMO:

Energy storage devices are one of the key elements for the future of renewable energy, electronic devices, and electric vehicles. Nowadays, liquid electrolyte-based lithium-ion batteries dominate the batteries market and are one of the most used energy storage devices. Solid-state lithium batteries are considered the next generation of high-performance Li-ion batteries. They are designed using solid electrolytes instead of common liquid electrolytes, improving the safety and energy storage capability of these devices, as they allow for the substitution of graphite anodes for lithium anodes. In addition to desirable safety, other advantages such as high ionic conductivity, good chemical stability against Li metal, resistance enough to avoid the dendrite formation, and good mechanical, thermal, and electrochemical stability are also achieved. Focus on improving these materials performance involve synthesis of LLZO-type electrolytes routes that control grain boundaries and solid electrodes/electrolyte interfaces, but also that reduce the electrolytes thickness by forming a thin film. Thin films of LLZO are already synthetized by using advanced technics, like Pulsed Laser Deposition (PLD) and Atomic Layer Deposition (ALD), which demand a wide control of parameters and modern equipment and infrastructure. Synthesis of thin films by using metalorganic decomposition is already well known for other oxides, however, that route have never been explored to synthesize LLZO thin films. This project develops a route to synthesize thin films of both Nb-doped LLZO and LiCoO2, a commonly used cathode material for Li-ion batteries, by metalorganic decomposition using 2-ethylhexanoates compounds of metals precursors. The metalorganic precursors were solubilized in a hexane/butanol solution and deposited in different substrates using cycles of dip coating followed by high temperature treatment. Formation of LLZO-Nb doped in cubic state was confirmed by X-ray diffraction and Raman spectroscopy, with control of the film's thickness by variation of the number of cycles. The same route has also proved to be effective for LiCoO2 thin films, thus it may be possible to grow the LLZO film using the LiCoO2 film as substrate, which would allow for a simplified manufacture process for solid-state Li-ion batteries.

Título: Explorando modelos QSAR/QSPR para predição de coeficientes de partição de fragmentos de lignina

Bolsista PIBIC: Rita Braga Soares da Silva
Universidade: Universidade Estadual de Campinas - Unicamp
Orientador: Dr. Carlos Eduardo Driemeier
Unidade CNPEM: LNBR

RESUMO:

No estudo da despolimerização de lignina, uma questão recorrente é a produção de bio-óleos com grande diversidade de compostos químicos. A extração líquido-líquido é um dos métodos aplicados para a separação de compostos obtidos da despolimerização de lignina. No entanto, para a maior parte dos compostos dos bio-óleos de lignina, há uma escassez de dados que permitam modelagem computacional e obter os dados experimentalmente é muito custoso. Por isso, este estudo explora a aplicação de modelos do tipo Relação Estrutura-Atividade Quantitativa (QSAR), também chamados de Relação Estrutura-Propriedade Quantitativa (QSPR), para predição de dados faltantes de coeficientes de partição de compostos derivados da despolimerização de lignina. Com esse objetivo, descritores moleculares de compostos químicos foram extraídos da base PubChem e métodos estatísticos foram empregados para a redução de dimensionalidade dos dados e para a predição dos valores faltantes, utilizando a biblioteca scikit-learn do Python. O algoritmo de imputação foi aplicado em conjuntos de valores de coeficiente de partição (LogP) de compostos derivados de lignina tendo como base um conjunto de dados obtidos na literatura para três solventes distintos: metil isobutil cetona, acetato de butila e ciclohexano. Os resultados obtidos indicam que a qualidade da predição está fortemente relacionada à região do espaço químico que circunda os pontos com valores de LogP conhecidos, região denominada de domínio de aplicabilidade do modelo. No caso dos coeficientes de partição nos solventes estudados, destaca-se a carência de dados de referência para compostos de maior massa molar (>136 g/mol), mostrando limites à qualidade da predição nessa região do espaço químico.

Título: Sistema de coleta de dados para cristalografia de proteínas à temperatura ambiente

Bolsista PIBIC: Silas Leonel Pereira
Universidade: Universidade Estadual de Campinas - Unicamp
Orientador: Dr. Evandro Ares de Araujo
Unidade CNPEM: LNLS

RESUMO:

Os avanços em biologia estrutural vêm aumentando cada vez mais nossa capacidade de entender mais profundamente o papel que as macromoléculas desempenham no meio biológico; a maioria destas estruturas foram resolvidas experimentalmente pelo método da cristalografia de raios X. isso tem ajudado a racionalizar as estratégias de busca e desenvolvimento de medicamentos para diversas doenças; um exemplo foi a determinação da estrutura cristalográfica da principal protease [envolvida na invasão da célula humana] do SARS--COV—2 responsável pela pandemia da COVID-19. Esses avanços são, em grande parte, resultantes do aumento de número e acessibilidade das fontes de luz Síncrotron, em especial às fontes com alto brilho de terceira e quarta geração. Por outro lado, a dificuldade em obter cristais bem ordenados com dimensões da ordem de algumas dezenas de mícron e com tolerância a altas doses de radiação são importantes limitações desta técnica; em geral, à medida que se tem um feixe de raios X com fluxo de alta densidade, mais energia é depositada por área do cristal, significando que os danos por radiação serão ainda mais proeminentes\cite{storm2020}; entretanto, isso é quase negligenciável para cristais menores que 10 µm, além disso, a difração de cristais com dimensões equivalentes às do feixe de raios X tem como efeito a otimização da relação entre sinal e ruído. Esses fatores tornam possível a coleta de cristais cada vez menores e a consequente implementação de novas técnicas, tais como cristalografia em fontes XFELs e Síncrotron. Portanto, neste projeto trabalhamos com o intuito de compreender e desenvolver sistemas de coletas de dados à temperatura ambiente que mitiguem o dano por radiação sofrido pelas amostras. Para tal feito, foram realizados experimentos de difração de raios X na linha de luz Manacá utilizando um feixe com energia de 15,6 keV. A fim de parametrizar a dose recebida pelos cristais foi utilizado o software RADDOSE-3D que permite calcular a dose recebida pelo cristal durante um experimento de cristalografia de raios X utilizando as propriedades físico-químicas do cristal, feixe e dinâmica da amostra frente ao feixe.

Título: Estudo estrutural e magnético de multicamadas antiferromagnéticas sintéticas
Bolsista PIBIC: Thiago Moreno Batistel
Universidade: Universidade Estadual de Campinas - Unicamp
Orientador: Dr. Jeovani Brandão
Unidade CNPEM: LNLS

RESUMO:

O antiferromagnetismo tem ganhado grande destaque devido às suas características promissoras para aplicações tecnológicas, que incluem campo intrínseco desprezível e rápido movimento de paredes de domínio em comparação com o - já bastante explorado - ferromagnetismo. Entretanto, ainda há pouco conhecimento sobre a estabilização e manipulação de domínios magnéticos neste ordenamento, bem como sobre como ocorre o transporte das paredes de domínio. Neste trabalho, foi realizada a caracterização de multicamadas sintéticas da forma Ni/Pt/Ru/Pt/Co, crescidas por magnetron sputtering, por meio de técnicas como espectroscopia por absorção de raios X (XAS, realizada em fonte de luz síncrotron), magnetometria de amostra vibrante (VSM) e microscopia de força magnética (MFM). O estudo promoveu a verificação do estado de oxidação das camadas magnéticas, do processo de reversão magnética dos filmes e dos domínios magnéticos formados. Destaca-se a observação de evidências de acoplamento antiferromagnético entre as camadas ferromagnéticas de Co e Ni, para espessuras específicas do espaçador de Ru. O estudo possibilitou uma maior compreensão sobre a influência da configuração da multicamada nas propriedades magnéticas dos filmes finos. Além disso, a obtenção de um sistema antiferromagnético sintético com camadas magnéticas de materiais distintos é um resultado importante, uma vez que aponta para a possibilidade de futuras medidas com técnicas que desfrutam de seletividade química, e que podem evidenciar o acoplamento entre as camadas, como dicroísmo circular magnético de raios X (XMCD).