22° Congresso Interno de Iniciação Científica do Programa PIBIC no CNPEM / VI CEC 2024

LIVRO DE RESUMOS

2024

1. Apresentação

É com enorme satisfação que realizamos o 21° 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 sexta edição do CEC (VI CEC 2024) ocorreu entre os dias 04 e 06 de dezembro, 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 505 participantes, com 164 apresentações de pôsteres, 28 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) e da Escola de Ciência (ILUM).

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 2024

Comitê Interno

Dra. Juliana Ferreira de Oliveira - LNBio
Dra. Bruna Fernanda Baggio - LNNano
Dr. Maxuel de Oliveira Andrade- LNBR
Dr. Julio Criginski Cezar – LNLS
Dra. Juliana Helena Costa Smetana - ILUM

Comitê Externo

Prof. Dr. Carlos Alberto de Castro Junior

Pontifícia Universidade Católica de Campinas (PUC-Campinas)

Profa. Dra. Ljubica Tasic

Instituto de Química, Universidade Estadual de Campinas (UNICAMP)

Prof. Dr. Roger Frigerio Castilho

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

Prof. Dr. Marcos Eduardo Ribeiro do Valle Mesquita

Instituto de Matemática, Estatística e Computação Científica, Universidade Estadual de Campinas (UNICAMP)

4. Resumos

Título: PRODUÇÃO DE HETEROESTRUTURAS ULTRAFINAS E DISPOSITIVOS PARA APLICAÇÃO EM NANOELETRÔNICA.
Bolsista PIBIC: Ana Beatriz Barbosa Yoshida
Orientador: Dr. Alisson Cadore
Unidade CNPEM: LNNano

RESUMO:

Materiais bidimensionais (M2Ds) isolados vem sendo amplamente estudados devido às suas propriedades elétricas, mecânicas e ópticas intrínsecas [1]. Recentemente, a combinação de dois ou mais M2Ds nas chamadas heteroestruturas de van der Waals (vdWHs) permitiu melhorias na qualidade optoeletrônica de dispositivos multifuncionais e na observação de novos fenômenos quânticos que não existem em suas formas isoladas [2]. Consequentemente, isso impulsionou o uso desses M2Ds, bem como aplicações tecnológicas dessas vdWHs ultrafinas, principalmente em áreas relacionadas à nanoeletrônica [3]. Neste projeto, fabricamos e caracterizamos amostras de grafeno encapsuladas em cristais naturais de biotita (mina brasileira) e comparamos os resultados com o cristal 2D mais utilizado na literatura, o nitreto de boro hexagonal (hBN). Demonstramos que M2Ds naturais podem ser facilmente incorporados em vdWHs ultrafinas com grafeno. Nossa análise de espectroscopia Raman mostrou que os cristais de biotita induzem uma transferência espontânea de carga para o grafeno, induzindo dopagem sem aplicar polarização de porta externa. Os resultados foram então comparados à caracterização elétrica de nanodispositivos de transistor de efeito de campo (GFETs), mostrando assim, a densidade total de carga transferida para o grafeno, bem como o tipo de portador de carga. Portanto, nosso estudo busca contribuir para a área de dispositivos eletrônicos com baixos custos de produção usando 2DMs naturais de solo brasileiro. Agradecimentos: CAPES, INCT/Nanocarbono and CNPq Referências: [1] A.C. Ferrari et al., Nanoscale, 2015,7, 4598-4810 [2] R. Frisenda et al., Chem. Soc. Rev., 2018,47, 53-68 [3] M.C. Lemme et al., Nat. Commun., 2021, 13, 1392

Título: Microtomografia De Raios-X Para Avaliação De Remediação Química In Situ (Isco) De Aquíferos Porosos.
Bolsista PIBIC: André Rodrigues Gomes Silva
Orientador: Dra. Nathaly Lopes Archilha
Unidade CNPEM: LNLS

RESUMO:

A oxidação química in situ (ISCO) tem sido amplamente utilizada como um método de remediação em áreas contaminadas, considerando sua eficácia cada vez mais consolidada. A aplicação da técnica utilizando permanganato de potássio (KMnO4) para a degradação de tricloroetileno (ou TCE, C2HCl3) foi relatada em estudos em escala piloto e em campo, com resultados de remediação favoráveis. Uma limitação da otimização do processo é a lacuna de conhecimento sobre a reação em escala microscópica. Assim, este projeto tem como objetivo investigar a dinâmica do processo de remediação ISCO de TCE com KMnO4 em escala de poros,por meio de imagens de micro tomografia computadorizara de raios-X (uCT) de fonte síncrotron e resolvidas no tempo, de um experimento de injeção em meio poroso. A caracterização da amostra saturada de água forneceu informações como porosidade total, área superficial dos grãos na matriz e tortuosidade dos poros. Com a análise das amostras saturadas com TCE e com permanganato de potássio, esperamos observar mudanças na permeabilidade da amostra e na quantidade de contaminante residual, além dos produtos da reação.

Título: Desenvolvimento de dispositivos microfluídicos para a formação de sistemas lipossomais e sua caracterização na linha Sapucaia.

Bolsista PIBIC: Anne Brajato Madeira
Orientador: Dr. Antonio Gasperini
Unidade CNPEM: LNLS

RESUMO:

Dispositivos microfluídicos são ferramentas baseadas na manipulação de pequenas quantidades de fluidos em canais micrométricos. Essa tecnologia tem ganhado bastante destaque devido à sua ampla gama de aplicações; entre elas, a área farmacêutica, com foco especial em sistemas de entrega de fármacos (DDS - drug delivery systems). A produção de lipossomas a partir desses dispositivos, por exemplo, possui diversas vantagens quando comparada aos métodos tradicionais de confecção, e é a motivação principal deste trabalho. Nesse projeto, fabricamos dispositivos de microfluídica que foram usados para a produção de lipossomas com aplicação em DDS. Ao longo da pesquisa, preparamos todos os instrumentos necessários para os experimentos, que incluíam o estudo teórico, a fabricação dos dispositivos e a montagem do arranjo experimental. Em seguida, realizamos um estudo dos lipídios que foram usados e preparamos as dispersões lipídicas. Por fim, confeccionamos os lipossomas usando os microdispositivos, e caracterizamos as amostras produzidas através das técnicas de DLS (Dynamic Light Scattering) e SAXS (Small Angle X-ray Scattering) na linha Sapucaia.

Título: Crescimento de filmes finos de Mn3Ge e Mn3Al crescidos por Epitaxia de Feixes Moleculares.

Bolsista PIBIC: Beatriz Dalcin Vieira
Orientador: Dr. Pedro Schio de Noronha Muniz
Unidade CNPEM: LNNano

RESUMO:

O efeito Hall se dá quando, ao se passar uma corrente elétrica em um material com um campo magnético aplicado transversalmente, surge uma diferença de potencial no material que é perpendicular a corrente e campo magnético. Recentemente foram descobertos alguns materiais AFM que podem apresentar as mesmas características, sendo exemplos deles os compostos Mn3Ge e Mn3Al. O que chama a atenção pois isso abre caminho para que possamos ter um condutor que está menos suscetível aos efeitos de campos magnéticos externos, sendo ele mais estável e ideal para spintronica. O projeto desenvolveu o crescimento epitaxial de filmes finos dos materiais citados sobre um substrato de STiO3, e o estudo deles. O crescimento utilizou a técnica de MBE (Molecular Beam Epitaxy), além de aplicarmos técnicas de caracterização para o estudo como AFM, XPS, XRR e XRD.

Título: Polarização Elétrica e Deformação Estrutural Como Consequência de Transições de Fase Como Função da Temperatura em Compósitos Magnetoelétricos

Bolsista PIBIC: Bruna Helena Rotta Santiago
Orientador: Dra. Flávia Regina Estrada
Unidade CNPEM: LNLS

RESUMO:

Materiais magnetoelétricos são aqueles que apresentam tanto a ordem ferroelétrica quando a magnética. Eles não só possuem as potenciais aplicações dos materiais ferroelétricos e ferromagnéticos, como também apresentam propriedades provenientes do acoplamento magnetoelétrico (ME). Esse acoplamento, que pode ocorrer tanto em materiais monofásicos quanto em compósitos, é obtido pela interação entre fases ferromagnéticas e ferroelétricas com uma interface mecânica. As aplicações desses materiais são variadas, incluindo transdutores, sensores, atenuadores, armazenamento e leitura de dados, e até controle de memória magnética a partir de um campo elétrico e vice-versa. Esse projeto visa determinar a deformação estrutural, decorrente das transições de fase estruturais, na interação e acoplamento entre as fases de um compósito ME composto por Ferrita de Cobalto (CFO) e Titanato de Bário (BTO), materiais que representam as fases ferromagnética e ferroelétrica, respectivamente. Quando submetidas a um estímulo elétrico ou magnético, as fases passam por deformações, se mantêm fisicamente acopladas, e são mecanicamente empurradas uma pela outra. Compreender essas modificações estruturais é fundamental para o desenvolvimento de novas tecnologias baseadas no acoplamento ME. As modificações estruturais do CFO e do BTO como função da temperatura, tanto como fases isoladas quanto no compósito, foram caracterizadas utilizando difração de raios x de alta resolução com radiação síncrotron: um experimento realizado na linha de luz Paineira, no Laboratório Nacional de Luz Síncrotron, variando de 80 K a 500 K, com medidas em inúmeras temperaturas do intervalo. Difratogramas foram obtidos em diversas temperaturas, permitindo a observação das transições de fase esperadas na fase ferroelétrica. Ademais, comparações entre as fases isoladas e o compósito revelaram a influência do acoplamento ME na estrutura dos materiais. Ainda, por meio do Refinamento de Rietveld dos dados de difração, foram obtidos “crystallographic information files” do material em cada temperatura. Com isso, foi possível calcular a polarização elétrica espontânea do BTO como função da temperatura pelo modelo do dipolo elétrico clássico. Adicionalmente, medições de magnetização em função da temperatura foram realizadas por magnetometria, possibilitando uma análise conjunta das propriedades estruturais, elétricas e magnéticas do compósito CFO-BTO, elucidando os mecanismos do acoplamento ME nesse sistema.

Título: Desenvolvimento de um sistema automático para movimentação do porta amostras da linha de luz Cedro

Bolsista PIBIC: Caio Taishi Sakamoto Kataoka
Orientador: Dra. Juliana Sakamoto Yoneda
Unidade CNPEM: LNLS

RESUMO:

A técnica de espectroscopia de dicroísmo circular (do inglês Circular Dichroism) é um importante instrumento utilizado no estudo de moléculas quirais, em especial proteínas, de maneira que o experimento pode ocorrer em diferentes ambientes e em diversas situações. Na linha de luz CEDRO, o equipamento comercial utilizado para realizar a técnica, OLIS DSM20, potencializa algumas das possibilidades experimentais, apesar disso, existem algumas limitações, inerentes ao experimento e às amostra utilizadas, relacionadas à danificação e ao espalhamento das proteínas, as quais impactam na quantidade de vezes que uma amostra pode ser utilizada no experimento e na coleta de apenas uma parcela das informações da amostra, respectivamente. A literatura relaciona o acontecimento dos efeitos de dano por radiação da amostra a partir da densidade de fótons que incide na amostra, na qual está associada à área que está sendo irradiada pelo feixe. Enquanto que para o espalhamento, existem algumas amostras específicas que interagem com o feixe de forma que ocorre um desvio na angulação do sinal que deveria ser recebido pelo detector. Com isso, uma das formas de diminuir o impacto desses efeitos nos resultados experimentais é posicionar a amostra em diferentes locais na região do OLIS DSM20 em que ocorre a interação do feixe de luz e a amostra. Assim, a presente apresentação tem como objetivo demonstrar as atividades desenvolvidas durante o projeto de Iniciação Científica para elaboração de um sistema automático capaz de movimentar, em um eixo linear, o porta amostras da linha de luz CEDRO a partir da escolha manual da posição. Ademais, serão apresentados os próximos passos para conclusão do projeto.

Título: Experimentos in-situ de materiais funcionais na linha Paineira do Sirius: instrumentação e caso científico

Bolsista PIBIC: Guilherme Roventini Barreto
Orientador: Dra. Cristiane Barbieri Rodella
Unidade CNPEM: LNLS

RESUMO:

Em Ciência de Materiais, o estudo dinâmico de estruturas cristalinas é essencial para a compreensão dos parâmetros que influenciam o desempenho e as propriedades exibidas por materiais em condições desejadas. Ambientes dinâmicos podem ser obtidos pela variação em parâmetros físico-químico, como meio reacional, temperatura e pressão. A linha de luz Paineira disponibiliza de equipamentos diversos adequados para realização de experimentos de Difração de raios-X em ambiente estático e dinâmico, utilizando-se de diferentes porta-amostras e equipamentos analíticos. Neste trabalho, é apresentado um novo sistema para estudo e avaliação de amostras em ambiente dinâmico, permitindo a variação de pressão numa escala de 0 a 100 bar. Um sistema fluidodinâmico, que comporta gases e líquidos, foi projetado e construído para realizar testes em porta-amostras do tipo celas capilares em condição de operação, suportando as mesmas pressões requeridas pela cela e demais instrumentos de medição e controle necessários, priorizando a precisão, repetibilidade dos ensaios e uma fácil coleta de dados. Foi realizado o retrabalho do suporte da cela de reação, voltado a evitar o desgaste das roscas e parafusos que fixam as peças do suporte. A dimensão dos tubos que acoplam a união de redução da cela com as conexões do porta-amostras também foi delimitada, visando um encaixe que não estresse o material e nem suas partes móveis. Para o correto funcionamento das celas capilares, diferentes tipos de vedação estão em comissionamento, com a finalidade de aprimoramento do projeto da cela de reação e seu desempenho em condições reacionais. Foram selecionados para os testes dois anéis de vedação com materiais e procedências diferentes. Um deles foi o anel comercial de silicone, o outro selecionado foi o anel de lençol de EPDM com fabricação in-House. Os testes iniciais com o sistema ocorreram à pressão de 30 bar utilizando gás hélio. Para as vedações de silicone, a perda de pressão foi de 0,06 bar/min e para a de EPDM foi de 0,14 bar/min, novos testes são necessários para a otimização do sistema como um todo.

Título: Investigação de excitações quânticas na superfície do SrTiO3 por espectroscopias de raio-X no SIRIUS
Bolsista PIBIC: Gustavo Cardoso Cecotti
Orientador: Dr. Tulio Rocha
Unidade CNPEM: LNLS

RESUMO:

Investigamos a estrutura eletrônica do SrTiO_3 por meio de espectroscopias de absorção de raios-X (XAS), com foco em simulações computacionais da teoria de multipletos. Introduzimos os principais parâmetros que influem na estrutura eletrônica do material bem como em seu espectro XAS: acoplamento spin-órbita, interação coulombiana e campo cristalino. Obtivemos os parâmetros ótimos para a simulação das bordas L2 e L3 do Ti4+ presente no material e comparamos a aplicação desses parâmetros sobre o Ti3+ com espectros indiretos obtidos em trabalhos anteriores.

Título: Explorando novas perspectivas no Microscópio de Fotoemissão de Elétrons (PEEM): um estudo da estrutura eletrônica.

Bolsista PIBIC: Gustavo Tsutomu Mizumura
Orientador: Dra. Dayane de Souza Chaves
Unidade CNPEM: LNLS

RESUMO:

Durante este projeto de iniciação científica, diversas atividades foram realizadas com o objetivo de investigar algumas das diversas capacidades do Microscópio de Fotoemissão de Elétrons (PEEM). Uma dessas atividades foi a realização de medidas de espectroscopia de fotoemissão resolvida em ângulo (ARPES). Para alcançar esse objetivo, a primeira etapa consistiu em realizar os reparos necessários na lâmpada de hélio, incluindo a verificação do sistema de resfriamento, testes de vazamento de vácuo e ajustes no sistema elétrico. Após os reparos, realizamos uma série de comparações entre os experimentos utilizando a lâmpada de hélio e uma outra fonte excitadora, como a lâmpada de mercúrio. Observando resultados positivos na resolução das imagens obtidas com a lâmpada de hélio, foi possível obtermos as primeiras imagens de ARPES no PEEM da linha de luz SABIÁ do SIRIUS, abrindo espaço para novos estudos e outras possibilidades.

Título: Segmentação de tomografias de raios X para avaliação dos efeitos do biochar e nanopartículas de ZnO no desenvolvimento de raízes de plantas de feijão.
Bolsista PIBIC: Julia Fernandes Ragonha
Orientador: Dra. Talita Rosas Ferreira
Unidade CNPEM: LNLS

RESUMO:

O uso do biochar e de nanopartículas de óxido de zinco (ZnO), separadamente, são estudados por seu potencial benéfico para as propriedades do solo e no desenvolvimento das plantas em culturas agrícolas. Desta forma, apresenta-se a hipótese de que a associação destes dois fatores pode ter efeitos sinérgicos que superam os efeitos individuais de cada componente. Portanto, este trabalho tem como objetivo geral caracterizar a configuração de raízes de plantas de feijão cultivadas em porções de solo, com o uso da técnica de tomografia computadorizada de raios X (XCT), de acordo com os seguintes tratamentos: i) controle, ii) solo tratado com biochar, iii) sementes de feijão tratadas com nanopartículas de ZnO, e iv) tratamentos ii e iii associados. A etapa de cultivo das amostras e aquisição das imagens de XCT na linha de luz MOGNO (n=3 para cada tratamento; total de 12 imagens) foi realizada previamente em uma proposta experimental vinculada ao programa de bolsas de verão do CNPEM – 2023. No presente trabalho, o objetivo específico consiste em processar as imagens geradas e, assim, analisar qualitativa e quantitativamente os efeitos dos tratamentos descritos. O processamento partiu da reconstrução das imagens e remoção do fundo, utilizando-se métodos convencionais de segmentação no software Avizo, para então dar continuidade à segmentação das fases (grãos, poros e raízes) com estratégias de aprendizado de máquina e redes neurais no software Annotat3D. Posteriormente, foi realizado um refinamento manual no Avizo, utilizando outras técnicas de segmentação para recuperar elementos perdidos e corrigir eventuais erros. Até o presente momento, a etapa de segmentação foi finalizada para uma amostra de cada tratamento (total de 4 imagens). Para essas imagens, o diâmetro das raízes de cada amostra foi mapeado a partir do software ImageJ (função thickness), fornecendo histogramas de variação desse parâmetro. Dentre as imagens analisadas até o momento, o tratamento controle apresentou os maiores diâmetros de raízes e maior variação de diâmetros entre os tratamentos. Além disso, na amostra analisada do tratamento iii, foi possível observar estruturas nas extremidades dos pelos radiculares, em que se investiga a hipótese de que sejam exsudatos radiculares, substâncias químicas liberadas pelas raízes na rizosfera. Estes resultados serão em breve complementados a partir da segmentação das demais imagens.

Título: Nanopartículas de lignina para encapsulamento de agroquímico: Síntese, caracterização e efeitos biológicos.
Bolsista PIBIC: Laura Vieira Malachias
Orientador: Dr. Diego Stéfani Teodoro Martine
Unidade CNPEM: LNNano

RESUMO:

O Brasil lidera a produção mundial de soja (Glycine max (L) Merrill), uma cultura vital para as indústrias alimentícia, química e pecuária. Entretanto, doenças como podridão radicular (Phytophthora sojae Kaufm. & Gerd) e ferrugem asiática (Phakopsora pachyrhizi) afetam consideravelmente a produtividade. Para combater essa ameaça, utilizam-se variedades de soja resistentes e fungicidas triazóis, como o tebuconazol (TB). A nanotecnologia fornece alternativas para a distribuição e liberação mais eficiente desses compostos nas plantas, promovendo maior sustentabilidade na agricultura por meio do uso de nanomateriais. Nesse contexto, nanopartículas de lignina, um bionanomaterial, podem ser exploradas como sistemas de encapsulamento de agroquímicos. A metodologia envolveu a síntese de nanopartículas de lignina (CLP, do inglês colloidal lignin particles) e de lignina revestidas com quitosana (chi-CLP, do inglês chitosan-coated CLP) para formular emulsões Pickering contendo TB. Foram realizadas caracterizações físico-químicas e morfológicas das nanopartículas e emulsões. Nanopartículas em diferentes concentrações (1, 10, 40 e 100 mg/L) foram submetidas a ensaios de liberação in vitro e testes de toxicidade com zebrafish (Danio rerio) e Daphnia similis por até 96 horas e 48 horas, respectivamente. Também foi determinada a concentração inibitória mínima em S. cerevisiae de todos os materiais sintetizados neste estudo. Os resultados indicaram que as nanopartículas auxiliam na estabilização das emulsões com e sem TB, mas ainda são necessários estudos de concentração para obter resultados significativamente na inibição de S. cerevisiae. Ademais, não foi encontrada toxicidade nos ensaios com zebrafish e D. similis, sugerindo que CLP e chi-CLP são uma opção promissora para liberação controlada de moléculas de TB.

Título: Desenvolvimento de catalisadores heterogêneos via processo sol-gel para a redução de poluentes ambientais.
Bolsista PIBIC: Letícia Maki Chan
Orientador: Dra. Aline Ribeiro Passos
Unidade CNPEM: LNLS

RESUMO:

Corantes orgânicos são poluentes aquáticos que representam uma grave ameaça à saúde ambiental. O desenvolvimento de materiais catalíticos e adsorventes são essenciais no tratamento desses poluentes orgânicos que causam impactos ambientais significativos. Neste trabalho, catalisadores à base nanopartículas de ouro (Au NPs) suportados em sílicas meso e macroporosas foram desenvolvidos através do processo sol-gel com separação de fases, visando aumentar a eficiência na descontaminação de águas residuais. Foi conduzido um estudo sistemático para investigar os mecanismos fundamentais para o controle eficiente da estrutura porosa, dispersão das espécies ativas e estabilidade do catalisador, fatores essenciais para o desenvolvimento de catalisadores de alto desempenho. A síntese coloidal das Au NPs foi realizada com controle de tamanho e dispersão, seguida da incorporação das nanopartículas em suportes de sílica mesoporosa e macroporosa utilizando o método sol-gel. A caracterização das nanopartículas foi feita por técnicas como UV Vis e USAXS, confirmando a formação de partículas com diâmetros entre 50 e 65 nm. Os catalisadores obtidos foram caracterizados por TGA, BET, MEV, XPCS e USAXS. Utilizando XPCS e USAXS in situ, investigou-se o mecanismo de formação da sílica na presença das nanopartículas de ouro durante a fase de gelificação, permitindo revelar como os parâmetros de síntese influenciam na morfologia e na estrutura porosa do material. Os resultados indicaram que a incorporação de Au NPs em concentrações controladas manteve a integridade estrutural da sílica e promoveu o aumento da área superficial e porosidade. Os catalisadores apresentaram elevada atividade na redução do azul de metileno. Os resultados demonstraram que os catalisadores desenvolvidos são promissores para aplicações em processos catalíticos voltados ao tratamento de efluentes industriais devido ao elevado desempenho na redução de azul de metileno.

Título: Aprendizado de máquina para determinação de entalpias de reação em redes de reações químicas de lignina

Bolsista PIBIC: Luiz Eduardo Foschiera Couto Lopes
Orientador: Dr. Carlos Eduardo Driemeier
Unidade CNPEM: LNBR

RESUMO:

Redes de reações químicas associadas a métodos de aprendizado de máquina têm sido propostas para modelar meios reacionais complexos. Nesse contexto, este projeto explora a técnica de aprendizado por transferência, em que uma rede neural artificial é inicialmente pré-treinada com uma base de dados de reações fonte e posteriormente aprimorada empregando uma base de dados alvo específica para fragmentos de lignina. As técnicas de aprendizado de máquina são implementadas em linguagem Python com o pacote TensorFlow. Foram realizados testes quanto à dimensão e forma de construção do vetor descritor molecular das reações. A versão final do modelo segue uma estrutura de três camadas escondidas de 250 neurônios em cada camada e uma quarta camada com 50 neurônios. Este modelo resulta em um Erro Absoluto Médio (MAE) de 6,28 kcal/mol, Raiz do Erro Quadrático Médio (RMSE) de 9,42 kcal/mol e R2 de 0,95 para a predição de entalpia das reações da base fonte, empregando descritores moleculares de 390 elementos gerados com algoritmo Smooth Overlap of Atomic Positions (SOAP). Para essa mesma base de dados e descritores moleculares normalizador, o modelo resulta em MAE de 8.94 kcal/mol, RMSE de 12.66 kcal/mol e R2 de 0.82 para a previsão da energia de ativação das reações. O modelo treinado na base de dados fonte demonstrou transferência para a predição de entalpia de reações químicas de lignina, alcançando MAE de 6,15 kcal/mol, RMSE de 6,86 kcal/mol e R2 de 0,92, dadas somente 4 reações de treino e 50 parâmetros livres treináveis para ajuste. Esses resultados destacam o potencial da transferência de aprendizado em redes de reações químicas, abrindo caminho para uma modelagem mais eficiente e precisa de sistemas complexos, mesmo com dados limitados.

Título: Novo design de DAC para experimentos em alta pressão usando safira plana.
Bolsista PIBIC: Maria Fernanda Dantas da Silva
Orientador: Dra. Danusa do Carmo
Unidade CNPEM: LNLS

RESUMO:

A utilização de alta pressão em experimentos de transporte elétrico é fundamental para investigar propriedades físicas de materiais, especialmente supercondutores. Esse método permite explorar a síntese de novas ligas e elevar as temperaturas de transição de supercondutores. A aplicação de pressão é feita em células de bigorna de diamante (DAC), onde a amostra é comprimida entre as pontas de dois diamantes. Sua dureza e transparência aos raios X possibilitam a combinação de experimentos de transporte elétrico e de difração de raios -X. Isso oferece uma visão mais ampla das propriedades eletrônicas e estruturais dos materiais em condições extremas. Neste projeto, uma DAC padrão foi adaptada trocando-se um dos diamantes por um disco de safira, com o objetivo de facilitar a montagem dos eletrodos para realizar medidas de resistividade concomitantes com experimentos de raios X. A célula foi então carregada com esferas de rubis e óxido de magnésio, como manômetro e meio de pressão, respectivamente. A modificação na célula demonstrou eficácia, pois ocorreu o fechamento homogêneo do gasket (câmara de alta pressão). No entanto, observou-se uma variação de pressão medidas entre os rubis, o que indicou possíveis problemas na hidrostaticidade do meio de pressão. Nessa apresentação vamos mostrar os resultados obtidos com a aplicação de pressão na DAC modificada e um estudo sistemático do comportamento do óxido de magnésio sob pressão.

Título: Bionanocompósitos poliméricos reforçados com celulose nanofibrilada contendo lignina residual: aperfeiçoando a compatibilidade de nanoestruturas hidrofílicas em matriz hidrofóbica.

Bolsista PIBIC: Pedro Henrique Kenzo Nishimoto
Orientador: Dr. Marcos Vinicius Lorevice
Unidade CNPEM: LNNano

RESUMO:

Bionanocompósitos baseados em nanofibrilas de celulose contendo lignina (LCNF) incorporadas em matrizes termoplásticas biodegradáveis estão surgindo como alternativas promissoras aos polímeros derivados do petróleo. Este trabalho teve como objetivo produzir LCNF e incorporá-las em matriz polimérica biodegradável, estudando o efeito de dispersão e de compatibilidade polímero-LCNF. O bagaço de cana-de-açúcar (BCA) foi pré-tratado com soluções de 1-2% em peso de NaOH a diferentes temperaturas, seguido de fibrilação mecânica em moinho Masuko, com a obtenção de suspensões de LCNF com viscosidade inerente, como resultado de emaranhamentos de fibrilas. O controle dos parâmetros de concentração de NaOH e temperatura permitiram modelar o diâmetro médio das nanofibrilas (12 a 24 nm) de LCNF, bem como a quantidade de lignina residual, que foram evidenciados através de análises de microscopia de força atômica (AFM) e caracterização química das polpas, respectivamente. Para produção dos filmes bionanocompósitos, foi empregada a troca de solvente obtendo suspensões de LCNF em solvente orgânico, posteriormente misturada com poli (butileno adipato-co-tereftalato) (PBAT), e casting para obtenção dos filmes. Ensaios mecânicos indicaram um aumento do módulo de Young dos bionanocompósitos paralelo ao aumento da razão LCNF:PBAT. Além disso, foi possível observar módulos de Young mais elevados para os bionanocompósitos contendo LCNF com maior quantidade de lignina residual, o que permite inferir uma melhor compatibilidade entre as LCNF e a matriz polimérica através da lignina, indicando que a lignina residual atual como um agente compatibilizante entre um reforço hidrofílico (CNF) e uma matriz hidrofóbica (PBAT). Os filmes apresentaram flexibilidade e alta transparência, mesmo com elevada razão LCNF:PBAT (3% m/m), que sugere boa homogeneidade da LCNF na matriz. Essas descobertas indicaram a eficiência do protocolo desenvolvido para a produção de LCNF, estabelecendo uma base para sua subsequente adição em matrizes biodegradáveis, que melhora as propriedades mecânicas das matrizes poliméricas.

Título: Estudo de polímeros catiônicos para tratamento de bactérias super resistentes.
Bolsista PIBIC: Pollyana Baptista Buist
Orientador: Dr. Leandro Barbosa
Unidade CNPEM: LNLS

RESUMO:

Sistemas de drug delivery são uma alternativa para tratamento e diagnóstico de diversas doenças, que vão desde o câncer até tratamentos antimicrobianos. Dentre as variadas classes de sistemas drug delivery, cubossomos possuem destaque, tratando-se de nanopartículas caracterizadas por apresentarem alta estabilidade coloidal e capacidade de incorporar diferentes tipos de drogas. Além deste, os polímeros catiônicos também são relevantes no âmbito de bactericidas. Nesse contexto, neste projeto de pesquisa foi conduzido um estudo acerca de cubossomos com adição de polímeros catiônicos além de estudos com os polímeros puros. Desse modo, foram produzidos cubossomos baseados em fitantriol, na presença e ausência de polímeros, utilizando a metodologia top down e caracterizados por meio de diferentes técnicas. Ademais, foram analisadas as concentrações nas quais os sistemas estudados apresentam característica antimicrobiana e foram realizados testes para determinar Concentração Micelar Crítica de polímeros.

Título: Uma abordagem numérica para modelos populacionais considerando incerteza do tipo intervalar nas condições iniciais
Bolsista PIBIC: Raquel Cristina de Andrade Queiroz
Orientador: Dr. Vinícius Francisco Wasques
Unidade CNPEM: ILUM

RESUMO:

Este trabalho apresenta um estudo comparativo entre o princípio de extensão de Zadeh e o princípio de extensão sup-J_0 na propagação de incerteza, focado em modelos populacionais descritos por equações diferenciais. Neste estudo, é considerado que as condições iniciais dos modelos são dados por intervalos, a fim de incorporar a incerteza intrínseca do fenômeno. Para isso, são estudados modelos de dinâmica populacional por meio do método numérico de Euler, que é adaptado à aritmética intervalar. Especificamente, são considerados três modelos, o de Malthus, Verhulst e Gompertz. Para cada modelo, são feitas simulações que permitem visualizar o comportamento e a propagação da incerteza tanto para a soma de Zadeh, quanto para a soma sup-J_0. Os resultados obtidos se alinham aos resultados teóricos, mostrando que a soma de Zadeh propaga a incerteza ao longo do tempo, enquanto o princípio de extensão sup-J_0 diminui a incerteza ao longo do tempo.

Título: Síntese de inibidores de aminoacil-tRNAsintetase derivados de Purina.
Bolsista PIBIC: Renan Marcel Giampauli
Orientador: Dra. Silvana Aparecida Rocco
Unidade CNPEM: LNBio

RESUMO:

A produção de proteínas tem duas fases, a iniciação e a elongação, nas quais são utilizados RNAs transportadores para que a metionil-tRNA sintetase execute a esterificação. Devido à sua importância biológica e às diferenças entre as proteínas de patógenos e hospedeiros, há um grande interesse em produzir inibidores dessas enzimas. Existem duas formas da MetRS (MetRS1 e MetRS2), mas somente a MetRS1, que é encontrada principalmente em bactérias gram-positivas e protozoários parasitas, é sensível aos inibidores conhecidos atualmente. Além disso, a aquisição do gene que codifica a MetRS2 resulta na resistência aos antibióticos que inibem a MetRS1. Portanto, o projeto atual visa desenvolver protocolos para produzir compostos inibidores da MetRS2, já que ela é encontrada principalmente em bactérias gram-negativas, que podem ser patogênicas para plantas, animais e humanos, assim como em patógenos gram-positivos resistentes aos inibidores de MetRS1. Foram realizadas etapas sintéticas, incluindo, uma substituição de cloro por grupamento carbonila, reações de substituição nucleofílica aromática entre outras. Anterior à reação de substituição nucleofílica, foi necessário inserir o grupo de proteção t-Boc em um dos grupamentos amina dos linkers correspondentes. Esta etapa foi essencial para evitar formação de um dímero. Para as etapas seguintes, realizou-se a proteção do nitrogênio dos aminoácidos Lmetionina e L-norleucina com o reagente (Boc)2O e acoplamento deste aos derivados da purin-6-ona com os linkers correspondentes. Os compostos foram caracterizados por técnicas de ressonância magnética nuclear e etapas reacionais acompanhadas por cromatografia em camada delgada. Como parte complementar do trabalho na área de desenvolvimento de antimicrobianos, foram realizados ajustes de metodologias das etapas da rota sintética para a preparação de derivados de piridopirimidonas. Os intermediários sintéticos também foram testados com o intuito de conhecer mais sobre as suas propriedades de inibição da atividade microbiana.

Título: Análise do encolhimento subcelular em fibroblastos NIH/3T3 sob diferentes métodos de secagem: Implicações para microscopia de alta resolução.

Bolsista PIBIC: Sarah Pereira Teixeira Silva
Orientador: Dra. Renata Santos Rabelo
Unidade CNPEM: LNLS

RESUMO:

A microscopia de luz síncrotron tem se tornado uma ferramenta essencial para a visualização detalhada de estruturas subcelulares, demandando protocolos de preparo de amostras biológicas que minimizem artefatos, especialmente o encolhimento. Embora a literatura frequentemente aborde o encolhimento em termos de superfície ou volume total da amostra, há uma lacuna significativa no entendimento deste fenômeno a nível subcelular. Este estudo investigou o encolhimento de estruturas subcelulares em fibroblastos NIH/3T3 submetidos a quatro métodos de secagem: liofilização sem desidratação, liofilização com desidratação, secagem ao ar e secagem no ponto crítico do CO?. Utilizamos duas abordagens complementares: fratura por congelamento e slice-view, empregando microscopia eletrônica de varredura (MEV) e feixe de íons focalizado (FIB) para análise. A fratura por congelamento com inclusão da amostra em suporte físico demonstrou eficácia significativa na redução do encolhimento subcelular em três das quatro condições testadas, quando comparada a amostras sem suporte. O slice-view também revelou diferenças significativas na preservação de estruturas subcelulares entre os métodos, destacando a secagem no ponto crítico do CO? como superior na minimização do encolhimento celular. Nossos resultados enfatizam a importância da seleção de técnicas de secagem e do uso de suportes físicos para otimizar a preservação de amostras biológicas. Este estudo fornece insights importantes para o aprimoramento de protocolos de preparo de amostras, potencializando investigações mais detalhadas da estrutura e função celular e aprofundando nossa compreensão de processos biológicos fundamentais.

Título: Otimização do Tratamento de Superfícies para Análises com Microscopia de Tunelamento por Varredura.

Bolsista PIBIC: Theo de Almeida Vasconcelos
Orientador: Dra. Bruna Fernanda Baggio
Unidade CNPEM: LNNano

RESUMO:

A Microscopia de Tunelamento por Varredura (STM) desempenha um papel fundamental no estudo da física de superfícies, permitindo pesquisas em diversos materiais condutores e semicondutores com resolução atômica. A qualidade das superfícies das amostras é fundamental, pois o STM é extremamente sensível a variações de altura. A superfície analisada deve ser limpa e plana em nível atômico, exigindo a realização de tratamento adequado. Portanto, a otimização do tratamento para cada amostra é de suma importância. Este estudo foi realizado com o equipamento modelo Aarhus 150 SPM da empresa SPECS instalado no laboratório de crescimento in-situ do LNNano. As medidas são realizadas em ultra-alto vácuo e em temperatura ambiente. Em substratos metálicos como o Cu(100), que foi utilizado para estas análises, são feitos ciclos de desbaste iônico (sputtering) e tratamento térmico (annealing). Além disso, há outras formas de limpeza como a clivagem por scotch-tape, para o Highly oriented pyrolytic graphite (HOPG). As condições de tratamento podem variar dependendo dos equipamentos e materiais utilizados. Dessa forma, foram realizadas diversas tentativas para o tratamento, modificando o número de ciclos, o tempo e a temperatura dos annealings. Seguidas por análises no STM para compreender as consequências dos parâmetros utilizados com a topografia das imagens obtidas. Ao comparar as imagens com os diferentes parâmetros de tratamento foi possível definir as correntes de emissão ideais para alcançar as temperaturas desejadas com o Cu(100) e confirmar incertezas relacionadas aos aparatos de medição de temperatura, um termopar próximo da amostra e um pirômetro. Assim sendo, foi possível obter imagens de terraços e degraus do Cu(100) e o mapeamento do HOPG com resolução atômica. Inicialmente, com apenas os valores do termopar de referência, o tempo para alcançar a temperatura foi excessivo, e a temperatura de emissão variou entre os ciclos inesperadamente. As imagens obtidas apresentaram alta rugosidade, buracos e degraus além do esperado. Após corrigir o tempo total e a temperatura de annealing, foi possível otimizar o número de ciclos, resultando em superfícies de alta qualidade, com áreas planas, terraços e degraus espaçados. Também foi possível identificar e corrigir alguns dos problemas relacionados aos aparatos, como o mau contato do termopar na chapinha e a calibração do pirômetro.

Título: Investigação da estrutura local de composto Heusler (Mn3Sn) sob deformação uniaxial: desenvolvimento e aplicação da técnica 3D-PDF.

Bolsista PIBIC: Theo de Almeida Vasconcelos
Orientador: Dr. Guilherme Calligaris de Andrade
Unidade CNPEM: LNLS

RESUMO:

Ao longo dos anos, técnicas baseadas no espalhamento total de raios X vêm ganhando popularidade por relacionar a funcionalidade de materiais com variações no ordenamento local de átomos, aqueles que fogem da estrutura média revelada na difração clássica de picos de Bragg. Nos casos de sistemas policristalinos, muito utilizada é a função de distribuição de pares (PDF) dada, de forma resumida, pela transformada de Fourier das intensidades de espalhamento total de raios X. Contudo, essa abordagem não carrega informação direcional, pela natureza policristalina das amostras. Nesse sentido, sua expansão tridimensional, a 3D-PDF, realizada em sistemas monocristalinos, permite obter a distribuição das distâncias interatômicas de forma vetorial, o que soluciona as possíveis ambiguidades da PDF. Além disso, há a 3D-PDF diferencial (3D-?PDF), que se utiliza apenas das intensidades do espalhamento difuso de raios X, e, com isso, carrega somente informação dos desvios da estrutura média, isto é, da ordem local e desordens correlacionadas na estrutura cristalina, o que traz vantagens para sua análise em relação a 3D-PDF. Portanto, dado seu grande potencial de aplicação, é de interesse de instalações síncrotrons viabilizar a análise de 3D-?PDF. Aqui, como prova de conceito, foram analisados monocristais em condição ambiente e sob deformação uniaxial do semimetal de Weyl tipo Heusler Mn3Sn, que apresenta efeito Hall anômalo (AHE). Espera-se verificar dependência do AHE com deformação estrutural em material bulk, já observada em filmes finos, e explorar quaisquer variações do ordenamento local ou desordem correlacionada induzidos pela deformação. Foram realizadas medidas de espalhamento total na linha de luz EMA em duas amostras: uma sem deformação e outra com deformação entre -0,30% e +0,30%, aproximadamente ao longo da direção [110]. Serão apresentados resultados preliminares do volume de espaço recíproco sondado, além de uma discussão da espessura da amostra determinada para a otimização de detecção de espalhamento difuso de raios X com o uso da célula de strain uniaxial, e perspectivas com relação ao tratamento de dados e remoção de artefatos para o emprego da 3D-?PDF.