

TEMA PARA MESTRADO – EDITAL N° 03/2021

ÁREA DE PESQUISA: Engenharia Bioquímica

PROFESSOR: Adilson José da Silva

TÍTULO DO TEMA: Otimização da produção de ácido 3-hidroxi propiônico por linhagens recombinantes de *E. coli*

RESUMO

O ácido 3-hidroxi propiônico (3-HP) representa um bloco construtor promissor no contexto das biorrefinarias, podendo ser utilizado como precursor de uma variedade de produtos como, por exemplo, bioplásticos. Entretanto, sua produção por rota química apresenta vários problemas tecnológicos e ambientais, e por isso busca-se uma alternativa biotecnológica. Em nosso grupo de pesquisa foi desenvolvida uma linhagem geneticamente modificada da bactéria *Escherichia coli* capaz de produzir o 3-HP. Alguns passos foram dados no sentido de otimizar a produção deste composto, e este projeto visa dar continuidade a este trabalho. Para isso, estão previstas algumas modificações genéticas adicionais no sistema de forma a eliminar a necessidade de utilização de indutor (IPTG) e antibióticos na produção do 3-HP, tornando o processo mais barato e factível para aplicação em escala industrial. Além disso, o projeto prevê também o cultivo da linhagem produtora em biorreatores de bancada para otimizar os parâmetros de produção. Assim, ao final, pretende-se chegar à construção de uma linhagem de *E. coli* cujas alterações metabólicas implementadas lhe transformem em uma fábrica celular para produção eficiente de 3-HP.

Para a realização deste trabalho, procura-se um candidato com formação na área de Engenharia Química ou afins, Biotecnologia, Química, ou demais áreas relacionadas, com interesse em estudos envolvendo engenharia genética de microrganismos e desenvolvimento de bioprocessos. Conhecimentos de técnicas básicas de Biologia Molecular e Microbiologia são desejáveis, mas não há exigência de experiência prévia na área.

Entre os conhecimentos que devem ser adquiridos ao longo do desenvolvimento do projeto, estão:

- técnicas de cultivo de microrganismos em frascos agitados e reatores de bancada
- procedimentos de biologia molecular, como clonagem e deleção de genes em *E. coli*
- utilização de softwares de bioinformática, como *SnapGene* e *Optflux*
- técnicas analíticas aplicadas à quantificação de ácidos orgânicos, DNA, proteínas, etc
- redação de artigos e relatórios científicos

PALAVRAS-CHAVE: *E. coli*, ácido 3-hidroxi propiônico, 3-HP, Engenharia Metabólica.

TEMA DE MESTRADO – EDITAL Nº 03/2021

ÁREA DE PESQUISA: Engenharia Bioquímica

DOCENTE ORIENTADOR: Alberto Colli Badino Junior

TÍTULO: Avaliação das condições de operação na produção de agente de controle biológico por *Streptomyces sp* em cultivos submersos

RESUMO

A utilização do controle biológico contra fungos fitopatogênicos, nematoides e insetos vem crescendo como alternativa e/ou complemento para o uso de produtos químicos, tornando o manejo agrícola ambientalmente amigável, o que contribui para uma agricultura mais sustentável. Microrganismos do gênero *Streptomyces* são bactérias filamentosas com predominância no solo, sendo responsáveis pela decomposição de matéria orgânica complexa, produção de antibióticos e outros metabólitos secundários de interesse industrial. Apesar da grande importância ecológica das *Streptomyces*, existe uma grande área do conhecimento a ser explorada a de transformação do microrganismo com potencial agrônomo em um bioproduto. Uma das etapas fundamentais é o desenvolvimento de bioprocessos buscando as condições para esporulação do estreptomiceto. Dessa forma, o objetivo deste projeto é estudar as condições de operação visando a produção de agente de controle biológico por *Streptomyces sp* em biorreator agitado e aerado.

Palavras-chaves: Máximo 05 (cinco) palavra 1; palavra 2; palavra 3; palavra 4; palavra 5

TEMA PARA MESTRADO – 1º SEMESTRE DE 2022

ÁREA DE PESQUISA: Termodinâmica e Processos de Separação

PROFESSOR: André Bernardo

TÍTULO: Determinação do equilíbrio sólido-líquido de aminoácidos de interesse industrial

RESUMO:

Aminoácidos são moléculas orgânicas que contêm um radical amina e um radical carboxila em sua estrutura. São moléculas utilizadas como aditivos à nutrição animal, em suplementação de dietas, como agentes quelantes de fertilizantes e na síntese de medicamentos e cosméticos. Essas moléculas têm uma complexidade estrutural que leva à alta probabilidade de ocorrência de fenômenos como o polimorfismo e o solvatomorfismo. Tais fenômenos podem ter impacto comercial – como na proteção de patentes – e de desempenho – como o prazo de validade e a disponibilidade em formulações.

Neste contexto, este trabalho propõe a determinação do equilíbrio sólido-líquido de aminoácidos de interesse industrial em mistura de solventes (água-etanol) e (água-propileno glicol), e em diferentes temperaturas, e o ajuste desses dados experimentais com diferentes modelos termodinâmicos.

PALAVRAS-CHAVE: solubilidade; equilíbrio sólido-líquido; aminoácidos;

TEMA DE MESTRADO – EDITAL Nº 03/2021

ÁREA DE PESQUISA: Engenharia Bioquímica

DOCENTE ORIENTADOR: Cristiane Sanchez Farinas

TÍTULO: Desenvolvimento do processo de cultivo e co-imobilização de inoculantes microbianos

RESUMO

A agricultura brasileira é altamente dependente dos fertilizantes fosfatados para manter a demanda agrícola, devido aos baixos teores de P disponível no solo. A produção de fertilizantes fosfatados envolve o tratamento químico de rochas fosfáticas para a obtenção do fósforo inorgânico solúvel, porém nesse processo são gerados subprodutos danosos ao meio ambiente. O uso de microrganismos como biofertilizantes ou inoculantes é uma alternativa ambientalmente mais favorável frente aos fertilizantes químicos e pode contribuir para o desenvolvimento de uma agricultura mais sustentável. Dentre os microrganismos que vem sendo estudados como inoculantes, os fungos filamentosos do gênero *Aspergillus* e as bactérias do gênero *Bacillus* se destacam pela produção de enzimas e metabólitos secundários que atuam como solubilizadores de fosfato. No entanto, esses bioinsumos precisam ser formulados para que tenham um tempo de prateleira adequado e atendam as demandas do setor agropecuário. Dessa forma, o objetivo deste projeto de mestrado é estudar o processo de cultivo microbiano na presença de matrizes que atuem como suportes para imobilização das células. Serão estudados diferentes parâmetros operacionais do processo de cultivo e tipos de matrizes visando à obtenção de um produto com as características desejadas para comercialização como biofertilizante.

Palavras-chaves: Bioprocesso; cultivo microbiano; encapsulamento; imobilização; inoculantes

TEMA DE MESTRADO – EDITAL Nº 03/2021

ÁREA DE PESQUISA: Controle Ambiental

DOCENTE ORIENTADOR: Edson Luiz Silva

TÍTULO: Avaliação do desempenho de biorreatores anaeróbios de leito granular expandido e de leito fixo compartimentado para remoção de micropoluentes emergentes

RESUMO

A Agenda 2030 das Nações Unidas propõe o desenvolvimento de pesquisas, no âmbito de biorremediação de micropoluentes emergentes (MEs), para o gerenciamento sustentável de recursos hídricos.. Exemplos de ME são resíduos farmacêuticos, desreguladores endócrinos, plastificantes, pesticidas, edulcorantes, produtos de higiene pessoal, entre outros. Quando os ME estão presentes no ambiente podem ocasionar efeitos adversos à diferentes níveis tróficos da biota, como desregulação endócrina à fauna, toxicidade à flora e prejudicar o processo de depuração natural de corpos aquáticos. Nesse cenário, destaca-se a importância de pesquisas relacionadas a biorremediação de ME, sendo necessário buscar alternativas para favorecer maior degradação desses compostos (GRANATTO, 2021).

Atualmente os estudos de comportamento e degradação de MEs estão concentrados mais em processos físico-químicos avançados (ozonização, adsorção em carvão ativado, troca iônica, filtração em membranas, processos oxidativos avançados) e biológicos aeróbios (Lodos Ativados e Reatores com Membranas - MBR), sendo que ainda há poucos estudos enfocando processos anaeróbios para biodegradação desses compostos.

Face ao exposto, esse trabalho busca investigar as melhores condições de remoção de MEs em reatores anaeróbios batelada, e para as melhores condições obtidas avaliar desempenho de reatores anaeróbios de leito granular expandido e de leito fixo compartimentado na remoção de MEs, servindo de base para comparação com outras configurações de reatores anaeróbios e aeróbios usados/testados atualmente.

OBSERVAÇÃO: Esse projeto de pesquisa está inserido no Projeto PITE 2020/09912-6, financiado pela FAPESP e SABESP, intitulado “Ativa-ETE: avaliação de tecnologias inovadoras voltadas à remoção de nitrogênio e micropoluentes em ETE”.

Palavras-chaves: ETE; esgoto sanitário; biofilme; biorreatores; micropoluentes; planejamento estatístico de experimentos.

TEMA DE MESTRADO – EDITAL Nº 03/2021

ÁREA DE PESQUISA: Controle Ambiental

DOCENTE ORIENTADOR: Edson Luiz Silva

TÍTULO: Otimização da produção de H₂ e CH₄ em reatores anaeróbios a partir produtos/subprodutos/resíduos visando recuperação de energia em biorrefinarias agroindustriais

RESUMO

Reduzir o custo do tratamento de águas residuárias e de encontrar formas de produzir produtos úteis a partir desses resíduos, vem ganhando importância na perspectiva de atingir a sustentabilidade ambiental. Uma forma de reduzir o custo do tratamento de águas residuárias é gerar bioenergia e subprodutos com valor agregado, a partir da matéria orgânica presente nas águas residuárias, ao mesmo tempo realizando o seu tratamento.

O processo de digestão anaeróbia envolve 2 grupos principais de consórcios de microrganismos: as bactérias acidogênicas, que decompõem os substratos principalmente em H₂, ácido acético e CO₂; e as arqueias metanogênicas, que convertem o ácido acético, H₂ e CO₂ em CH₄. Assim, em processos anaeróbios de fases separadas, estes grandes grupos de microrganismos podem ser combinados de modo a permitir a extração de H₂ em um primeiro estágio e CH₄ em um segundo estágio.

O aspecto atrativo da produção biológica de H₂ é a possibilidade de utilização de efluentes ricos em matéria orgânica como substrato, porém o principal problema relativo ao potencial poluidor dos efluentes não é resolvido no estágio de produção de H₂, uma vez que a remoção de matéria orgânica é baixa durante o processo. Por outro lado, a geração de CH₄ envolve necessariamente remoções significativas de matéria orgânica porque os ácidos e outros produtos remanescentes gerados durante a produção de H₂ constituem os principais substratos para a produção desse gás.

Face ao exposto, esse trabalho busca avaliar a produção de H₂ e CH₄ utilizando a digestão anaeróbia de produtos/subprodutos/resíduos agroindústrias (tais como, caldo de cana glicérol, vinhaça, melaço, etc.), em reatores batelada de fase única. Posteriormente, para as melhores condições obtidas para produção de H₂ serão avaliados reatores batelada em série (reator acidogênico seguido de metanogênico), assim como em reatores anaeróbios contínuos a serem definidos.

OBSERVAÇÃO 1: Este tema está incluído na área de abrangência do PRH 39 ANP/FINEP – Biocombustíveis e Energias Alternativas - e poderá ser beneficiado com bolsa de estudos deste Programa. Mais informações sobre o PRH 39 podem ser obtidas no link: <https://www.deq.ufscar.br/pt-br/prh-anp/prh-anp-1>

OBSERVAÇÃO 2: Esse projeto de pesquisa está inserido no Projeto Temático 2015/06246-7, financiado pela FAPESP, intitulado “Aplicação do conceito de biorrefinaria a estações de tratamento biológico de águas residuárias: O controle da poluição ambiental aliado à recuperação de matéria e energia”.

Palavras-chaves: Biocombustíveis; biohidrogênio; biometano; digestão anaeróbia em 2 estágios; planejamento estatístico de experimentos.

TEMA DE MESTRADO 1 – PPGEQ/UFSCar - EDITAL Nº 03/2021

ÁREA DE PESQUISA: Reatores Químicos Heterogêneos e Catálise

DOCENTE ORIENTADOR: Ernesto Antonio Urquieta Gonzalez

TÍTULO: Desenvolvimento de catalisadores metálicos suportados em nanotubos de carbono aplicados a hidrogenação do CO₂

RESUMO

A produção de nanotubos de carbono (CNTs) e hidrogênio pode ser feita pela decomposição do metano utilizando um catalisador metálico suportado. Os metais (Fe, Ni, Co), em conjunto com os suportes (alumina, sílica, magnésia e zircônia), são os mais utilizados na decomposição do metano. Single-walled carbon nanotubes (SWNTs) e multi-walled carbon nanotubes (MWNTs) podem ser produzidos dependendo das condições reacionais e do catalisador empregado. O crescimento de carbono sobre a superfície de um catalisador depende de vários fatores, como por exemplo: tipo e teor do metal, tamanho médio da partícula metálica, interação metal-suporte e velocidade de difusão do carbono. O catalisador de Ni é o mais ativo para a decomposição do metano e mostra elevada atividade em temperaturas entre 450 e 500 °C. O Cobalto apresenta baixa atividade catalítica e a produção de CNTs é bem menor em relação ao catalisador de Ni. O catalisador de Ferro é interessante para a produção de CNTs, mas a reação de decomposição do metano deve ser realizada em temperaturas elevadas (acima de 650 °C). Os CNTs preparados via decomposição do metano precisam ser purificados para posterior utilização como suporte de catalisadores. Esses materiais podem ser utilizados como suporte de catalisadores em diversas reações catalíticas e muitos catalisadores M/CNTs tem apresentado atividade bem superior aos catalisadores de metais suportados em óxidos. A hidrogenação do dióxido de carbono (CO₂) é importante na produção de metanol ou gás natural sintético, mas os catalisadores empregados apresentam baixa atividade ou se desativam com o tempo. Portanto, o desenvolvimento de catalisadores metálicos suportados em CNTs pode aumentar a atividade e a estabilidade na hidrogenação do CO₂ devido à baixa mobilidade dos metais no interior dos nanotubos. Neste trabalho, a proposta é preparar, purificar e caracterizar CNTs para serem utilizados como suporte na preparação de catalisadores metálicos, sendo que esses catalisadores serão empregados na hidrogenação do CO₂. Os materiais serão preparados por impregnação e caracterizados por difração de raios-x, microscopia eletrônica de transmissão, espectroscopia Raman e medidas de adsorção de gases. A decomposição do metano será realizada em um reator de leito fixo, operado a pressão de 1 atm e em temperaturas entre 400 e 600 °C. Os catalisadores de M/CNT serão a base de Cu e Ni e as medidas da hidrogenação do CO₂ serão realizadas em reator de leito fixo, com variação da pressão entre 1 e 50 atm e temperatura entre 200 e 300 °C.

Palavras-chaves: hidrogenação do CO₂; nanotubos de carbono; decomposição do metano; catalisadores suportados;

TEMA MESTRADO 2 – PPGEQ/UFSCar - EDITAL Nº 03/2021

ÁREA DE PESQUISA: Reatores Químicos Heterogêneos e Catálise

PROFESSOR: Ernesto Antonio Urquieta-González

TÍTULO: Zeólitas como Catalisadores para a Transformação de Biomoléculas em Produtos Químicos de Maior Valor e Demanda

RESUMO:

A pesquisa se insere dentro de fortes desafios tecnológicos impostos pela sociedade à comunidade científica. Um deles se refere à substituição de processos químicos industriais homogêneos, altamente contaminantes, por processos catalíticos heterogêneos. O outro, também de grande relevância, considera a substituição de matérias primas de origem fóssil por outras de origem renovável, minimizando os impactos ao meio ambiente e contribuindo para a sustentabilidade do planeta. Assim, processos catalíticos heterogêneos aplicados à transformação de biomoléculas, vem adquirindo importância estratégica no cenário nacional e internacional. Com esse objetivo, durante o desenvolvimento da pesquisa em nível de mestrado, serão preparados e caracterizados catalisadores à base de zeólitas (peneiras moleculares), com propriedades físico-químicas e porosidade controladas, que serão aplicadas na transformação de moléculas plataforma derivadas de lignocelulose a intermediários ou produtos químicos de maior valor e demanda. A pesquisa será realizada nos Laboratórios de Catálise do Centro de Pesquisas em Materiais Avançados e Energia (CPqMAE/UFSCar: <https://www.archdaily.com/777506/laboratories-ufscar-vigliecca-and-associados>), a qual faz parte da temática do projeto em desenvolvimento no Centre of Excellence for Research in Sustainable Chemistry (CERSusChem/UFSCar), financiado pela FAPESP".

PALAVRAS-CHAVE: catálise heterogênea, zeólitas, produtos bio-derivados, lignocelulose, processos químicos sustentáveis.

TEMA PARA MESTRADO – 1º SEMESTRE DE 2022

ÁREA DE PESQUISA: SISTEMAS PARTICULADOS

PROFESSOR ORIENTADOR: FÁBIO BENTES FREIRE

TÍTULO: ESTUDO SOBRE A ADAPTABILIDADE DE UM MODELO DINÂMICO PARA A SECAGEM DE SÓLIDOS REGULARES EM LEITO FIXO ESPESSO

OBSERVAÇÃO: TRABALHO EM CONJUNTO COM O PROF. JOSÉ TEIXEIRA FREIRE

RESUMO: A seleção do melhor modelo para descrever matematicamente um processo obedece a critérios de desempenho objetivos definidos por índices de desvio entre medidas e estimativas. Existem também escolhas subjetivas segundo as quais, o grau de familiaridade do usuário, a facilidade não só em programar como também em obter os parâmetros físicos do modelo são levadas em conta. Há que se dizer que em aplicações cotidianas, um modelo conveniente deve atender com robustez a um domínio de validade o mais amplo possível, englobando diferentes condições de operação e produtos de interesse. Se por um lado, um modelo demasiadamente específico pode ser útil em algumas situações, por outro, existem casos em que a versatilidade e a simplicidade podem tornar viável uma determinada técnica de controle e de otimização, por exemplo. A presente proposta de mestrado prevê uma análise sobre a adaptabilidade de um modelo dinâmico fenomenológico para a secagem em leito fixo espesso, a princípio, dos seguintes sólidos regulares:

- 1) Esferas de alumina
- 2) Grãos de soja
- 3) Grãos de cevada

O grupo de secagem da área de sistemas particulados desenvolveu e verificou experimentalmente, ao longo das últimas décadas, modelos físicos adaptativos baseados nos balanços de massa e de energia para sólidos regulares e irregulares. O estudo aqui proposto usaria como ponto de partida os modelos mais recentes, buscando entender, através de experimentos e simulações, como seria adaptar a programação computacional para os diferentes sólidos acima sugeridos.

PALAVRAS-CHAVE: Secagem, leito fixo, modelos adaptativos, sólidos regulares

TEMA DE MESTRADO – EDITAL N° 03/2021

ÁREA DE PESQUISA: Simulação e Controle de Processos Químicos

DOCENTE ORIENTADOR: Prof. Felipe Fernando Furlan
Prof. Paulo Waldir Tardioli

TÍTULO: Síntese e análise técnico-econômica da produção de biolubrificantes em biorrefinarias

RESUMO

Lubrificantes são compostos orgânicos que reduzem a fricção entre duas superfícies em movimento. Por consequência, eles reduzem o aquecimento e o desgaste mecânico das partes. O mercado mundial de lubrificantes atingiu a marca de 126,5 bilhões de dólares em 2019 e espera-se um crescimento de 2,4% até 2022. Atualmente os lubrificantes são majoritariamente produzidos a partir do petróleo. Porém, estes apresentam algumas desvantagens. Uma delas é a alta toxicidade desses compostos, que aliada ao descarte incorreto de cerca de 40 a 55% de todo o lubrificante consumido, aumenta a necessidade da substituição destes por alternativas de menor impacto. Os biolubrificantes podem substituir os lubrificantes na grande maioria de suas aplicações, apresentando as seguintes vantagens: menor toxicidade, maior poder lubrificante, ponto de flash superior, menor volatilidade, maior índice de viscosidade, entre outras. Outra vantagem é o fato de que diversas matérias-primas renováveis podem ser usadas para sua produção, como óleos vegetais, gorduras animais, óleos microbianos, e óleos residuais. Esses compostos podem ser produzidos por diversas reações químicas como esterificação, transesterificação e hidroesterificação usando diferentes tipos de catalisadores químicos ou enzimáticos. Entretanto, a viabilidade econômica desses processos produtivos ainda não foi estudada. Nesse contexto, o presente projeto de mestrado tem por objetivo a síntese de um processo para produção de biolubrificante a partir de resíduos das indústrias da produção de etanol e óleo de soja, sua simulação e análise técnico-econômica no software EMSO. Esse projeto se insere no Projeto Temático “Da fábrica celular à biorrefinaria integrada Biodiesel-Bioetanol: uma abordagem sistêmica aplicada a problemas complexos em micro e macro escalas” (proc. 16/10636-8), coordenado pelo Prof. Roberto C. Giordano.

Palavras-chaves: Biolubrificantes; Análise técnico-econômica; Análise de ciclo de vida; Biorrefinarias

TEMA PARA MESTRADO – 1º SEMESTRE DE 2022

ÁREA DE PESQUISA: Engenharia Bioquímica

PROFESSOR ORIENTADOR: Profa. Dra. Fernanda Perpétua Casciotori

TÍTULO: Recuperação e estabilização de *Streptomyces misionensis* cultivada em estado sólido visando aplicação em controle biológico de pragas

OBSERVAÇÃO: "Este tema está incluído no projeto de extensão 23112.016928/2021-87 e poderá ser beneficiado com bolsa de estudos da empresa parceira."

RESUMO: Compostos sintéticos ou químicos proporcionam controle de pragas alvos em curto prazo, porém apresentam alta ou média toxicidade aos mamíferos, além de ser comum que várias pragas adquiram resistência aos agentes sintéticos em função do tempo de uso, requerendo formulações cada vez mais concentradas e consequentemente mais tóxicas. A aceitabilidade e a utilização dos agentes biológicos crescem com o passar dos anos, mesmo com custos acima dos praticados para os agentes químicos, em decorrência de vantagens ao meio ambiente e à saúde. Os agentes biológicos proporcionam controle prolongado das pragas, baixa ou nenhuma toxicidade aos seres humanos, alta seletividade e eficiência na mortandade de pragas. No entanto, seu processo industrial ainda enfrenta desafios tecnológicos, tais como a necessidade de aumento da eficiência de recuperação do agente ativo e da estabilidade das formulações. Diante do exposto, este projeto tem como objetivo desenvolver soluções tecnológicas para recuperação e estabilização da actinobactéria *Streptomyces misionensis* CBMAI 1955 cultivada em arroz pela empresa Agrivalle, que gentilmente cederá material fermentado para as etapas de *downstream* previstas neste projeto. Serão conduzidos testes em escala de frascos para avaliação do melhor fluido de recuperação da biomassa celular a partir do material cultivado, considerando a eficiência de extração e a estabilidade da formulação líquida como variáveis respostas. Uma vez definido o fluido apropriado, serão feitos testes de extração sólido-líquido por percolação do material alocado em uma coluna composta por módulos feitos em aço inox, tendo como mínimo desejável de especificação do extrato o teor de 10^9 UFC/mL do agente biológico ativo. Serão variadas a proporção de líquido para sólido fermentado, a vazão de escoamento e o tempo de percolação. Por fim, o extrato será destinado a operações de concentração por evaporação a vácuo (temperatura até 35 °C), precipitação fracionada e liofilização. Espera-se, ao final do trabalho, ter desenvolvido um processo eficiente de recuperação da biomassa celular, estabilizada em formulação capaz de garantir a manutenção da atividade biológica durante o armazenamento e a aplicação no campo.

PALAVRAS-CHAVE: controle biológico; bioprocessos; formulações; downstream.

TEMA DE MESTRADO – EDITAL Nº 03/2021

ÁREA DE PESQUISA: Sistemas Particulados

DOCENTE ORIENTADOR: Francisco Guilherme Esteves Nogueira

TÍTULO: Desenvolvimento de semicondutores para fotoconversão de CO₂ em produtos com valor agregado.

RESUMO

Um dos grandes desafios da sociedade moderna, é a redução ou conversão de dióxido de carbono (CO₂) proveniente da queima de combustíveis fósseis ou de processos industriais, como, por exemplo, a indústria cimenteira que é responsável por aproximadamente 8 % da emissão antropogênica de CO₂. Assim, o desenvolvimento de novas tecnologias economicamente viáveis e energeticamente favoráveis para conversão de CO₂ a produtos com valor agregado, torna-se fundamental para o desenvolvimento econômico e ambiental, uma vez que este gás é um dos principais responsáveis pelo efeito estufa.

Os processos fotocatalíticos para conversão de CO₂ pode ser uma alternativa viável, tanto do ponto de vista ambiental quanto econômico, uma vez que a própria radiação solar pode ser utilizada como fonte de luz para o processo (“*fotossíntese artificial*”).

Neste contexto, este projeto tem como objetivo principal o desenvolvimento de semicondutores a base de óxido de nióbio (Nb₂O₅) e óxido de tungstênio (WO₂) modificados com espécies de Cu e Fe utilizando diferentes métodos de síntese, para a fotoconversão de CO₂ em produtos com maior valor agregado, tais como: metano, metanol, ácido fórmico, entre outros.

Este projeto visa dar continuidade a um trabalho recentemente publicado pelo nosso grupo de pesquisa intitulado: Enhancing Nb₂O₅ activity for CO₂ photoreduction through Cu nanoparticles cocatalyst deposited by DC-magnetron sputtering, **JOURNAL OF CO₂ UTILIZATION**, v. 53, p. 101739, 2021.

Mais informações sobre o projeto e a linha de pesquisa podem ser obtidas por **e-mail**: nogueira@ufscar.br.

Endereço para acessar o currículo Lattes: <http://lattes.cnpq.br/8117497993539795>

Palavras-chaves: dióxido de carbono, semicondutores; fotocatalise

TEMA DE MESTRADO – EDITAL Nº 03/2021

ÁREA DE PESQUISA: Controle Ambiental

DOCENTE ORIENTADOR: Gabriela Cantarelli Lopes

TÍTULO: Desenvolvimento de técnicas de medição e automação de leitos fluidizados líquido-sólido voltadas ao estudo da fluidodinâmica de biorreatores

RESUMO

Com o desenvolvimento industrial e a expansão populacional é crescente a busca por fontes de energia renováveis que possam substituir os combustíveis fósseis, cuja escassez é tida como um problema iminente num futuro próximo. Neste contexto, os biocombustíveis se apresentam como uma alternativa muito interessante, uma vez que, além de renováveis, podem, muitas vezes, ser obtidos a partir de resíduos ou subprodutos de outros processos industriais. Por serem equipamentos altamente versáteis e eficientes em termos de transferência de massa e energia, os leitos fluidizados têm sido frequentemente usados na produção de biocombustíveis como, por exemplo, etanol e biogases. Leitos fluidizados gás- sólido de partículas pequenas e uniformes já foram extensamente estudados. No entanto, quando o fluido presente neste processo é um líquido viscoso e as partículas são grandes e não convencionais em termos de características superficiais e mecânicas, como é o caso das biopartículas, pouco se encontra na literatura sobre a fluidodinâmica desses leitos. O estudo da fluidodinâmica de leitos fluidizados exige o conhecimento de algumas variáveis que podem ser difíceis de medir com precisão, como, por exemplo, a altura de expansão do leito e a velocidade das partículas. O desenvolvimento de técnicas de medição adequadas é imprescindível para a confiabilidade dos resultados. O objetivo deste trabalho é estudar a fluidodinâmica do escoamento líquido-sólido usando partículas com características mecânicas semelhantes às biopartículas usadas nos processos de geração de biocombustíveis. Técnicas de medição deverão ser desenvolvidas usando sensores de baixo custo e microcontroladores Arduino. Experimentos serão, então, efetuados usando partículas com diferentes características mecânicas e superficiais, sendo fluidizadas por líquidos mais ou menos viscosos. Os resultados obtidos auxiliarão na proposição e validação de modelos com grau de complexidade moderado a alto. Além disso, espera-se, com este estudo, contribuir para o entendimento de como partículas com diferentes características interagem entre si e com o fluido circundante, de forma a auxiliar no projeto e operação de biorreatores de leito fluidizado usados na produção de biocombustíveis.

OBSERVAÇÃO: Este tema está incluído na área de abrangência do PRH 39 ANP/FINEP – Biocombustíveis e Energias Alternativas - e poderá ser beneficiado com bolsa de estudos deste Programa. Mais informações sobre o PRH 39 podem ser obtidas no link: <https://www.deq.ufscar.br/pt-br/prh-anp/prh-anp-1>

Palavras-chaves: Leito fluidizado; Arduino; biorreatores; biocombustíveis; fluidodinâmica.

TEMA DE MESTRADO – EDITAL Nº 03/2021

ÁREA DE PESQUISA: Reatores Heterogêneos e Catálise

DOCENTE ORIENTADOR: Janaina Fernandes Gomes

TÍTULO: Estudo quimiométrico sobre a hidrogenação de CO₂ em catalisadores de cobre para produção de compostos C₂₊

RESUMO

A reciclagem de CO₂ voltada à produção de insumos químicos é uma alternativa à redução do acúmulo desse gás na atmosfera. Como consequência, por meio dessa via é possível minimizar impactos ambientais negativos e atender a interesses industriais. Dentre as estratégias propostas para o aproveitamento de CO₂ como matéria-prima, aquelas que incluem a catálise heterogênea se destacam, pois através delas é possível produzir combustíveis líquidos, como o etanol, além de outros compostos com dois ou mais átomos de carbono (compostos C₂₊), que são de interesse comercial.

Em reações gás-sólido, a hidrogenação catalítica de CO₂ com H₂ (como fonte de hidrogênio) sobre materiais à base de Cu é, em geral, processada sob altas pressões e resulta na formação de compostos com um átomo de carbono (metanol, CO e CH₄). Estudos recentes inéditos, desenvolvidos no LabCat do DEQ/UFSCar, em que se empregou apenas cobre puro como catalisador e uma fonte alternativa de hidrogênio, levaram à formação de etanol sob pressão atmosférica. Nesse sistema, o impacto da composição do catalisador e das condições de reação na conversão de CO₂ e na seletividade da reação à formação de compostos C₂₊ ainda é pouco explorado.

No presente projeto de mestrado, propõe-se o desenvolvimento de um estudo de otimização quimiométrica da hidrogenação de CO₂ a compostos C₂₊ sobre catalisadores à base de cobre, envolvendo as seguintes variáveis: composição do catalisador, relação entre as pressões parciais dos reagentes, velocidade espacial e pressão total.

OBSERVAÇÃO: Este tema está incluído na área de abrangência do PRH 39 ANP/FINEP – Biocombustíveis e Energias Alternativas - e poderá ser beneficiado com bolsa de estudos deste Programa. Mais informações sobre o PRH 39 podem ser obtidas no link: <https://www.deq.ufscar.br/pt-br/prh-anp/prh-anp-1>

Palavras-chaves: hidrogenação de CO₂; produção de etanol; cobre; estudo quimiométrico

TEMA PARA MESTRADO – 1º SEMESTRE DE 2022

ÁREA DE PESQUISA: Reatores e Catálise

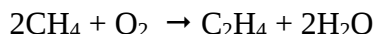
PROFESSOR: José Mansur Assaf

TÍTULO: Valorização do gás natural com produção de compostos de interesse industrial – Produção de eteno por Acoplamento Oxidativo do Metano.

RESUMO:

Metano, principal componente do gás natural, pode ser convertido indiretamente ou diretamente em produtos químicos de interesse industrial. A conversão indireta é a mais utilizada, porém análises econômicas dos processos de conversão indireta (síntese de metanol, parafinas, olefinas, álcoois e gasolina) revelaram que a maior parte do capital investido está associada com a geração de gás de síntese. Dessa forma, alternativas têm sido estudadas e processos de conversão direta do metano estão sendo explorados. Destaca-se o acoplamento oxidativo do metano (AOM), que é uma reação que produz hidrocarbonetos C_2 , C_2H_6 e C_2H_4 .

Eteno é a mais simples das olefinas e o interesse em sua produção se deve ao fato de ser um produto base para diversas sínteses na indústria, como a produção de polietileno, PVC e EVA.



Para que a reação de acoplamento oxidativo do metano a hidrocarbonetos C_2 ocorra, necessita-se uma elevada energia. Na presença de catalisadores essa reação ocorre na faixa de temperatura entre 700-850°C. A reação consiste de 3 etapas principais: ativação heterogênea do metano levando à formação de radicais metila, acoplamento dos radicais metila para formar etano e desidrogenação do etano formando eteno. Nesse processo, as propriedades mais importantes dos catalisadores são baixa mobilidade de oxigênio e a presença de íons oxigênio na superfície (O^-), os quais são sítios ativos para a geração de radicais metila.

Este projeto visa estudar a seleção, caracterização e aplicação de catalisadores heterogêneos óxidos, com adição de promotores, que sejam ativos e estáveis para AOM e constará de:

- Revisão da literatura para definição de catalisadores heterogêneos para esta reação.
- Preparação de catalisadores heterogêneos sólidos.
- Caracterização dos catalisadores utilizando técnicas químicas e físicas.
- Testes e aplicações em reatores de laboratório.

PALAVRAS-CHAVE: valorização do metano, catalisadores óxidos, acoplamento oxidativo; síntese de produtos químicos de valor comercial

TEMA PARA MESTRADO – 1º SEMESTRE DE 2022

ÁREA DE PESQUISA: Sistemas Particulados
Laboratório de Tecnologias Ambientais

PROFESSOR: Luís A. M. Ruotolo

TÍTULO: Tratamento de efluentes industriais contendo compostos orgânicos usando processos oxidativos avançados

RESUMO:

A presença de compostos orgânicos em efluentes industriais se constitui num sério problema ambiental e de saúde humana uma vez que muitos destes compostos são extremamente tóxicos.

O tratamento destes efluentes é feito muitas vezes utilizando processos biológicos; entretanto, muitos compostos orgânicos são refratários a este tipo de tratamento e requerem a utilização de tecnologias conhecidas como Processos Oxidativos Avançados, os quais se baseiam na geração química de radicais oxidantes. A tecnologia eletroquímica surgiu como uma alternativa ambientalmente atrativa, com vantagens como eliminação de transporte e estocagem de produtos químicos e facilidade de controle do processo.

O processo a ser estudado neste projeto se baseará na geração de radicais oxidantes *in situ* em um reator eletroquímico de fluxo, utilizando um eletrodo tridimensional, e sua comparação com eletrodos convencionais planos. Resultados preliminares mostraram resultados promissores usando o eletrodo tridimensional devido à melhoria da transferência de massa, que levam a uma taxa de reação mais rápida e um menor consumo de energia.

Diante do que foi colocado, neste projeto serão estudados os aspectos fluidodinâmicos, com a finalidade de otimizar o processo e o design da célula eletroquímica, visando obter um equipamento comercial, patenteável e que possa oferecer ao setor produtivo uma alternativa técnica e economicamente viável para o tratamento de efluentes.

O projeto conta com a parceria de uma Empresa de Jundiaí-SP; portanto, está prevista também no projeto a aplicação do processo otimizado para o tratamento de um efluente dessa empresa que contém compostos fenólicos.

Mais informações sobre a linha de pesquisa podem ser obtidas pelo e-mail pluis@ufscar.br.

PALAVRAS-CHAVE: tratamento de efluentes, reatores eletroquímicos

TEMA DE MESTRADO – EDITAL Nº 03/2021

ÁREA DE PESQUISA: Simulação e Controle de Processos Químicos

DOCENTE ORIENTADOR: Marcelo Perencin de Arruda Ribeiro/ Antonio Carlos Luperni Horta

TÍTULO: Desenvolvimento de sistemas de controle fuzzy para fotobiorreatores.

RESUMO

As microalgas são microrganismos fotossintéticos que podem ser utilizados para a produção de commodities como biocombustíveis ou mesmo na produção de moléculas de alto valor agregado como produtos farmacêuticos e cosméticos. Devido à característica do meio de cultura, o processo pode ser caracterizado no contexto da química verde. A produção de microalgas em fotobiorreator depende de diversos fatores importantes como temperatura, pH, dióxido de carbono e luz. As lógicas clássicas de controle apresentam limitações em relação aos bioprocessos pois dependem da dinâmica de cada microrganismo e também das fases pelas quais o processo passa. As lógicas clássicas de controle apresentam limitações que podem ser superadas utilizando novas lógicas como a nebulosa e a integração por IoT. Neste contexto este projeto pretende desenvolver um controlador nebuloso para ser testado em fotobiorreator de bancada, operando cultivos de *Scenedesmus obliquus*. Competências a serem desenvolvidas durante o projeto: Teoria de controle fuzzy; cultivo de microalgas em fotobiorreator; programação básica de arduino; programação básica de Labview

Palavras-chaves: Teoria de controle fuzzy; cultivo de microalgas em fotobiorreator; programação básica de arduino; programação básica de Labview

TEMA DE MESTRADO – EDITAL Nº 03/2021

ÁREA DE PESQUISA: Simulação e Controle de Processos Químicos

DOCENTE ORIENTADOR: Marcelo Perencin de Arruda Ribeiro/ **Co-orientação:** Antonio Carlos Luperni Horta

TÍTULO: Modelagem e otimização de bioprocesso em fotobiorreator.

RESUMO

As microalgas são microrganismos fotossintéticos que podem ser utilizados para a produção de commodities como biocombustíveis ou mesmo na produção de moléculas de alto valor agregado como produtos farmacêuticos e cosméticos. Devido à característica do meio de cultura, o processo pode ser caracterizado no contexto da química verde. A produção de microalgas em fotobiorreator depende de diversos fatores importantes, sendo a intensidade luminosa um dos fatores mais impactantes. Elevada intensidade luminosa pode afetar negativamente o metabolismo celular, podendo inibir o crescimento e desta forma a produtividade e viabilidade do processo. Por outro lado, a baixa intensidade luminosa também pode ocasionar crescimento lento e consequente baixa produtividade, gerando um processo inviável economicamente. Neste contexto este projeto pretende desenvolver um modelo matemático para o crescimento de microalgas (*Scenedesmus obliquus*) em fotobiorreator considerando a concentração celular e a intensidade de luz como principais variáveis. Após validar o modelo, o mesmo será utilizado para otimizar as condições operacionais do processo. As condições otimizadas pelo algoritmo de otimização computacional serão validadas experimentalmente. Competências a serem desenvolvidas durante o projeto: Modelagem matemática; cultivo de microalgas em fotobiorreator; programação básica em Matlab

Palavras-chaves: Modelagem matemática; cultivo de microalgas em fotobiorreator; programação básica em Matlab.

TEMA DE MESTRADO – EDITAL Nº 03/2021

ÁREA DE PESQUISA: Simulação e Controle de Processos Químicos

DOCENTE ORIENTADOR: Marcelo Perencin de Arruda Ribeiro

TÍTULO: Biossensor para o monitoramento da hidrólise enzimática do bagaço de cana-de-açúcar pré-tratado em sistema não convencional de reatores.

RESUMO

A produção de etanol via fermentação do caldo-de-cana (processo de 1ª Geração – 1G) é um processo muito importante e já solidificado no Brasil. Porém, é possível aumentar o rendimento do processo ao usar também o próprio bagaço da cana como substrato na fermentação alcoólica (processo 2G). Para isso, o bagaço deve passar por um processo de pré-tratamento onde as fibras são expostas, possibilitando a hidrólise do bagaço. O processo de hidrólise é necessário para quebrar a celulose em moléculas de glicose que, por fim, podem ser consumidas pelas leveduras durante a fermentação. Por ser um processo que ocorre em condições amenas, a hidrólise enzimática do bagaço pré-tratado é preferível à hidrólise química, pois libera menos compostos inibidores da fermentação. Porém, a enzima tem alto custo. Assim, o design do sistema reacional e as condições do processo devem ser estudadas para maximizar a produtividade específica da enzima, o que reflete no custo do processo. Nesta proposta, pretende-se estudar um sistema reacional não convencional que está sendo construído no Laboratório de Automação e Desenvolvimento de Bioprocessos (LADABio). Um *softsensor* deverá ser construído com base em dados espectrométricos (FT-NIR, UV-vis) e de capacitância com o objetivo de monitorar o processo de monitoramento da hidrólise enzimática. O modelo deve ser desenvolvido em matlab utilizando inicialmente dados experimentais já obtidos pelo grupo de pesquisa.

Palavras-chaves: Etanol 2G; Matlab; softsensor; calibração multivariada; modelagem

TEMA DE MESTRADO – EDITAL Nº 03/2021

ÁREA DE PESQUISA: Simulação e Controle de Processos Químicos

DOCENTE ORIENTADOR: Marcelo Perencin de Arruda Ribeiro

TÍTULO: Biossensor baseado em FT-NIR para o monitoramento na produção de etanol

RESUMO

A produção de etanol via fermentação do caldo-de-cana é um processo muito importante e já solidificado no Brasil. Porém, o controle fino da planta ainda pode levar a melhorias em produtividade e redução de custos. Para o uso de controladores mais avançados que permitam esse controle, um maior número de informações devem ser adquiridas em tempo real do fermentador, tais como concentrações de célula, etanol, sacarose, glicose e frutose. Neste projeto pretende-se construir um biossensor baseado em espectrometria de infravermelho próximo (NIR) para monitorar o processo de fermentação alcoólica e possibilitar a utilização métodos de controle avançado com o objetivo de reduzir os custos de processo.

Palavras-chaves: FT-NIR; calibração multivariada; fermentação alcoólica; biossensor; matlab

TEMA DE MESTRADO – EDITAL Nº 03/2021

ÁREA DE PESQUISA: Sistemas Particulados

PROFESSORA: Maria do Carmo Ferreira

TÍTULO: Processamento de biomassas para geração de energia: avaliação de dispositivo tipo jorro para alimentação de resíduos de indústria madeireira em reator pneumático circulante

RESUMO

As biomassas são fontes alternativas para geração de energia em operações de combustão, pirólise e gaseificação. Uma das dificuldades na operação de reatores termoelétricos é garantir uma alimentação estável dos materiais particulados no interior do reator. A alimentação pode ser uma etapa particularmente limitante no caso de partículas provenientes de rejeitos vegetais, como pó de serragem ou fibras, já que estes materiais possuem distribuição de tamanho, composição e formato pouco convencionais que pioram sua escoabilidade e dificultam sua manipulação em operações unitárias. Como parte de um projeto que investiga o uso de dispositivos alimentadores não-mecânicos para alimentação de biomassas em reatores, o objetivo deste trabalho é avaliar o desempenho de um alimentador tipo jorro para a alimentação de resíduos da indústria madeireira (serragem) em um leito pneumático circulante. O trabalho envolve (i) a caracterização detalhada das propriedades físico-químicas e de escoabilidade dos resíduos com diferentes frações granulométricas; (ii) avaliação experimental das operações de alimentação e transporte pneumático; (iii) a modelagem do processo. A partir dos dados obtidos, pretende-se correlacionar o comportamento fluidodinâmico no transporte pneumático e o desempenho do dispositivo alimentador com as características físicas e parâmetros de escoabilidade do material.

PALAVRAS-CHAVE:

Funções de fluxo, ângulo de repouso; serragem, alimentador não-mecânico; transporte pneumático.

TEMA DE MESTRADO – EDITAL Nº 03/2021

ÁREA DE PESQUISA: Sistemas Particulados

PROFESSORA: Maria do Carmo Ferreira

TÍTULO: Secagem convectiva de folhas medicinais em leito fixo.

RESUMO

Folhas aromáticas e medicinais são uma importante fonte de constituintes químicos com ações anti-inflamatórias, antioxidantes e anticarcinogênicas, os quais são ingredientes valiosos para a produção de medicamentos, produtos alimentícios, cosméticos, etc. A recuperação dos constituintes bioativos presentes nas plantas requer a redução dos níveis de umidade pós-colheita, de forma a viabilizar a padronização e armazenamento das matérias-primas para a posterior extração. A secagem convectiva com ar aquecido em secadores de leito fixo é um método bastante utilizado para a desidratação de folhas medicinais. O processo modifica características morfológicas das folhas, tais como sua forma, tamanho, estrutura e cor. Dependendo da espécie são observados fenômenos como encolhimento, enrijecimento e deformação significativos durante a secagem. As mudanças podem afetar o desempenho dos secadores a medida em que alteram a permeabilidade, porosidade e densidade bulk dos leitos, propriedades que estão diretamente associadas à área de contato disponível para trocas de calor e massa. O objetivo deste trabalho é estudar a secagem de folhas medicinais em leito fixo, avaliando as alterações das características morfológicas e propriedades de empacotamento do leito em função da umidade e também a homogeneidade da secagem em diferentes condições operacionais. O trabalho prevê as seguintes etapas (i) caracterização das propriedades físico-químicas e morfológicas (tamanho, formato, cor) das folhas em função da umidade; (ii) determinação de propriedades bulk como porosidade, densidade e permeabilidade do leito em função da umidade; (iii) avaliação do encolhimento na secagem em leito fixo; (iv) análise do processo de secagem em leito fixo a avaliação da homogeneidade da secagem em diferentes configurações e condições de operação.

PALAVRAS-CHAVE: densidade bulk, porosidade, permeabilidade, encolhimento.

TEMA DE MESTRADO – EDITAL Nº 03/2021

ÁREA DE PESQUISA: Controle Ambiental

DOCENTE ORIENTADOR: Mônica Lopes Aguiar

TÍTULO: Desenvolvimento de meios filtrantes nanofibrosos eficientes na coleta de nanopartículas, biodegradáveis e antibactericida.

RESUMO

As nanopartículas podem estar presentes tanto em ambientes externos como nos internos. A definição da nanopartícula mais conhecida é como sendo a de uma partícula submicroscópica que mede menos de 100 nanômetros (nm) em pelo menos uma de suas dimensões. Devido ao seu tamanho muito pequeno e alta taxa de penetração ela pode facilmente se infiltrar em ambientes internos e ter grandes impactos na saúde humana quando inaladas, desde a uma simples inflamação da pele, doenças respiratórias, cardiovasculares, câncer, doenças cerebrais degenerativas e até mesmo danos ao DNA. Existem várias fontes de nanopartículas originadas tanto em ambientes internos quanto externos. A maioria dos materiais particulados em ambientes internos, 73%, estão na fração ultrafina, partículas com diâmetro aerodinâmico inferior a 100 nm, faixa de tamanho de partículas que podem causar consequências negativas para a saúde. Estas nanopartículas são principalmente de compostos orgânicos, nitratos, sulfatos, vírus, fungos e bactérias. Várias pesquisas relatam que as pessoas passam mais de 80% da vida dentro de ambientes fechados. Atualmente, devido a pandemia causada pela COVID-19, responsável por causar doenças respiratórias infecciosas com uma alta taxa de transmissão e mortalidade, a demanda por ar interior saudável aumentou, principalmente porque a transmissão ocorre através do contato com pessoas infectadas, em superfícies, em gotículas contendo o vírus e pelo ar. Portanto, o objetivo deste projeto é desenvolver meios filtrantes altamente eficientes para nanopartículas, biodegradáveis, bactericida e que tenha um menor gasto energético. Existem uma infinidade de meios filtrantes no mercado, mas a eficácia desses equipamentos é ainda obscura. Assim, desenvolver meios filtrantes, ou adaptar os existentes no mercado, com nanofibras sintéticas ou naturais, com alta eficiência na coleta nanopartículas abaixo de 100nm, já que vírus como a covid-19 apresenta tamanho entre 20 e 400 nm, bactérias entre 0,2 e 2,0 μm , e esporos de fungos, 2,0 a 8,0 μm , com baixa queda de pressão, duráveis e economicamente viáveis vem se tornando uma realidade mundial. A presença de nanofibras aumenta em muito a deposição de nanopartículas, o que eleva a eficiência do meio filtrante com acréscimo reduzido à resistência a passagem do ar. Soma-se a este aumento, o incremento da capacidade biocida do tecido modificado através da combinação de nanofibras e nanopartículas incorporadas com agente biocida.

Palavras-chaves: Meios filtrantes, nanopartículas, nanofibras, filtros de ar, atividade biocida.

TEMA PARA MESTRADO – EDITAL Nº 03/2021

ÁREA DE PESQUISA: Engenharia Bioquímica

PROFESSORES: Paulo Waldir Tardioli / LabEnz-DEQ-UFSCar

TÍTULO: Coprodução de biodiesel e triacetina por interesterificação enzimática de óleos vegetais com acetato de etila

RESUMO: A rota tradicional de produção de biodiesel envolve a transesterificação de óleos vegetais com um álcool de cadeia curta (metanol ou etanol) usando catalisadores homogêneos ou heterogêneos. Essa rota gera glicerina como subproduto, o qual é considerado um resíduo na indústria de biodiesel, pois a sua purificação requer um alto investimento de capital e um alto consumo de energia para produzir uma *commodity* (glicerol) já muito abundante. Tem-se proposto como alternativa para contornar esse problema a síntese simultânea de biodiesel e triacetina por interesterificação de óleos vegetais com acetato de metila (ou etila). A triacetina tem um mercado milionário (US\$ 234,5 milhões em 2016 e expectativa de US\$309,9 milhões em 2022) e, além de ter várias aplicações em indústrias de alimentos, fármacos, cosméticos, tabaco, etc., também serve como um aditivo do próprio biodiesel, cuja função é atuar como um agente antidetonante do combustível em motores à diesel. Neste contexto, a proposta deste trabalho é produzir simultaneamente biodiesel e triacetina por interesterificação enzimática de óleos vegetais com acetato de etila catalisada por lipases (sem geração de glicerol), avaliando-se a razão molar óleo:acetato de etila, temperatura e tempo de reação. As reações serão conduzidas em reator do tipo tanque agitado com aquecimento convencional e em reator com aquecimento controlado induzido por micro-ondas (reator Discover), a fim de se avaliar o efeito desta última configuração de reator na taxa de conversão.

Este tema está incluído na área de abrangência do PRH 39 ANP/FINEP – Biocombustíveis e Energias Alternativas - e poderá ser beneficiado com bolsa de estudos deste Programa.

Mais informações sobre o PRH 39 podem ser obtidas no link: <https://www.deq.ufscar.br/pt-br/prh-anp/prh-anp-1>. **Informações do docente:** ORCID (<https://orcid.org/0000-0002-5011-9881>) e Lattes/CNPq (<http://lattes.cnpq.br/0808991927126468>). Para maiores informações, contacte o professor pelo e-mail pwtardioli@ufscar.br.

PALAVRAS-CHAVE: Biodiesel; Triacetina, Eversa; Interesterificação; Reator de Microondas.

TEMA PARA DOUTORADO – EDITAL 03/2021

ÁREA DE PESQUISA: Engenharia Bioquímica

PROFESSOR ORIENTADOR: Paulo Waldir Tardioli – LabEnz/DEQ/UFSCar

TÍTULO: Preparação de “whole-cells” de lipase de *Aspergillus niger* para a síntese de intermediários da indústria de antibióticos

RESUMO: Este trabalho consiste no cultivo do fungo *Aspergillus niger* por fermentação em estado sólido e/ou fermentação submersa visando a produção de lipases, em parceria com a Dra. Cristiane Sanchez Farinas da Embrapa Instrumentação de São Carlos. Diferentes indutores serão avaliados visando a máxima produção de enzimas lipolíticas, dentre eles com destaque ao destilado da desodorização do óleo de soja, um subproduto da indústria de refino de óleo de soja rico em acilglicerídeos e outros compostos em menores quantidades (tocoferol, esteróis, escateno, etc.). O material celular, com atividade lipolítica intracelular, será utilizado na formulação de um biocatalisador com terra diatomácea, seguida da reticulação com polietilenoimina (PEI) e glutaraldeído. O biocatalisador será avaliado quanto a sua atividade de esterificação e estabilidade frente a solventes orgânicos e agentes caotrópicos (EDTA, urea, hidrocloreto de guanidina), sendo, posteriormente, avaliado na síntese de ésteres metílicos (ou etílicos) de fenilglicina. O éster metílico de fenilglicina é um importante intermediário na síntese de antibióticos semissintéticos. Por exemplo, na síntese de ampicilina, a enzima penicilina G acilase catalisa a condensação de um núcleo β -lactâmico (ácido 6-aminopenicilóico, 6-APA) com o éster metílico de fenilglicina, o qual é atualmente sintetizado quimicamente. **Informações do docente:** ORCID (<https://orcid.org/0000-0002-5011-9881>) e Lattes/CNPq (<http://lattes.cnpq.br/0808991927126468>). Para maiores informações, contacte o professor pelo e-mail pwtardioli@ufscar.br.

PALAVRAS-CHAVE: *Aspergillus niger*; lipases; esterificação; éster metílico de fenilglicina; antibióticos β -lactâmicos

TEMA DE MESTRADO – EDITAL Nº 03/2021

ÁREA DE PESQUISA: SISTEMAS PARTICULADOS

PROFESSOR: RODRIGO BÉTTEGA

TÍTULO: SIMULAÇÃO CFD DA SECAGEM CONVECTIVA DE MINÉRIO DE MANGANÊS

RESUMO: Um dos destaques do Brasil no cenário mundial é a indústria da mineração. Parte do minério produzido é obtido pelo processo de beneficiamento a úmido, aumentando o teor de umidade do material, que se não for devidamente controlada pode causar problemas subsequentes. Novas tecnologias de beneficiamento vêm buscando desenvolver equipamentos para a secagem do minério em condições de contato direto do material com ar aquecido, onde simuladores computacionais podem ser uma ferramenta poderosa para a previsão do comportamento do processo em uma etapa preliminar à construção de protótipo. Atualmente, em parceria com o Instituto Tecnológico Vale – ITV VALE, o Centro de Secagem do DEQ-UFSCar vêm desenvolvendo estudos relacionados à secagem de produtos da mineração buscando desenvolvimento de tecnologia de secagem nessa área. Os trabalhos que vem sendo desenvolvidos englobam estudos experimentais de caracterização e cinética, testes laboratoriais em unidades de bancada, construção de equipamentos e simulação CFD de equipamentos em etapa de implantação na área da mineração. O trabalho de mestrado proposto está inserido nesse contexto, com o enfoque na simulação CFD da secagem de minério de manganês em leito fluidizado de bancada a partir do software *Ansys Fluent*, buscando a obtenção de um simulador CFD capaz de representar a dinâmica da secagem desse material. Para tal fim, testes de bancada vêm sendo conduzidos atualmente objetivando determinar parâmetros empíricos para a utilização no simulador computacional. No presente trabalho de mestrado, os parâmetros determinados empiricamente serão incorporados à um simulador CFD, possibilitando a previsão do comportamento do material em processo de secagem no interior do equipamento, para diferentes geometrias de secadores e condições operacionais.

PALAVRAS-CHAVE: secagem, minério de manganês, transferência de massa, CFD

e-mail para contato: bettega@ufscar.br

TEMA DE MESTRADO – EDITAL Nº 03/2021

ÁREA DE PESQUISA: Simulação e Controle de Processos Químicos

DOCENTE ORIENTADOR: Prof. Dr. Ruy de Sousa Júnior

TÍTULO: Inteligência computacional aplicada à modelagem matemática da esterificação de ácidos graxos com açúcares

RESUMO

A modelagem matemática dos reatores enzimáticos de esterificação de ácidos graxos com açúcares para a produção de biossurfactantes pode ser uma ferramenta muito útil. Em particular, redes neurais artificiais e sistemas nebulosos (*fuzzy*) surgem como alternativas promissoras para o desenvolvimento de modelos para o citado processo. Assim, este trabalho visa ao desenvolvimento de modelo híbrido-neural e de modelo *fuzzy* para reatores enzimáticos de esterificação associados à produção de biossurfactantes. Mais especificamente, no caso da aplicação de redes neurais artificiais para previsão do processo de esterificação de ácidos graxos com açúcares, considerar-se-á o acoplamento de redes neurais artificiais a balanços de massa de reator(es), em modelo(s) híbrido(s), para inferir sobre as concentrações dos reagentes ao longo do tempo. Neste caso, o método clássico de Runge-Kutta pode ser usado para integração das equações diferenciais dos balanços materiais. Computacionalmente, deve-se construir um algoritmo incorporando balanços materiais, velocidades de reação neurais (cinética neural) e integração numérica passo a passo segundo o método de Runge-Kutta. Já no caso da aplicação da lógica *fuzzy* para modelagem e otimização da conversão da esterificação de ácidos graxos com açúcares, em função de parâmetros operacionais de processo (como tempo, temperatura, razão molar de substratos, etc.), proceder-se-á a um estudo embasado em um conjunto (já disponível) de dados experimentais provenientes de uma análise clássica de planejamento (*i.e.*, de ajuste de modelos de regressão e análise de superfícies de resposta), visando à comparação da previsão de condições operacionais ótimas fornecida por modelo *fuzzy* com aquelas provenientes da metodologia clássica.

Palavras-chave: estudo computacional; esterificação; biossurfactantes; modelo híbrido-neural; lógica *fuzzy*

TEMA DE MESTRADO – EDITAL Nº 03/2021

ÁREA DE PESQUISA: Simulação e Controle de Processos Químicos

DOCENTE ORIENTADOR: Prof. Dr. Ruy de Sousa Júnior

TÍTULO: Estudo computacional da precipitação de parafina de misturas de hidrocarbonetos de petróleo

RESUMO

Para o petróleo ser produzido e processado da melhor forma, ele deverá se apresentar em fase líquida, de modo que seu escoamento seja facilitado. Todavia, o petróleo possui hidrocarbonetos com elevados peso molecular e temperatura de fusão, podendo, em alguns casos, apresentar a precipitação de uma fase sólida quando submetido a condições de temperaturas mais reduzidas. Essa fase sólida que surge devido à cristalização de componentes da fase líquida é comumente conhecida como parafina. Deve-se ressaltar que também é possível ter a presença da fase gasosa, seja ela naturalmente presente ou injetada nos reservatórios, o que pode fazer com que haja a necessidade de considerar a sua presença nas análises de previsão e/ou quantificação do aparecimento do fenômeno da precipitação da parafina. Neste contexto, o objetivo geral deste trabalho será a quantificação dos efeitos de gases, naturalmente presentes ou injetados nos reservatórios petrolíferos, sobre as condições da precipitação de parafina de misturas de hidrocarbonetos. Para isso, considerar-se-á o uso de modelagem termodinâmica do equilíbrio trifásico sólido-líquido-vapor (bem como dos equilíbrios sólido-líquido/líquido-vapor), mas principalmente de modelos nebulosos (*fuzzy*) e neurais. Os modelos serão desenvolvidos/resolvidos fazendo uso de métodos matemáticos e computacionais apropriados. A precipitação de parafina é um fenômeno complexo, mas, por outro lado, sistemas *fuzzy* e redes neurais podem aproximar (modelar) muito bem uma ampla classe de relações funcionais.

Palavras-chave: estudo computacional; hidrocarbonetos de petróleo; precipitação de parafina; lógica *fuzzy*

TEMA DE MESTRADO – EDITAL N° 03/2021

ÁREA DE PESQUISA: Engenharia Bioquímica

DOCENTE ORIENTADOR: Teresa Cristina Zangirolami

TÍTULO: Desenvolvimento de processo para pré-tratamento da palha de cana de açúcar e potencialização do seu aproveitamento no contexto da Biorrefinaria

RESUMO

A utilização de materiais lignocelulósicos para a obtenção de biocombustíveis, intermediários químicos e outros produtos é fundamental para o estabelecimento de processos industriais sustentáveis e ambientalmente corretos. A primeira etapa do processamento da biomassa vegetal consiste na aplicação de pré-tratamentos para separar os seus constituintes (celulose, lignina e hemicelulose) e diminuir a recalcitrância desses biopolímeros. O aproveitamento dos constituintes da biomassa vegetal nas etapas seguintes do processamento depende diretamente das mudanças na estrutura dos biopolímeros alcançadas nos pré-tratamentos iniciais. No Brasil, o bagaço e a palha de cana de açúcar destacam-se como materiais lignocelulósicos prioritários pela abundância gerada anualmente nas unidades sucroenergéticas e pela disponibilidade *in loco*. Enquanto o bagaço já vem sendo amplamente estudado como matéria-prima da Biorrefinaria, poucas pesquisas têm abordado o aproveitamento da palha. Nesta proposta de Mestrado, pretende-se estabelecer um processo combinado de pré-tratamento da palha que gere frações com as características requeridas (baixo teor de inibidores, elevada acessibilidade e baixa degradação dos biopolímeros) para potencializar seu uso nas etapas posteriores do processamento. A execução da proposta envolverá estudos do pré-tratamento hidrotérmico da palha em reator Parr, variando as condições de pressão, temperatura, tempo e razão sólido/líquido. Tratamentos complementares de baixo impacto ambiental como congelamento, aplicação de ultrassom e de micro-ondas serão avaliados em combinação com o pré-tratamento hidrotérmico com o objetivo de aumentar a eficiência do processo. A fração sólida (celulignina) e a fração líquida (hidrolisado de hemicelulose) obtidas em cada condição de pré-tratamento combinado serão caracterizados quanto à composição e utilizadas em estudos posteriores de hidrólise por coquetéis enzimáticos comerciais (celulignina) e por xilanases imobilizadas (hidrolisado de hemicelulose). A partir dos resultados da hidrólise da celulignina será determinado o rendimento em glicose, enquanto os resultados da hidrólise do hidrolisado de hemicelulose determinarão o rendimento em xilooligossacarídeos (XOS - oligômeros contendo 2 a 7 unidades de xilose com propriedades nutracêuticas), permitindo identificar a condição de pré-tratamento combinado mais viável para aplicação em Biorrefinarias para co-produção de etanol e XOS. As atividades propostas serão realizadas em colaboração com o LPFENz (Laboratório de Processos Fermentativos e Enzimáticos) da UNIFEI.

Palavras-chaves: pré-tratamento hidrotérmico, palha de cana de açúcar, celulasas, xilanases, xilooligossacarídeos.

TEMA DE MESTRADO – EDITAL N° 03/2021

ÁREA DE PESQUISA: Engenharia Bioquímica

PROFESSOR: Teresa Cristina Zangirolami

TÍTULO: Desenvolvimento de processo inteligente para purificação de proteína recombinante obtida em plataforma de expressão detoxificada

RESUMO

A produção de biofármacos, incluindo componentes vacinais, envolve o cultivo de células, nas quais o produto é sintetizado, seguido por uma sequência de etapas de recuperação e purificação (processo *downstream*), para eliminação das impurezas e obtenção do produto com a pureza requerida para utilização terapêutica. As etapas *downstream* contribuem com 20 a 80% do custo total do processo de produção de produtos biotecnológicos, constituindo o fator determinante do preço do produto final. Além disso, a estratégia convencional de desenvolvimento do processo *downstream* ainda é baseada na abordagem “tentativa e erro”, requerendo grande esforço experimental, e nem sempre levando a resultados satisfatórios. Recentemente, pesquisadores do PPGEQ/UFSCar desenvolveram uma metodologia inovadora que se caracteriza pela obtenção de dados experimentais representativos do processo a partir da realização de um conjunto de experimentos em condições previamente estabelecidas, seguida de modelagem e simulação do modelo matemático obtido, permitindo mapear diferentes condições operacionais e identificar as condições ótimas para o processamento *downstream*. Essa abordagem foi aplicada com sucesso na purificação da proteína A de superfície de pneumococo (PspA), componente promissor para a formulação de vacinas anti-pneumocócicas, produzida por células de *E. coli* recombinante convencional. Na presente proposta de Mestrado, a metodologia desenvolvida será aplicada na purificação da PspA obtida em cultivos de ClearColi, uma linhagem de *E. coli* geneticamente modificada, isenta de atividade endotóxica (não causando reações adversas como febre, dor etc), demandando um processo *downstream* menos complexo, cujo desenvolvimento é o objetivo do Mestrado. A execução do projeto envolverá a realização de purificações no Instituto Butantan utilizando o equipamento Akta, sob supervisão direta da Profa. Dra. Viviane M. Gonçalves. Todas as biomassas a serem utilizadas nos estudos de *downstream* foram obtidas em cultivos de ClearColi realizados anteriormente e já estão disponíveis *in loco*. Metodologias analíticas como medida de concentração de proteína solúvel (método de Lowry), eletroforese por SDS-PAGE (para análise do perfil de proteínas produzidas) e densitometria de banda serão aplicadas para caracterizar o material de partida e o extrato obtido ao final das purificações. A parte computacional do projeto será conduzida na plataforma EMSO (Environment for Modeling, Simulation and Optimization) sob supervisão direta do Prof. Dr. Leandro Benedini Junqueira (IFSP, Catanduva), coorientador do Mestrado.

Palavras-chaves: ClearColi, extratos celulares reais, *downstream*, purificação de proteína recombinante, PspA

TEMA DE MESTRADO – EDITAL N° 03/2021

ÁREA DE PESQUISA: Controle Ambiental

DOCENTE ORIENTADOR: Vádila Giovana Guerra Béttega

TÍTULO: Desenvolvimento e avaliação de meios filtrantes para ar contendo nanofibras compostas por blendas poliméricas.

RESUMO

O uso das nanofibras na filtração de ar é uma tecnologia que vem sendo aplicada aos meios filtrantes visando a obtenção de altos fatores de qualidade, isto é, altas eficiências de coleta de partículas e baixas quedas de pressão. A técnica de eletrofiação é a mais utilizada para fabricação de meios filtrantes com nanofibras e demonstra versatilidade em processar diferentes polímeros, habilidade em controlar diâmetro, morfologia, orientação e estrutura das fibras. É um método que utiliza a força eletrostática para a obtenção de fibras com superfície de contato muito maior do que as produzidas por outros métodos. Um dos desafios desta técnica é o ajuste e controle dos vários parâmetros que influenciam a produção das nanofibras. O domínio da técnica torna possível a obtenção das principais características desejadas aos meios filtrantes para a aplicação industrial, isto é, alta eficiência na coleta de partículas, excelente permeabilidade, queda de pressão, resistência mecânica e a temperatura. Nesse contexto, o presente estudo propõe o desenvolvimento de diferentes meios filtrantes utilizando-se a técnica de eletrofiação para aplicação na remoção de nanopartículas dispersas em ar. Para isso, serão utilizados diferentes polímeros, como PAN, PVA, PVDF e PS. Serão determinados os melhores parâmetros operacionais à eletrofiação das nanofibras, serão avaliadas a mistura de polímeros e a proporção de mistura no desempenho dos meios filtrantes. Assim, após a produção dos meios filtrantes fibrosos, eles serão caracterizados fisicamente para determinação da distribuição de tamanho de fibras, permeabilidade, porosidade, resistência mecânica e térmica. Posteriormente, serão obtidas as eficiências de coleta para partículas na faixa nanométrica.

Palavras-chaves: Filtração; nanofibras; nanopartículas; eletrofiação