

**TEMA PARA DOUTORADO – 1º SEMESTRE DE 2019****ÁREA DE PESQUISA:** Engenharia Bioquímica**PROFESSOR:** Alberto Colli Badino Junior / Antonio José Gonçalves da Cruz**TÍTULO:** Avaliação de diferentes dispositivos para a geração de microbolhas visando a aplicação em bioprocessos**RESUMO:**

A geração de microbolhas tem recebido crescente interesse científico e tecnológico. As microbolhas são responsáveis por aumentar a eficiência da transferência de massa em dispersões gás-líquido e, desta forma, seu uso é indicado em diversos processos tanto em pequena escala quanto industriais. Todavia, a aplicação de microbolhas em bioprocessos é ainda pouco explorada. Aumentos significativos de transferência de massa podem ser alcançados em diferentes bioprocessos com a geração de microbolhas com reduzida vazão específica de alimentação de gás. Nesse contexto, o presente tema propõe projetar, construir e avaliar os desempenhos de diferentes dispositivos para a geração de microbolhas. O melhor sistema e as condições de operação mais adequadas serão empregados em bioprocessos clássicos, como os aeróbios em que há transferência  $O_2$  da fase gasosa para a fase líquida e as fermentações extrativas onde produtos inibitórios como etanol e butanol etanol são extraídos da fase líquida com passagem de um gás inerte pelo biorreator. Espera-se que o tema contribua para o desenvolvimento de biorreatores não convencionais com elevada capacidade de transferência de massa.

**PALAVRAS-CHAVE:** Microbolhas; biorreator pneumático; transferência de massa.

**TEMA PARA DOUTORADO – 1º SEMESTRE DE 2019****ÁREA DE PESQUISA:** Engenharia Bioquímica**PROFESSOR:** Alberto Colli Badino Junior/Rodrigo Béttega**TÍTULO:** Influência de aspectos geométricos na hidrodinâmica e na transferência de oxigênio de biorreatores airlift de circulação interna utilizando Fluidodinâmica Computacional (CFD)**RESUMO:**

Os biorreatores pneumáticos são equipamentos que vêm adquirindo importância relevante no ramo da Biotecnologia devido as suas características como ausência de selo mecânico, baixo custo e baixo consumo de potência, tornando-se alternativas promissoras aos biorreatores convencionais tipo tanque agitado e aerado em bioprocessos. Estudos avaliando a influência de parâmetros geométricos têm sido realizados com o intuito de se melhorar o desempenho destes equipamentos no que se refere à hidrodinâmica e transferência de massa. Embora novas geometrias de biorreatores airlift tenham sido propostas, há a necessidade de estudos mais aprofundados, no intuito de se obter equipamentos com geometrias mais adequadas que melhorem a hidrodinâmica e a transferência de oxigênio desses equipamentos visando sua utilização em bioprocessos de interesse. A Fluidodinâmica Computacional (*CFD – Computational Fluid Dynamics*) vem apresentando uma evolução em termos de aplicação industrial nos últimos anos. Os códigos computacionais disponíveis na atualidade são fáceis de usar e possibilitam a obtenção de respostas de alta qualidade para as mais diferentes operações e equipamentos. Dentre as inúmeras possibilidades de aplicação, o projeto de equipamentos apresenta-se como destaque, pois a CFD permite a obtenção de resultados para equipamentos de diferentes características geométricas e operando em diferentes condições sem a necessidade de construção de unidades pilotos, reduzindo custos e tempo de projeto. Isso posto, o presente projeto tem como objetivo avaliar as influências de parâmetros geométricos no desempenho de biorreatores airlift de circulação interna de seções transversais circular e quadrada, utilizando-se fluidos Newtonianos e não-Newtonianos. Os resultados experimentais em conjunto com aplicação de técnicas numéricas possibilitarão avanços em variáveis importantes para o processo, como por exemplo a retenção gasosa global e o cisalhamento, comparando-se resultados simulados e experimentais para as geometrias retangular e cilíndrica e assim possibilitando a indicação da configuração mais indicada para o biorreator.

**PALAVRAS-CHAVE:** biorreatores, hidrodinâmica, transferência de oxigênio, cisalhamento, CFD.

**TEMA PARA DOUTORADO – 1º SEMESTRE DE 2019**

**ÁREA DE PESQUISA:** Análise e Simulação de Processos Químicos e Engenharia Bioquímica

**PROFESSOR:** Antonio José Gonçalves da Cruz (orientador) / Alberto Colli Badino (co-orientador)

**TÍTULO:** Avaliação da fermentação alcoólica extrativa com remoção de etanol por CO<sub>2</sub> em diferentes temperaturas.

**RESUMO:**

Na fermentação alcoólica realizada a 34 °C, o efeito inibidor do etanol sobre a levedura impede a obtenção de vinhos com teor alcoólico superior a 10 °GL, resultando em elevado gasto energético na etapa de destilação (~2,6 kgvapor.Letanol-1) e elevado volume de vinhaça gerado (~11 Lvinhaça.Letanol-1). A redução da temperatura de fermentação, minimiza o efeito inibidor do etanol, tornando possível a obtenção de vinhos com teores alcoólicos elevados. Contudo, esta estratégia leva a uma significativa diminuição da produtividade em etanol, devido ao aumento do tempo de fermentação. Outra alternativa para contornar a inibição pelo produto é remover parte do etanol do caldo de fermentação, utilizando CO<sub>2</sub> como gás de arraste, o que aumenta a produtividade em etanol; porém, obtém-se vinhos com teores alcoólicos inferiores a 10 °GL. , O presente projeto de pesquisa tem por objetivo avaliar a união destas duas estratégias de processo realizando a fermentação alcoólica extrativa em batelada alimentada (modo de operação empregado na maioria das unidades industriais), com maiores cargas de substrato e com remoção de etanol com CO<sub>2</sub> nas temperaturas de 28, 30, 32 e 34 °C. Para tanto, propõe-se modelar a fermentação alcoólica extrativa com CO<sub>2</sub> em cada temperatura de estudo, sendo o crescimento celular representado pelo modelo cinético de Andrews-Levenspiel. A cinética de stripping (arraste gasoso) será avaliada a partir da remoção de etanol com CO<sub>2</sub> em soluções hidroalcoólicas. Adicionalmente, propõe-se modelar o processo de stripping em soluções hidroalcoólicas em diferentes temperaturas utilizando Fluidodinâmica Computacional (CFD) e validar o modelo com base em resultados de retenção gasosa e do coeficiente de remoção de etanol obtidos experimentalmente. Ressalta-se que o presente projeto apresenta tanto uma abordagem tecnológica, uma vez que propõe o estudo de um processo alternativo de produção de etanol; quanto científica, pois busca o entendimento dos fenômenos hidrodinâmicos e de transferência de massa envolvidos no processo de stripping.

**PALAVRAS-CHAVE:** Fermentação alcoólica, Inibição, Fermentação extrativa, Arraste de etanol com CO<sub>2</sub>, Temperatura, Teor alcoólico no vinho, Fluidodinâmica Computacional.

**TEMA PARA DOUTORADO – 1º SEMESTRE DE 2019**

**ÁREA DE PESQUISA:** Análise e Simulação de Processos Químicos / Controle Ambiental

**PROFESSOR:** Antonio José Gonçalves da Cruz / Gabriela Cantarelli Lopes

**TÍTULO:** Avaliação de processos para o aproveitamento de subprodutos da produção de etanol: uso de ferramentas de modelagem e simulação na proposição de melhorias.

**RESUMO:**

O setor sucro-alcooleiro constitui o principal agronegócio brasileiro. Na safra 2016/17 foram processadas 651,8 milhões de toneladas de cana-de-açúcar, o que resultou em uma produção de 38,7 milhões de toneladas de açúcar e 27,2 bilhões de litros de álcool (UNICA, 2017). Ao mesmo tempo foram produzidos cerca de 9200 bilhões de litros de CO<sub>2</sub> (CNTP), considerando apenas a fermentação, e 272 bilhões de litros de vinhaça, como subprodutos do processo.

Nos últimos anos, a partir da possibilidade de haver um aquecimento global antropogênico, causado pelas crescentes emissões de gás carbônico na atmosfera, a sociedade, e particularmente as indústrias, tem procurado desenvolver maneiras de aprisionar e estocar o gás carbônico produzido pelas diferentes atividades humanas (CCS, carbon capture and storage).

Nesse sentido, o objetivo dessa tema será buscar alternativas para a recuperação e uso do CO<sub>2</sub> produzido a partir da fermentação alcoólica. Várias possibilidades são propostas na literatura, como por exemplo, o uso desse subproduto para produção de bicarbonato de sódio, para o cultivo de algas, dentre outras. O trabalho terá como objetivo realizar um extenso levantamento de informações na literatura e, a partir das informações de processo obtidas, escolher um processo com potencial de melhorias para a realização de estudos mais detalhados. Para isso, serão usadas ferramentas de modelagem e simulação, como a Fluidodinâmica Computacional (CFD), por exemplo. O trabalho será desenvolvido em co-orientação com a Profa. Gabriela Cantarelli Lopes, que possui vasta experiência com CFD.

**PALAVRAS-CHAVE:** Energia; Dióxido de carbono; Modelagem matemática, Fluido Dinâmica Computacional.

## TEMA PARA DOUTORADO – 1º SEMESTRE DE 2019

<b>AREA DE PESQUISA:</b>	<b>Engenharia Bioquímica (AP-3)</b>
<b>TÍTULO:</b>	<b>Produção de células tronco mesenquimais (CTMs) em larga escala em biorreator de vórtices de Taylor</b>
<b>PROF. RESPONSÁVEL:</b>	<b>Cláudio Alberto Torres Suazo</b>
<p><b>BREVE RESUMO:</b> As células tronco mesenquimais (ou CTM) podem ser isoladas em pequeníssimas quantidades de vários órgãos de adultos, apresentando capacidade de autorrenovação e diferenciação em múltiplos tipos de células órgão-específicas. Cultivo, expansão e utilização de CTM é uma temática que vem sendo intensamente pesquisada por grupos na área de Engenharia de Bioprocessos no mundo inteiro. Esse fato se explica porque a utilização pela Medicina em aplicações revolucionárias sem precedentes passa pelo desenvolvimento de equipamentos e de tecnologias que fazem parte do escopo da Engenharia Química moderna como Biotecnologia, Novos Materiais, Biorreatores e Monitoramento e Controle de Processos. Já existem no Brasil centros desenvolvendo tecnologias pioneiras através de parcerias Medicina/Engenharia Química visando, tanto o desenvolvimento de tecnologias inovadoras, como a formação de recursos humanos (engenheiros químicos) altamente especializados ainda não existentes no país e para os quais já existe uma ampla demanda. Esta proposta de pesquisa tem como <b>objetivo</b> estabelecer uma metodologia de cultivo num biorreator inovador em aplicações biotecnológicas. Trata-se do <b>Biorreator de Vórtices de Taylor ou BVT</b>, cujo princípio tecnológico se baseia numa patente da Agência Espacial Norteamericana (NASA) para estudos de comportamento de células animais (humanas) na ausência de gravidade. Uma versão diferente, concebida sem a preocupação de efeitos da gravidade e com design apropriado para oxigenação livre de bolha e de baixo cisalhamento, foi patenteada por nosso grupo de pesquisa no DEQ/UFSCar (vide US20110117639 A1). Testes já realizados em nossos laboratórios mostram que é possível com o BVT conseguir a expansão intensificada <i>in vitro</i> de células tronco mesenquimais (CTMs) em forma de esferoides, tipo de cultivo que mimetiza melhor o comportamento em 3D (<i>in vivo</i>) e garante o melhor efeito terapêutico das CTMs. Como um dos grandes problemas em termos de cultivo de células animais é o fornecimento de oxigênio com baixo cisalhamento, serão feitos vários experimentos para avaliar o desempenho desse biorreator em condições rigorosamente monitoradas e controladas. Os resultados de cada experimento em termos de densidade celular, células viáveis e não-viáveis, concentração de nutrientes e metabólitos produzidos serão utilizados para o cálculo de variáveis e parâmetros de cultivo como: velocidade específica de crescimento, velocidades específicas de consumo de nutrientes (glicose e aminoácidos), velocidades específicas de produção de metabólitos (lactato e amônia), densidade máxima de células e produtividade celular do cultivo. A utilização desses dados, juntamente com os de análise morfológica, de atividade e diferenciação celular (truncocidade), permitirá fazer uma seleção criteriosa de condições ótimas para operação do BVT. Estas informações serão de crucial importância para a operação prática, real, desse biorreator em condições de alta produtividade.</p>	
<b>PALAVRAS-CHAVE:</b>	células animais, células tronco mesenquimais, <i> biorreator de vórtices, cultivo de células</i>

**TEMA PARA DOUTORADO – 1º SEMESTRE DE 2019****ÁREA DE PESQUISA:** Engenharia bioquímica**PROFESSOR:** Cristiane Sanchez Farinas**TÍTULO:** Mitigação da adsorção improdutivo de enzimas no processo de sacarificação da biomassa vegetal**RESUMO:**

A conversão da biomassa vegetal em biocombustíveis e outros bioprodutos utilizando a rota enzimática vêm sendo considerada a estratégia mais promissora para a implantação das biorrefinarias de forma sustentável. No entanto, nesse processo o alto custo das enzimas ainda é um limitante. Uma das alternativas para reduzir a quantidade de enzimas neste processo é através do uso de aditivos que reduzem a adsorção improdutivo das enzimas na lignina. O uso de aditivos como proteínas e surfactantes na hidrólise enzimática aumenta a conversão de celulose em açúcares solúveis, em especial quando são usados substratos pré-tratados. Este projeto de doutorado tem como objetivo estudar o efeito de diferentes aditivos na eficiência do processo de sacarificação da biomassa vegetal. O efeito dos aditivos será avaliado durante o processo de sacarificação do bagaço de cana-de-açúcar utilizando complexos enzimáticos celulolíticos a fim de definir as condições para maximizar a conversão da biomassa lignocelulósica em açúcares.

**PALAVRAS-CHAVE:** bioprocessos, biorreatores, hidrólise enzimática, biomassa vegetal

**TEMA PARA DOUTORADO – 1º SEMESTRE DE 2019**

**ÁREA DE PESQUISA: Catálise e Reatores Químicos**

**ORIENTADOR: Prof. Dr. Dilson Cardoso**

**TEMA 1: Estudo de Peneiras Moleculares como catalisador para reações de Química Fina**

<b>PALAVRAS CHAVE:</b>	Catálise heterogênea	Reação de Knoevenagel
	Catálise básica	Sílicas Híbridas
	Química Fina	Zeólitas

**RESUMO:**

**Introdução:**

Peneiras moleculares são sólidos contendo micro ou mesoporos, e, similarmente às argilas, podem estar formadas por sílica e alumina, mas com duas características importantes: (1) seus poros possuem diâmetros muito similares entre si e (2) o diâmetro dos poros encontram-se na faixa de 1 a 2 nanômetros, ou seja, próximos ao diâmetro de muitas moléculas. Por esse motivo elas são denominadas de peneiras moleculares.

**Objetivos:**

O objetivo deste trabalho é dar continuidade aos nossos trabalhos prévios nesse tema, usando catalisadores básicos, formado por peneiras moleculares.

Os catalisadores serão preparados através da síntese de sílicas híbridas ou a troca iônica de zeólitas com cátions orgânicos, variando-se alguns parâmetros, como diâmetro dos poros, grau de troca iônica e tipo de cátion, ou razão Si/Al, sendo caracterizados quanto as suas propriedades físicas e químicas.

Como reação teste para avaliar suas propriedades catalíticas serão usadas reações do tipo condensação de Knoevenagel, variando-se a estrutura dos reagentes, acompanhando-se os efeitos dessas variáveis na atividade, seletividade e estabilidade do catalisador.

**BIBLIOGRAFIA:**

Karina Arruda Almeida, Dilson Cardoso, *Basic activity of Y zeolite containing alkylammonium cations in Knoevenagel condensation*, *Catalysis Today* 213 (2013) 122–126.

**Doutorados concluído:** Leandro Martins e Karina Arruda Almeida, PPGEQ-UFSCar.

## TEMA PARA DOUTORADO – 1º SEMESTRE DE 2019

<b>ÁREA DE PESQUISA: Catálise e Reatores Químicos</b>
---

<b>ORIENTADOR: Prof. Dr. Dilson Cardoso</b>
---

<b>TEMA 2: Formação de mesoporos em zeólitas através da ação de surfactantes</b>
--

<b>PALAVRAS CHAVE:</b>	Catálise heterogênea, Catálise ácida Cinética Química	Reação de Esterificação Zeólitas
------------------------	---	-------------------------------------

**RESUMO:****Introdução:**

O etanol produzido através da fermentação da sacarose forma um subproduto denominado **óleo fúsel**, constituído principalmente pelo álcool isoamílico.

Embora o óleo fúsel seja um produto de baixa procura no mercado, o seu derivado, o acetato de isoamila, é usado em grandes quantidades como aromatizante artificial por possuir odor a frutas. Também é utilizado como como solvente de tintas, vernizes, e filmes contendo nitrocelulose e celuloide.

A maior parte da produção do acetato de isoamila é obtida através da reação entre o álcool isoamílico e o ácido acético (um ácido fraco), usando ácido sulfúrico (um ácido forte) como catalisador. No entanto, a crescente preocupação com o meio ambiente, bem como a necessidade de se usar instalações especiais devido à ação corrosiva do ácido sulfúrico, tem incentivado a sua substituição por catalisadores menos corrosivos, como é o caso dos catalisadores sólidos.

Entre os catalisadores sólidos com propriedades ácidas destacam-se as peneiras moleculares, em particular as zeólitas, largamente empregada na indústria do petróleo.

**Objetivos:**

Assim, o objetivo deste trabalho é dar continuidade a trabalhos nesse tema, usando catalisadores ácidos formado por zeólitas. Neste projeto propomos o estudo da esterificação de vários álcoois, entre eles o álcool isoamílico e outros álcoois com cadeia ramificada, em produtos de interesse da indústria química. Para tanto, serão feitas modificações no catalisador, constituído por zeólitas ácidas, visando a formação de mesoporos que facilitem a transferência de massa de reagentes e produtos e aumente sua atividade.

**BIBLIOGRAFIA:**

H.M. Koo, J. W. Bae, *Esterification of acetic acid with methanol to methyl acetate on modified zeolites*, **Reaction Kinetics Mechanism & Catalysis**, (2014) 112:499–510

**Mestrado concluído:** Juliana Floriano da Silva, “Propriedades da zeólita Y contendo mesoporos formados por ação do surfactante CTA<sup>+</sup>”, PPGEQ-UFSCar, 2018

**TEMA PARA DOUTORADO – 1º SEMESTRE DE 2019****ÁREA DE PESQUISA: Controle Ambiental****PROFESSOR: Edson Luiz Silva****TÍTULO: Produção de H<sub>2</sub> e CH<sub>4</sub> a partir da co-digestão de vinhaça e caldo de cana em sistema de único e duplo estágio usando reatores anaeróbios de leito fluidizado em condições termofílicas associados ao conceito de biorrefinaria****RESUMO:**

O processo de digestão anaeróbia envolve dois grupos principais de consórcios de microrganismos: as bactérias acidogênicas, que decompõem os substratos principalmente em H<sub>2</sub>, ácido acético e CO<sub>2</sub>; e as arqueias metanogênicas, que convertem o ácido acético, H<sub>2</sub> e CO<sub>2</sub> em gás metano. Assim, em processos anaeróbios de fases separadas, estes grandes grupos de microrganismos podem ser separados de modo a permitir a extração de hidrogênio em um primeiro estágio e metano em um segundo estágio.

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

O anaeróbio de leito fluidizado (RALF) foi testado com sucesso para a produção biológica de hidrogênio, devido ao seu potencial para oferecer vantagens de acumulação de grande quantidade de biomassa sobre o meio suporte, possibilidade para altas taxas de carregamento orgânico, baixos TDHs e boas características de mistura (WU et al., 2003; ZHANG et al., 2007a).

Dessa forma, o objetivo inicial deste trabalho será avaliar a influência dos tempos de detenção hidráulica (variando de 16 a 4 h) para produção de hidrogênio utilizando a co-digestão de vinhaça e caldo de cana (DQO = 10.000 mg/L) em reatores anaeróbios de leito fluidizado em fase única. A produção de metano também será avaliada em RALF em fase única, analisando-se os tempos de detenção hidráulica (36 a 16 h). Posteriormente, será avaliado o sistema de 2 RALFs em série (reator acidogênico seguido de metanogênico), para as melhores condições obtidas para produção de H<sub>2</sub> em RALF em fase única.

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-CHAVE:** Biocombustíveis; biohidrogênio; biometano; RALF, vinhaça, caldo de cana, sistema em duas fases.

**TEMA PARA DOUTORADO – 1º SEMESTRE DE 2019****ÁREA DE PESQUISA: CONTROLE AMBIENTAL****PROFESSOR: Edson Luiz Silva****TÍTULO: Produção de H<sub>2</sub> a partir de glicerol bruto: efeitos do pH, concentração, temperatura e nanopartículas de ferro em reatores anaeróbios de leito fluidizado e compartimentado de leito fixo****RESUMO:**

Atualmente a busca por fontes limpas de combustíveis de modo sustentável já é realidade. Devido ao elevado rendimento energético e por produzir apenas água na sua combustão, o hidrogênio, vem sendo considerado como possível substituto aos combustíveis fósseis. Diante das diversas formas de produção do hidrogênio, a via fermentativa acidogênica constitui-se em boa alternativa, pois além de não necessitar de energia luminosa também é capaz de realizar o tratamento biológico de efluentes líquidos junto à produção de H<sub>2</sub>.

A produção biológica de hidrogênio é realizada por reatores que possuem diversas configurações, nos estudos realizados foram utilizados: reator UASB, reator anaeróbio de leito fixo e reator anaeróbio de leito fluidificado (RALF). Dentre esses o RALF e o reator anaeróbio de leito fixo compartimentado (RALFC) se destacam pela grande concentração de biomassa e elevada transferência de massa. Uma diversidade de substratos pode ser utilizada na produção de hidrogênio por meio de processos fermentativos, entre eles destacam-se: glicose, sacarose, xilose, águas residuárias de soro de queijo, vinhaça e glicerol.

Conjunto a necessidade de se produzir uma nova fonte de energia, o glicerol bruto vem sendo uma alternativa na produção biológica de H<sub>2</sub>, já que esse resíduo representa 10% da produção de biodiesel. Dessa forma a produção biológica de hidrogênio a partir do glicerol bruto torna-se uma maneira sustentável e atrativa de produção energética. Este trabalho teve como principal objetivo, a determinação de um TDH ótimo para produção de H<sub>2</sub> em RALF e RALFC com e sem a adição de nanopartículas de ferro, a partir de glicerol puro e glicerina bruta. A concentração de ambos os substratos será variada de 10 a 30 g.L<sup>-1</sup>, o pH entre 4 e 6, a temperatura de 30 a 55 °C. A variação do TDH será entre 14 e 1h para ambos os reatores.

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-CHAVE: hidrogênio, glicerol bruto, RALF, condições mesofílicas, biodiesel**

**TEMA PARA DOUTORADO – 1º SEMESTRE DE 2019****ÁREA DE PESQUISA: Reatores Químicos Heterogêneos e Catálise****ORIENTADOR: Ernesto A. Urquieta-González****TÍTULO: Zeólitas Aplicadas à Obtenção de Intermediários Químicos****RESUMO:**

A necessidade cada vez mais premente de substituir processos catalíticos homogêneos altamente contaminantes, tem levado à busca por processos com os quais se minimize o uso de catalisadores baseados em ácidos ou bases fortes, os quais geram efluentes de difícil manuseio, envolvem altos custos no seu tratamento e são altamente corrosivos de reatores, tubulações e equipamentos. Na síntese de intermediários químicos são usados ácidos minerais fortes (por exemplo H<sub>2</sub>SO<sub>4</sub>), os que podem ser substituídos por sólidos ácidos, gerando, conseqüentemente, processos catalíticos heterogêneos (química verde, processos químicos verdes), onde o catalisador não se mistura aos produtos formados, assim minimizando o impacto ambiental e reduzindo fortemente os custos de manutenção e de separação de produtos após o processo reacional. Com esse objetivo, na pesquisa em nível de doutorado, serão preparadas zeólitas de diferente natureza, caracterizadas física e quimicamente e aplicadas na obtenção de intermediários químicos à partir de moléculas plataforma de origem biomássica. Na preparação, caracterização e avaliação das zeólitas será utilizada a infraestrutura do Laboratório de Reações e Catálise do Centro de Pesquisas em Materiais Avançados e Energia/UFSCar. A pesquisa está inserida dentro de projeto no âmbito do Centro de Excelência em Pesquisas de Química Sustentável, financiado pela FAPESP ([www.cersuschem.ufscar.br](http://www.cersuschem.ufscar.br)).

**PALAVRAS-CHAVE:** catálise heterogênea, intermediários químicos, zeólitas, química verde.

**TEMA PARA DOUTORADO – 1º SEMESTRE DE 2019****ÁREA DE PESQUISA: Reatores Químicos Heterogêneos e Catálise****ORIENTADOR: Ernesto A. Urquieta-González****TÍTULO: Desenvolvimento de Catalisadores para Aplicação em Processos de Refino de Petróleo e Valorização do Metano****RESUMO:**

O desenvolvimento de catalisadores altamente ativos e seletivos é estratégico no contexto da Indústria de Refino de Petróleo e na Valorização do Metano e se relaciona com a necessidade de menores custos de produção, qualidade dos produtos e atendimento às rigorosas exigências para a preservação do meio ambiente. Nesse contexto, as seguintes linhas poderão ser tema de pesquisa em nível de doutorado:

- *Catalisadores para a hidrodessulfurização ou oxidessulfurização de hidrocarbonetos*
- *Zeólitas aplicadas ao craqueamento de hidrocarbonetos*
- *Zeólitas aplicadas à conversão de metano a metanol*

No estudo se realizará a preparação dos catalisadores, sua caracterização física e química e sua avaliação no processo de reação a ser definido. As pesquisas são realizadas utilizando a infraestrutura do Laboratório de Reações e Catálise do Centro de Pesquisas em Materiais Avançados e Energia/UFSCar, que recebe suporte financeiro de projetos de extensão realizados em parceria com a Petrobras.

**PALAVRAS-CHAVE:** refino de petróleo, craqueamento, hidrodessulfurização, oxidessulfurização, conversão de metano.

**TEMA PARA DOUTORADO – 1º SEMESTRE DE 2019****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.

**PALAVRAS-CHAVE:** valorização do metano, catalisadores óxidos, oxidação

**TEMA PARA DOUTORADO – 1º SEMESTRE DE 2019****ÁREA DE PESQUISA: Reatores e Catálise****PROFESSOR: José Mansur Assaf****TÍTULO: Desenvolvimento de materiais para reações de produção de hidrogênio e gás de síntese****RESUMO:**

Utilizando matérias-primas fósseis como o gás natural e renováveis como o biogás, com auxílio de catalisadores, pode-se gerar uma mistura de hidrogênio e monóxido de carbono, denominada gás de síntese, que é matéria-prima para a produção de combustíveis de alto valor agregado.

Apesar da origem fóssil do gás natural, combustíveis obtidos a partir dele adicionam menor carga poluente à atmosfera quando comparados ao diesel e gasolina de petróleo e são considerados bons combustíveis para uma etapa de transição para energia verde.

O biogás é gerado na fermentação anaeróbia de resíduos orgânicos industriais e domésticos tem como principais constituintes o metano e o dióxido de carbono. Se liberados para a atmosfera, estes gases contribuem para agravar o efeito estufa. Gás natural, por sua vez, está presente em poços de extração de petróleo da área do pré-sal e em reservatórios naturais que o Brasil vai explorar com mais intensidade nos próximos anos.

Várias estruturas óxidas possuem propriedades que possibilitam aplicações nas áreas de química e engenharia, especialmente em energia e catálise, destacando-se capacidade de adsorção de moléculas, mobilidade de íons oxigênio na rede cristalina, capacidade redox, entre outras. Apresentam, porém, algumas limitações, principalmente em relação à área específica e estabilidade em determinadas condições experimentais. Modificações estruturais podem aumentar sua estabilidade química e promover seu desempenho catalítico, enquanto a utilização de um suporte de alta área, como sólidos mesoporosos, podem proporcionar um aumento de área exposta.

Neste trabalho, materiais com estruturas do tipo hidrotalcitas, perovskitas, espinélios ou óxidos mistos serão selecionados e estudados visando aplicação como catalisadores para reações de produção de hidrogênio e gás de síntese.

**PALAVRAS-CHAVE: sólidos mesoporosos, hidrogênio, gás de síntese, perovskitas, hidrotalcitas**

**TEMA PARA DOUTORADO – 1º SEMESTRE DE 2019****ÁREA DE PESQUISA: Reatores e Catálise****PROFESSOR: José Mansur Assaf****TÍTULO: Desenvolvimento de catalisadores novos e avançados com estruturas de MOFs para a oxidação de metano a metanol****RESUMO:**

A oxidação de metano a metanol sobre redes metalorgânicas (do inglês, metal-organic frameworks, MOFs) é uma área de pesquisa pouco explorada ainda. Esses materiais são constituídos por uma extensa rede de íons ou agrupamentos (clusters) metálicos, coordenados a moléculas orgânicas multidentadas, em sua maioria, carboxilatos, bipyridinas, sulfonatos e fosfonatos culminando em dimensões porosas bem definidas. A área superficial de MOFs, que varia tipicamente de 1000 a 10000 m<sup>2</sup>/g, e as estabilidades química e térmica (até 500°C) destes materiais os fazem atraentes para aplicações em catálise. Recentemente, foi reportado que o etano é oxidado seletivamente a etanol sobre MOFs à base de Fe em fase gasosa, o que indica que estes materiais podem potencialmente ser seletivos à produção de metanol a partir da oxidação de metano. No presente projeto, propõe-se a investigação de MOFs à base de Fe aplicadas à oxidação de metano a espécies com um ou mais átomos de carbono, como o metanol. Uma série de MOFs será preparada (explorando-se, por exemplo, a natureza química do centro metálico e dos ligantes orgânicos), caracterizada e aplicada à oxidação de metano, visando o conhecimento sistemático dos efeitos das propriedades químicas e físicas destes materiais na cinética e no mecanismo da reação de oxidação.

**PALAVRAS-CHAVE: metano, metanol, MOFs, catálise heterogênea**

## TEMA PARA Doutorado – 1º SEMESTRE DE 2019

**ÁREA DE PESQUISA: Reatores Químicos Heterogêneos e Catálise**

**PROFESSOR: José Maria Correa Bueno**

**TÍTULO:** Zeolites exchanged with  $Cu_xO_y$  single sites for the methane partial oxidation to methanol: the effect of Zeolite structure and other metal oxides in the single site activity

**RESUMO:**

Understanding the methanol partial oxidation catalyzed by enzymes allowed the development of inorganic catalysts based on Zeolites exchanged with sites of copper and iron, <sup>1-3</sup> and Mordenite exchanged with the trinuclear species ( $[Cu_3(\mu-O)_3]^{2+}$ ) showed significant activity. <sup>4</sup> Higher methanol production per Cu site (compared to Mordenite) was observed for smaller pores Zeolites structures, such as AEI, CHA, and AFX exchanged with  $[Cu_2(\mu-O)]^{2+}$ . <sup>5</sup> The Cu activity dependence on the zeolite structure has been attributed to the Cu-O-Cu angle when coordinated to the zeolite, <sup>5</sup> however, the oxygen basicity can be significantly different from one zeolite to the other, <sup>4</sup> and this parameter has not been taken in consideration. Furthermore, different Cu species can be formed in the zeolites, such as ( $[Cu_3(\mu-O)_3]^{2+}$ ), ( $[Cu_2(\mu-O)]^{2+}$ ), ( $[Cu_2(\mu-O)]^{2+}$ ), and CuO, <sup>6</sup> however, it is not clear how the Zeolite structure can affect the active species formation. It is known that Cu single sites are the most active for the partial oxidation of methanol to methanol; however, computational studies also reveal that CoO +, NiO +, and FeO + are potentially active for the reaction. Hence, in the first part of this PhD proposal, it will be studied the effect of the Zeolite structure in the formation of the single site active species [such as ( $[Cu_3(\mu-O)_3]^{2+}$ ), ( $[Cu_2(\mu-O)]^{2+}$ ), ( $[Cu_2(\mu-O)]^{2+}$ )]. We propose the preparation of a series of catalysts based on Cu and Cu co-impregnated with Fe, Ni, and Co exchanged in Zeolites such as Mordenite (MOR), ZSM-5 (MFI), SSZ-16 (AFX), SSZ-13 (CHA), and Cu-SSZ-39 (AEI). Mass spectroscopy, in situ EXAFS and FTIR will be used to characterize the catalytic active sites and identify reaction intermediates. Another challenge regarding the zeolites exchanged with Cu single sites is the necessity of a step of re-oxidation of the active site after methanol formation. From the applied point of view, more active and selective catalysts need to be developed for the direct conversion of methane to methanol, furthermore, it would be ideal a catalytic system that allows co-feeding methane and the oxidizing agent. Reducible oxides, such as cerium, titanium and zirconium oxides are known to activate water and promote oxygen spill over to metal. In the second part of this PhD proposal, reducible oxides will be introduced near the Cu active site it could assist in the metal re-oxidation if the reactor is co-fed with methane and water. This modification will be carried out by traditional wet-impregnation or by Atomic Layer Deposition (ALD) (in collaboration with Prof. James Dumesic at the University of Wisconsin-Madison).

## References

- (1) Grundner, S.; Markovits, M. A. C.; Li, G.; Tromp, M.; Pidko, E. A.; Hensen, E. J. M.; Jentys, A.; Sanchez-Sanchez, M.; Lercher, J. A. *Nature communications* 2015, 6, 7546-7546.
- (2) Taifan, W.; Baltrusaitis, J. *Applied Catalysis B: Environmental* 2016, 198, 525-547.
- (3) Hammond, C.; Forde, M. M.; Ab Rahim, M. H.; Thetford, A.; He, Q.; Jenkins, R. L.; Dimitratos, N.; Lopez-Sanchez, J. A.; Dummer, N. F.; Murphy, D. M.; Carley, A. F.; Taylor, S. H.; Willock, D. J.; Stangland, E. E.; Kang, J.; Hagen, H.; Kiely, C. J.; Hutchings, G. J. *Angewandte Chemie - International Edition* 2012, 51, 5129-5133.
- (4) Zhang, Y.; Yu, J.; Yeh, Y.-H.; Gorte, R. J.; Rangarajan, S.; Mavrikakis, M. *The Journal of Physical Chemistry C* 2015, 119, 28970-28978.
- (5) Mahyuddin, M. H.; Staykov, A.; Shiota, Y.; Miyanishi, M.; Yoshizawa, K. *ACS Catalysis* 2017, 7, 3741-3751.
- (6) Markovits, M. A. C.; Jentys, A.; Tromp, M.; Sanchez-Sanchez, M.; Lercher, J. A. *Topics in Catalysis* 2016, 59, 1554-1563.

**PALAVRAS-CHAVE: methane, metanol**

**TEMA PARA Doutorado – 1º SEMESTRE DE 2019**

**ÁREA DE PESQUISA: Reatores Químicos Heterogêneos e Catálise**

**PROFESSOR: José Maria Correa Bueno**

**TÍTULO: Understanding the surface chemistry on Cu-based catalysts on the CO<sub>2</sub> hydrogenation to methanol**

**RESUMO:**

CO<sub>2</sub> is a molecule present in natural gas and also formed as byproduct of methane reforming. A commercial utilization of this molecule would improve the overall sustainability degree of the natural gas use. The hydrogenation of CO<sub>2</sub> can follow three main pathways: (i) formation of formate (HCOO), which is further hydrogenated to dioxymethylene (H<sub>2</sub>COO), followed by methoxide (H<sub>3</sub>CO) to methanol; (ii) formation of CO following the retro-Water Gas Shift reaction (r-WGS); (iii) CO<sub>2</sub> could be protonated to hydrocarboxyl (COOH) followed by COHOH, which then decomposes to COH, an intermediate to methanol.<sup>1-3</sup> Indeed, the r-WGS pathway appears to be the most energetically favorable process<sup>2</sup> which is a major drawback in the process, since CO<sub>2</sub> and H<sub>2</sub> are consumed to form CO and water.

**Hence, the suppression of the r-WGS is one of the major challenges in the CO<sub>2</sub> hydrogenation to methanol.** The cost-prohibitive In<sub>2</sub>O<sub>3</sub> was found to block the r-WGS pathway due to the arrangement of the vacancies which are selectively activate CO<sub>2</sub> over CO.<sup>3,4</sup>

**In this project, it will be proposed the synthesis of Cu-based catalysts, their modification and use in the CO<sub>2</sub> reduction to methanol.** Copper catalysts have shown high catalytic activity for hydrogenation, but also to WGS and r-WGS.<sup>5</sup> Bueno and coworkers have identified a correlation between Cu<sup>0</sup>/Cu<sup>δ+</sup> ratio as well as the bond length Cu-O.<sup>6-8</sup> As it regards the hydrogenation of CO<sub>2</sub>, the role of Cu<sup>0</sup> and Cu<sup>δ+</sup> is not yet clear and different studies have reached contradictory conclusions on their roles. **Indeed, the understanding of the of the CO<sub>2</sub> hydrogenation over the Cu surface needs refinement and fundamental surface studies, which include controlling the electronic properties and the surface species distribution at an atomic level and the electronic properties.** The interaction of Cu with the support or an alloys heteroatom might lead to significant changes in these properties.

**Cu nanoparticles supported in metal oxides with different surface properties, such as SiO<sub>2</sub>, Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, ZrO<sub>2</sub> and CeO<sub>2</sub> will be prepared, seeking to understand the effect of the support.** The catalytic activities will be rationalized based on the characterization techniques, with a special attention to the *in situ* EXAFS.

**In a second phase of the project, supported Cu will be alloyed with Ni or Au, seeking to tailor the surface electric properties of the nanoparticle.** Once again, the structure and surface properties of the nanoparticles will be studied the traditional characterization techniques, as well as *in situ* XAS analyses in order to explain the catalytic behaviors.

**References**

- (1) Yang, Y.; Evans, J.; Rodriguez, J. A.; White, M. G.; Liu, P. *Physical Chemistry Chemical Physics* **2010**, *12*, 9909.
- (2) Grabow, L. C.; Mavrikakis, M. *Acs Catalysis* **2011**, *1*, 365.
- (3) Ye, J.; Liu, C.; Mei, D.; Ge, Q. *ACS Catalysis* **2013**, *3*, 1296.
- (4) Ye, J.; Liu, C.; Ge, Q. *The Journal of Physical Chemistry C* **2012**, *116*, 7817.
- (5) Chen, C.-S.; Lin, J.-H.; Lai, T.-W.; Li, B.-H. *J Catal* **2009**, *263*, 155.
- (6) Caldas, P. C. P.; Gallo, J. M. R.; Lopez-Castillo, A.; Zanchet, D.; C. Bueno, J. M. *Acs Catalysis* **2017**, 2419.
- (7) Freitas, I. C.; Damyanova, S.; Oliveira, D. C.; Marques, C. M. P.; Bueno, J. M. C. *Journal of Molecular Catalysis a-Chemical* **2014**, *381*, 26.
- (8) Sato, A. G.; Volanti, D. P.; Meira, D. M.; Damyanova, S.; Longo, E.; Bueno, J. M. C. *J Catal* **2013**, *307*, 1.

**PALAVRAS-CHAVE: CO<sub>2</sub> hydrogenation**

**TEMA PARA DOUTORADO – 1º SEMESTRE DE 2019****ÁREA DE PESQUISA: SISTEMAS PARTICULADOS****PROFESSOR: JOSÉ TEIXEIRA FREIRE****TÍTULO: SECAGEM E COMBUSTÃO DA BORRA DE CAFÉ EM LEITO MÓVEL****RESUMO:**

A borra de café, principal resíduo da indústria do café solúvel, por apresentar alto teor de compostos orgânicos, é um resíduo poluente que necessita de oxigênio para se degradar, além disso a presença de cafeína, taninos e polifenóis lhe confere natureza tóxica, dificultando a sua deposição em aterros sanitários. Por outro lado, a borra de café tem poder calórico maior que outras biomassas como pellets de madeira e bagaço de cana, o que viabiliza a sua utilização como combustível sólido de caldeiras para a geração de energia fechando o ciclo do processo na indústria do café solúvel. Assim esta proposta de doutorado tem por objetivo um estudo da queima de borra de café como combustível sólido para caldeiras de geração de vapor através das principais etapas: secagem, devolatilização, gaseificação e a reação de combustão. A proposta consiste em duas etapas, a primeira experimental para obtenção das propriedades térmicas e fluidodinâmicas não disponíveis na literatura e para o estudo detalhado da transferência de calor e massa nas etapas de combustão da partícula. A segunda é o estudo dos equipamentos, secador e caldeira, por meio da modelagem e simulação do processo, avaliando a transferência de momento, calor e massa.

**PALAVRAS-CHAVE:** borra de café; secagem, combustão.

**TEMA PARA DOUTORADO – 1º SEMESTRE DE 2019****ÁREA DE PESQUISA: Sistemas Particulados****PROFESSOR: Luís A. M. Ruotolo****TÍTULO: Dessalinização por Deionização Capacitiva: Desenvolvimento de Eletrodos e Otimização do Processo****RESUMO:**

Nos últimos anos o interesse pela tecnologia de deionização capacitiva (DIC) vem aumentando exponencialmente devido ao seu baixo custo e à possibilidade de sua utilização para tratamento de água (dessalinização e abrandamento). No contexto brasileiro, o desenvolvimento desta tecnologia seria de grande interesse para a produção de água potável a partir da dessalinização de água salobra presente em regiões semiáridas, promovendo assim o desenvolvimento social e econômico desta região.

A tecnologia DIC baseia-se no conceito de remoção dos íons presentes na fase aquosa e sua armazenagem na dupla camada elétrica, formada quando um eletrodo é polarizado positiva e negativamente. Diante deste aspecto, o desenvolvimento de novos materiais de eletrodo se constitui em um dos maiores desafios na área de DIC e a obtenção de um eletrodo com elevada área superficial específica (associada principalmente a mesoporos) e de baixo custo de produção são fundamentais.

Neste projeto serão usados conceitos de eletroquímica e ciência e engenharia de materiais para o desenvolvimento de novos eletrodos a base de carbono dentro de um conceito de sustentabilidade que visa o aproveitamento de materiais abundantes no Brasil, mais especificamente a lignina e polissacarídeos, para a produção de carvões ativados a serem usados como eletrodos no processo de dessalinização. Em uma segunda etapa do projeto, usando conceitos de engenharia química e engenharia eletroquímica, será desenvolvida uma célula de dessalinização para o estudo de diferentes modos operacionais visando a otimização das variáveis de processo que maximizem a cinética de dessalinização e a eficiência energética, minimizando assim o consumo de energia do processo. Após a otimização do eletrodo e do processo, esta célula será utilizada para a dessalinização de uma água salobra real.

**PALAVRAS-CHAVE: adsorção, eletrossorção, carvão ativado, dessalinização**

**TEMA PARA DOUTORADO – 1º SEMESTRE DE 2019****ÁREA DE PESQUISA: Sistemas Particulados****PROFESSOR: Luís A. M. Ruotolo****TÍTULO: Desenvolvimento de Processos Eletroquímico, Fotocatalítico e Adsorptivos Acoplados para o Tratamento de Efluentes Industriais Contendo Compostos Fenólicos****RESUMO:**

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

O tratamento destes efluentes é feito muitas vezes utilizando processos biológicos; entretanto, algumas categorias de compostos, entre eles os fenólicos, são bastante refratárias a este tipo de tratamento e requerem a utilização de tecnologias conhecidas como Processos Oxidativos Avançados, que se baseiam na geração química ou fotoquímica de radicais oxidantes. As tecnologias eletroquímica e fotocatalítica surgiram como alternativas ambientalmente compatíveis e com vantagens como eliminação de transporte e estocagem de produtos químicos perigosos, diminuição da mão-de-obra e facilidade de controle do processo.

O desenvolvimento se baseará na utilização de eletrodos de  $PbO_2$  e fotocatalisadores com atividade quando irradiados com luz solar para a geração de radicais oxidantes *in situ* utilizando-se reatores especialmente projetados para essa tarefa. Quando concentrações baixas são atingidas e estes processos se tornam ineficientes, será então acoplado um processo de adsorção para o polimento da solução final a ser descartada.

Serão estudadas variáveis de processo e de projeto importantes para o desenvolvimento da tecnologia visando o tratamento de águas fenólicas provenientes da empresa Operan S.A.

**PALAVRAS-CHAVE: tratamento de efluentes, poluentes orgânicos, adsorção, fotocátalise, reatores eletroquímicos**

**TEMAS PARA DOUTORADO – 1º SEMESTRE DE 2019****ÁREA DE PESQUISA: Sistemas Particulados****PROFESSOR: Maria do Carmo Ferreira****USO DE BIOMASSA PARA GERAÇÃO DE ENERGIA: AVALIAÇÃO DO DESEMPENHO DE DISPOSITIVOS MECÂNICOS COMO ALIMENTADORES DE RESÍDUOS SÓLIDOS EM REATORES PNEUMÁTICOS****RESUMO**

O uso de biomassas tem se mostrado como excelente alternativa para a geração de energia de forma sustentável, por exemplo em operações de pirólise, gaseificação e combustão. Um dos problemas na operação de reatores termoelétricos é garantir uma alimentação estável, eficiente e econômica dos materiais particulados no interior do reator. A alimentação de sólidos pode ser particularmente limitante no caso de partículas provenientes de rejeitos vegetais, como borra de café, pó de serragem, fibras vegetais de coco ou bambu, entre outras, já que estes pós possuem características diferenciadas em termos de distribuição de tamanho, composição e formato em comparação com materiais convencionais.

O objetivo deste trabalho é avaliar o desempenho de um alimentador tipo parafuso helicoidal como alimentador de pós provenientes de resíduos sólidos em reatores de transporte pneumático. Serão selecionados diferentes materiais particulados, para os quais será efetuada uma caracterização detalhada das propriedades físico-químicas e de escoabilidade. O desempenho do alimentador em um transportador pneumático será avaliado através de medidas de perdas de carga, vazão de sólidos transportados e verificação de estabilidade do escoamento. A partir dos dados obtidos, tentaremos correlacionar o desempenho do alimentador com as características físicas e parâmetros de escoabilidade de cada material. Os dados serão utilizados para a validação de um modelo para descrever o escoamento bifásico no reator de leito fluidizado circulante.

**PALAVRAS-CHAVE:**

Ângulos de repouso; funções de fluxo; escoamento sólidos, alimentadores sólidos.

**TEMA PARA DOUTORADO – 1º SEMESTRE DE 2019****ÁREA DE PESQUISA:** Controle Ambiental**PROFESSOR:** Mônica Lopes Aguiar**TÍTULO:** Desenvolvimento de meios filtrantes contendo nanofibras para remoção de nanopartículas dispersas em ar.**RESUMO:**

Para se alcançar altas eficiências de coleta de partículas com baixas quedas de pressão novas tecnologias de fabricação de meios filtrantes têm surgido, como, por exemplo, os filtros com nanofibras. A aplicação das nanofibras na filtração de ar é uma tecnologia relativamente atual. O processo de *electrospinning* é o mais utilizado para fabricação de meios filtrantes com nanofibras e se distingue dos processos convencionais de produção pela versatilidade em processar diferentes polímeros, habilidade em controlar diâmetro, morfologia, orientação e estrutura das fibras. É um método que utiliza força eletrostática para a obtenção de fibras com superfície de contato muito maior do que as produzidas por outros métodos. Um dos desafios deste processo de produção é o ajuste e controle dos vários parâmetros que influenciam a produção das nanofibras como a concentração do polímero, a proporção de solvente, o tempo de deposição das nanofibras no substrato, a distância da agulha até o coletor e a voltagem aplicada. Por esse motivo, o domínio do conhecimento da técnica de produção de nanofibras torna possível sua otimização. O presente estudo propõe o desenvolvimento de diferentes meios filtrantes utilizando-se a técnica de eletrofiação (*electrospinning*) para aplicação na remoção de nanopartículas dispersas em ar. Para isso, serão necessárias a determinação dos melhores parâmetros operacionais em relação à eletrofiação das nanofibras. Após a produção dos meios filtrantes fibrosos, eles serão caracterizados fisicamente e posteriormente serão obtidas as eficiências de coleta para partículas na faixa nanométrica. Dessa forma, será possível avaliar como as propriedades das nanofibras influenciam a eficiência de coleta de nanopartículas associada à baixa queda de pressão. O estudo será desenvolvido com a colaboração da professora Vádila G.G.Béttega.

**PALAVRAS-CHAVE:** Filtração, nanofibras, nanopartículas, eletrofiação

**TEMA PARA DOUTORADO – 1º SEMESTRE DE 2019****ÁREA DE PESQUISA: CONTROLE AMBIENTAL****PROFESSOR: MÔNICA LOPES AGUIAR****TÍTULO DO TEMA:** Filtração de gases utilizando filtro de mangas de jato de ar pulsante de processos de despoeiramento de vários setores de uma indústria siderúrgica**RESUMO:**

Em 2015, a poluição em geral foi responsável por cerca de 9,3 milhões de mortes prematuras em humanos (16% do total), um valor três vezes maior que a soma da aids, tuberculose e malária. Deste valor, 6,5 milhões são devidas à poluição do ar, das quais 4,2 milhões tem como responsável o material particulado presente no ar ambiente, sendo esta a sexta maior causa de mortes prematuras, ficando a frente de colesterol alto e de uso de álcool e drogas. Investir no controle da emissão de material particulado não só melhora a saúde da população, mas também gera retorno financeiro. O filtro de mangas, cuja eficiência é maior que 99% para uma ampla faixa granulométrica é amplamente utilizado na filtração de gases. O mercado de filtro de mangas movimentou 9,13 bilhões de dólares em 2015 e estima-se que em 2020 valerá 12,12 bilhões de dólares. Esforços dos governos em reduzir as emissões estão fomentando este setor. As mangas são meios filtrantes que podem ser constituídos de diferentes materiais e receberem diversos tratamentos. Elas podem ser revestidas com PTFE (Teflon®) para diminuir a emissão de material particulado, proteger o meio filtrante contra a penetração de partículas, diminuir a adesão entre a torta e as fibras facilitando a limpeza e, conseqüentemente, minimizar a ocorrência da limpeza por blocos (*patchy cleaning*). Dado que os fabricantes podem possuir distintos processos de produção e controle de qualidade, os meios filtrantes podem apresentar diferenças quanto à eficiência de coleta, a queda de pressão, a vida útil, dentre outras características. Sendo assim, é de suma importância a escolha adequada de um meio filtrante para cada processo industrial. Ele deve conciliar alta vida útil, baixa queda de pressão, alta eficiência de coleta de partículas. Deve ser constituído de um material que suporte as propriedades do gás (temperatura e corrosividade) e do material particulado (higroscopia, abrasividade e tamanho). Visto que um filtro de mangas pode ter milhares de metros quadrados de área útil de filtração e uma indústria pode contar com dezenas desses equipamentos, a aplicação de um meio filtrante equivocado pode resultar na troca precoce das mangas, gasto excessivo de energia no sistema de ventilação, emissão de partículas acima dos limites legais e prejuízo à saúde da população, resultando, portanto, em um significativo prejuízo financeiro para a indústria. Para isso, é preciso que um filtro de mangas tenha vida útil prolongada, além de operar com baixa queda de pressão e alta eficiência de coleta para partículas finas. Portanto, deve-se empregar um meio filtrante cujo material suporte as características do gás como: vazão, temperatura e corrosividade; e, também, do material particulado, como higroscopia, abrasividade e tamanho. Sendo assim, este trabalho visa avaliar química e fisicamente diferentes meios filtrantes que podem ser empregados no processo de filtração de gases em filtro de mangas de diversos setores de uma indústria siderúrgica.

**PALAVRAS-CHAVE:** Filtração de gases; filtros industriais, filtros mangas, carga eletrostática; porosidade, tortas de filtração, permeabilidade, eficiência de coleta.

**TEMA PARA DOUTORADO – 1º SEMESTRE DE 2019****ÁREA DE PESQUISA: CONTROLE AMBIENTAL****PROFESSOR: MÔNICA LOPES AGUIAR****TÍTULO DO TEMA:** O efeito da carga eletrostática nos meios filtrantes e nas partículas durante a formação e remoção de tortas de filtração de gases em filtros híbridos industriais.**RESUMO:**

Atualmente, devido a grande preocupação com o meio ambiente e na tentativa de reduzir a concentração de material particulado presente no ar atmosférico, sistemas híbridos de filtração de gases, que empregam o princípio de dois equipamentos convencionais (filtros de mangas e precipitador eletrostático) na remoção de particulados, estão sendo investigados com finalidade de melhorar a eficiência de coleta dos filtros para partículas submicromicas e nanopartículas, como também reduzir os custos operacionais do processo. As partículas inaláveis, quanto mais finas (abaixo de  $1,0 \mu\text{m}$ ) podem se depositar até mesmo no cérebro humano, causando grandes impactos sobre a saúde, incluindo doenças degenerativas do cérebro, como: Alzheimer, demência e redução da inteligência. Uma das soluções para a remoção das partículas finas do ar é o desenvolvimento de novas tecnologias ou a adequação de equipamentos já existentes em plantas industriais em operação. Dentre os equipamentos existentes na separação desses materiais particulados do ar, podemos destacar os filtros de mangas (filtros de tecido). Esses vêm ganhando destaque no setor industrial, devido às novas tecnologias de fabricação de meios filtrantes cada vez mais eficientes na remoção de partículas submicrônicas em correntes gasosas. Outro equipamento que merece destaque é o precipitador eletrostático (ESP), estes equipamentos apresentarem elevadas eficiências de coleta para partículas acima de  $1 \mu\text{m}$  e baixíssimos custos operacionais em relação aos filtros fibrosos. No entanto, a eficiência de coleta de um precipitador eletrostático diminui para partículas menores que  $1 \mu\text{m}$  e partículas na faixa de 200 a 500nm são removidas com menor eficiência de coleta. Devido a essa grande demanda por filtros mais eficientes e econômicos, o número de filtros híbridos em operação no mercado, bem como o número de estudos relacionados a este tema vem aumentando nos últimos 12 anos, sendo de aproximadamente de 450 em 2005 a 1500 em 2017. Estudos recentes apontam que o carregamento das partículas induz a formação de tortas com menor resistência ao escoamento de gás e com isso facilita a limpeza do meio filtrante, aumentando o seu tempo de vida útil. No entanto, essa relação ainda não foi completamente compreendida e quantificada para filtros fibrosos, os mais utilizados na maioria das indústrias. Assim, o presente trabalho propõe avaliar o efeito do carregamento dos meios filtrantes e das partículas na formação de torta de filtração de gases por meio da análise da porosidade e da distribuição das partículas na torta e no filtro. Dessa maneira, espera-se realizar uma comparação entre as tortas de filtração formadas, com e sem o carregamento eletrostático, o que permitirá compreender como as cargas afetam na queda de pressão durante a filtração e durante a limpeza dos filtros, com a finalidade de aumentar os ciclos de filtração, a eficiência de coleta e diminuir os custos de operação e manutenção dos filtros de mangas.

**PALAVRAS-CHAVE:** Filtração de gases; filtros industriais, filtros mangas, carga eletrostática; porosidade, tortas de filtração, permeabilidade, eficiência de coleta.

## TEMA PARA DOUTORADO – 1º SEMESTRE DE 2019

<b>ÁREAS DE PESQUISA: Engenharia Bioquímica</b>
<b>PROFESSOR: Paulo Waldir Tardioli</b>
<b>TÍTULO: Utilização de glicerol como plataforma química para obtenção de produtos químicos renováveis de interesse econômico</b>
<b>RESUMO:</b> O glicerol é um líquido hidrocópico, viscoso e de sabor adocicado, amplamente utilizado em segmentos de cuidados pessoais, produtos farmacêuticos, alimentos e bebidas, devido a sua não toxicidade e valor nutricional. Até início do ano 2000, glicerol era produzido por síntese química a partir de propileno. Atualmente, a produção de biodiesel (processo de transesterificação de óleos vegetais) é a principal fonte de glicerol (Glycerol market from biodiesel, fatty acids, fatty alcohols for personal care, alkyd resins, polyether polyols applications, downstream opportunities and segment forecasts to 2020, <i>Grand View Research</i> , 2015, disponível em <a href="https://www.grandviewresearch.com/press-release/global-glycerol-market">https://www.grandviewresearch.com/press-release/global-glycerol-market</a> ). O aumento dos mercados de biodiesel e oleoquímicos deverá impulsionar a disponibilidade de glicerol, evidenciando o glicerol como plataforma química para a produção de produtos químicos renováveis. Nesta pesquisa pretende-se explorar duas tecnológicas de valorização econômica do glicerol. A primeira refere-se à produção de triacetina por esterificação enzimática de ácido acético e glicerol. Triacetina é comumente utilizada como aditivo alimentar (função solvente em aromas e umectante), excipiente em produtos farmacêuticos (função umectante, plastificante e solvente) e aditivo de combustível como agente antidetonante. A segunda tecnologia refere-se à produção de monoacilglicerol (MAG) por esterificação enzimática de glicerol e ácidos graxos livres do destilado da desodorização do óleo de soja (subproduto do refino do óleo de soja composto majoritariamente por ácidos graxos livres – 45,38% e triglicerídeos – 18,45%). MAGs são muito utilizados em indústrias de alimentos, cosméticos e farmacêuticos como emulsificantes não iônicos e agentes texturizadores (Fregolente et al., <i>Quim. Nova</i> , 2009, 32:1539-1543). MAGs purificados e em misturas com DAGs contribuem com 75% do mercado mundial de agentes emulsificantes (Damstrup, M. L. Process development of enzymatic glycerolysis for industrial monoacylglycerol production, PhD Thesis, 2008, Technical University of Denmark). CLEA magnético e poroso de lipase de pâncreas de porco, desenvolvido no LabEnz-DEQ/UFSCAr (Guimarães et al., <i>Molecules</i> , 23, 2993, 2018) será avaliado como biocatalisador nas reações de esterificação com glicerol na ausência de solventes, fazendo-se uso de surfactantes para a formação de micelas reversas (Anitha et al., <i>Chem. Eng. J.</i> , 2016, 295:119-130). As condições reacionais a serem otimizadas serão: razão molar ácido carboxílico/glicerol, temperatura, concentração de biocatalisador e tempo de reação.
<b>PALAVRAS-CHAVE:</b> lipase; CLEAs magnéticos; triacetina; monoacilglicerol.

**TEMA 1 PARA DOUTORADO – 1º SEMESTRE DE 2019****ÁREA DE PESQUISA: Engenharia Bioquímica****PROFESSOR: Raquel de Lima Camargo Giordano****TÍTULO: Síntese de partículas de sílica e magnéticas para imobilização e purificação de proteínas**

**RESUMO:** Materiais mesoporosos (faixa de poros de 2 a 15nm) são apropriados para aplicações na imobilização e/ou purificação de enzimas, já que estas frequentemente possuem raio hidrodinâmico nessa ordem de grandeza. O processo de síntese é complexo e de difícil controle e, embora muito estudado, ainda não há um protocolo confiável que permita controle das propriedades desejadas no suporte. Este trabalho pretende contribuir nessa direção, estudando inicialmente silicatos e depois silicatos magnéticos. A maioria dos materiais mesoporosos para aplicações enzimáticas são silicatos, cuja polimerização ocorre sobre um “template” orgânico que permite controlar o diâmetro e mesmo moldar a forma dos poros. Primeiramente, materiais mesoporosos serão obtidos em síntese ácida ou microemulsão, capaz de oferecer poros controlados na faixa de diâmetros desejada. Se necessário, tratamento hidrotérmico após a síntese pode ser utilizado para reorganização, crescimento e consolidação da estrutura sólida. Os materiais funcionalizados e com diferentes características morfológicas serão avaliados para aplicação com lipases, em particular lipase extraída de mamona. Numa segunda etapa, será desenvolvido protocolo para fino recobrimento de núcleos de ferro paramagnéticos (nanopartículas magnéticas) com sílica, buscando-se condições de estabilidade na síntese e aplicações das partículas mesoporosas. No final, serão testados procedimentos de obtenção das partículas pelo recobrimento e funcionalização das partículas magnéticas. O foco de aplicação será a utilização delas na imobilização de celulasas e xilanases.

**PALAVRAS-CHAVE: silicatos, mesoporos, magnetismo, proteínas**

**TEMA PARA DOUTORADO – 1º SEMESTRE DE 2019****ÁREA DE PESQUISA: AP3/AP5****PROFESSOR: Raquel de Lima Giordano / Marcelo Perencin de Arruda Ribeiro****TÍTULO: Otimização, Automação, Monitoramento e Controle de Reator de Síntese Enzimática de Galacto-Oligossacarídeos em Reator Semi-Contínuo.****RESUMO:**

Este projeto visa estudar e desenvolver reator de síntese enzimática de Galacto-oligossacarídeos (GOS) utilizando a enzima  $\beta$ -galactosidase (imobilizada e livre) como biocatalisador e o permeado do soro como substrato. GOS são prebióticos utilizados na indústria de alimentos e valorizados comercialmente. O uso do permeado do soro, um resíduo da indústria de laticínios, como substrato na produção enzimática desses prebióticos é uma alternativa ao seu descarte gerando um produto com alto valor agregado. Neste doutorado propõe-se realizar a automação de reator tipo batelada alimentada de síntese enzimática de GOS tanto utilizando enzimas imobilizadas como livres. Modelos cinéticos desenvolvidos pelo grupo serão utilizados para otimizar o processo. Monitoramento em tempo real e *in situ* utilizando espectrofotometria de infravermelho (FT-NIR), ultravioleta e visível (UV-vis) deverá ser desenvolvido e utilizado no controle do reator. O projeto envolve tanto a realização de ensaios experimentais para ajuste de modelos e validação de propostas, como o desenvolvimento de algoritmos para comunicação entre máquinas de controle e para análise matemática computacional. Este trabalho se insere em projeto em andamento (FAPESP-WVU Proc.:XX) em parceria com o grupo do Prof. Fernando Lima (West Virginia University). Devido a essa interação entre os grupos, o candidato deve possuir a capacidade de comunicar-se satisfatoriamente em inglês, tanto na forma oral quanto escrita.

**PALAVRAS-CHAVE: Galacto-oligossacarídeos, automação e controle, síntese enzimática.**

**TEMA PARA DOUTORADO – 1º SEMESTRE DE 2019**

<b>ÁREA DE PESQUISA: Simulação e Controle de Processos</b>
<b>LaDABio: Desenvolvimento e Automação de Bioprocessos</b>
<b>PROFESSOR: Roberto de Campos Giordano</b>
<b>Co-orientador: Felipe Fernando Furlan</b>
<b>TÍTULO: Análise Retro-Tecno-Econômica-Ambiental da produção de biodiesel no contexto brasileiro</b>
<b>RESUMO:</b> <p>O biodiesel pode ser produzido por diversas fontes vegetais e animais como óleos vegetais (soja, amendoim, dendê, girassol, etc.), óleo de fritura usado e gorduras animais (sebo bovino, gordura suína, etc.) No Brasil, sua principal fonte é o óleo de soja refinado, que correspondeu a aproximadamente 70% de toda produção em 2017, e a principal rota de produção é a catálise básica homogênea. Nesta, a presença de ácidos graxos livres tem impacto direto em sua eficiência, pois favorece a reação de saponificação, acarretando em perdas de produto pela formação de micelas que dificultam a separação. Outra rota possível emprega catalisadores enzimáticos. Nesse caso, a presença de ácidos graxos livres não tem impacto tão drástico, o que aumenta o número de opções de matérias primas, como por exemplo o óleo de soja degomado. Entretanto, é imprescindível realizar uma análise completa do processo de produção para verificar a viabilidade técnica do mesmo. Além disso, a viabilidade econômica e a análise do impacto ambiental do processo também são fundamentais para a tomada de decisão quanto à melhor matéria prima e o melhor processo. Recentemente, uma nova ferramenta de análise foi desenvolvida pelo Laboratório para Desenvolvimento e Automação de Bioprocessos (LaDABio) da UFSCar, a qual permite obter os desempenhos mínimos dos principais equipamentos de um processo para que este se torne economicamente viável e para que os impactos ambientais do processo sejam minimizados. Assim, essa ferramenta permite a retroalimentação entre a simulação de processos e o trabalho experimental, indicando gargalos de processo e caminhos a serem seguidos para que o processo se viabilize. Este tema está inserido no projeto temático (2016/10636-8) “DA FÁBRICA CELULAR À BIORREFINARIA INTEGRADA BODIESEL-BIOETANOL: UMA ABORDAGEM SISTÊMICA APLICADA A PROBLEMAS COMPLEXOS EM MICRO E MACROESCALAS”.</p>
<b>PALAVRAS-CHAVE:</b> biodiesel, Análise tecno-econômica-ambiental, modelagem e simulação de processos.

**TEMA PARA DOUTORADO – 1º SEMESTRE DE 2019****ÁREA DE PESQUISA: SISTEMAS PARTICULADOS****PROFESSOR: RODRIGO BÉTTEGA****TÍTULO: ESTUDO DA SECAGEM DE PRODUTOS DA MINERAÇÃO UTILIZANDO SIMULAÇÃO NUMÉRICA CFD-DEM****RESUMO:**

O presente trabalho objetiva o estudo e desenvolvimento de um secador de leito fluidizado adaptado para a secagem de produtos da mineração. Para esse desenvolvimento, após a completa caracterização física dos materiais, testes preliminares em equipamento de leito fluidizado tradicional serão efetuados buscando maiores informações sobre o comportamento do processo. Com o auxílio da Fluidodinâmica Computacional – *CFD* (*Computational Fluid Dynamics*), adaptações serão propostas no equipamento original buscando otimizar sua geometria e alcançar as melhores condições de secagem, com foco nos fenômenos de transporte presentes no sistema e no consumo energético do equipamento. O objetivo principal deste projeto é desenvolver um leito fluidizado em escala de bancada completamente adaptado para a secagem de produtos da mineração, utilizando para tal fim testes em bancada e simulação CFD. Com o desenvolvimento do trabalho também será possível avaliar a operação nesse novo equipamento experimentalmente, com base no consumo energético e na qualidade da fluidização.

**PALAVRAS-CHAVE:** Flotação, CFD, distribuição de bolhas

**TEMA PARA DOUTORADO – 1º SEMESTRE DE 2019****ÁREA DE PESQUISA: Engenharia Bioquímica****Orientadora: Profa. Dra. Teresa Cristina Zangirolami****Co-orientadores: Prof. Dr. Adilson José da Silva; Prof. Dr. Roberto de Campos Giordano****TÍTULO DO TEMA:** Análise técnico-econômica da *E. coli* como fábrica celular para produção de biomoléculas a partir de resíduos da biorrefinaria**RESUMO**

Produtos de valor agregado tais como aminoácidos, ácidos orgânicos e outras especialidades obtidas por processos fermentativos movimentam um mercado global estimado em US\$ 22 bilhões. Dentre eles, o ácido aspártico (37,4 mil ton, 2013) e o ácido 3-hidroxiopropiônico (demanda estimada em 2015: 20 mil ton) são destacados como potenciais coprodutos em biorrefinarias. O L-aspartato é usado na produção de aspartame e de ácido poliaspártico. Como bloco construtor, pode ser convertido em diversas classes de moléculas como anidrido aspártico, 3-aminotetrahydrofurano, 2-amino-1,4-butanodiol, amino-diácidos substituídos e intermediários farmacêuticos. O ácido 3-hidroxiopropiônico (3-HP) é outro bloco construtor promissor no contexto de biorrefinarias, precursor de uma variedade de compostos como ácido acrílico, 1,3-propanodiol, acrilato de metila, propiolactona, ácido malônico, acrilamida e hidroxiamidas. Nesta proposta, o potencial de *Escherichia coli* como plataforma para obtenção de ácido aspártico e 3-HP, com concomitante consumo de resíduos da biorrefinaria (a fração hemicelulósica do bagaço de cana-de-açúcar e glicerol não refinado) será avaliado. Usando um modelo metabólico em escala genômica, o metabolismo da bactéria será explorado *in silico* utilizando o software Optflux para identificar avaliar rendimentos e produtividades teóricos em ácido aspártico e 3-HP para cada fonte de carbono principal (xilose e glicerol). Em seguida, a “biorrefinaria virtual da produção de 3-HP e de aspartato” será implementada na plataforma EMSO, incluindo a modelagem das etapas de preparação da matéria-prima, de reação e de purificação dos produtos. Os rendimentos obtidos via simulação dos modelos metabólicos modificados serão utilizados como variáveis de entrada para a simulação da planta de obtenção 3-HP ou aspartato, permitindo a solução dos balanços de massa e energia, estimativa do custo e a análise da viabilidade econômica para cada produto em função dos diferentes resíduos empregados como fonte de carbono. Experimentos em quimiostato serão realizados para estimativa de fluxos metabólicos e validação do modelo.

**PALAVRAS-CHAVE:** Biologia de Sistemas, Engenharia de Bioprocessos e Sistemas ácido 3-hidroxiopropiônico, aspartato, *E. coli*.