

TEMA PARA MESTRADO – 1º SEMESTRE DE 2021

ÁREA DE PESQUISA: Engenharia Bioquímica

PROFESSOR ORIENTADOR: Adilson José da Silva

TÍTULO: Engenharia metabólica aplicada à produção de fenazinas em *E. coli*

OBSERVAÇÃO:

RESUMO:

As fenazinas compõem uma classe de pigmentos naturais com potencial de aplicação em diversas áreas, como no desenvolvimento de fármacos, produção de biopesticidas, construção de biossensores, entre outras. Estas moléculas são naturalmente produzidas por alguns gêneros de bactérias, como *Pseudomonas* e *Streptomyces*, mas sua produção é bastante limitada pelo caráter patogênico de algumas das linhagens produtoras ou pela produção natural em baixas quantidades. Em nosso laboratório foram construídas linhagens recombinantes da bactéria *Escherichia coli* capazes de produzir fenazinas, e neste tema de mestrado estas linhagens modificadas geneticamente serão utilizadas para otimizar a produção destes compostos. Para isso, novas modificações genéticas serão implementadas e as condições de cultivo das linhagens construídas serão estudadas para maximizar a produção da fenazina-1-ácido carboxílico (PCA), que é precursora de uma série de outras fenazinas.

Para o desenvolvimento deste projeto, busca-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 otimização de processos fermentativos. Conhecimentos básicos de Biologia Molecular são desejáveis, mas não há exigência de experiência prévia na área.

Entre os conhecimentos que devem ser adquiridos durante o mestrado, estão:

- procedimentos de clonagem de genes em *E. coli*
- utilização de softwares de bioinformática
- cultivo de microrganismos em frascos agitados e biorreatores de bancada
- técnicas analíticas para quantificação de ácidos nucleicos, proteínas, carboidratos, etc.
- redação de artigos e relatórios científicos

PALAVRAS-CHAVE: fenazinas, engenharia metabólica, fábricas celulares, proteínas recombinantes, metabólitos secundários.

TEMA PARA MESTRADO – 1º SEMESTRE DE 2020

ÁREA DE PESQUISA: Reatores Químicos Heterogêneos e Catálise

PROFESSOR ORIENTADOR: Adriana Paula Ferreira Palhares

TÍTULO: Óxidos estruturados do tipo perovsqita para geração de gás de síntese via bi-reforma de metano

RESUMO:

Este tema tem como objetivo o desenvolvimento de novos catalisadores para a bi-reforma de metano e CO₂ para a produção de *syngas*. Embora esse processo remeta ao tradicional processo industrial para conversão de CH₄ em metanol via *syngas*, ele apresenta uma alternativa importante para a conversão de dióxido de carbono obtido no gás natural. O uso de gás natural de baixo custo, com baixa purificação relativa para CO₂ e H₂O pode ser uma redução significativa do preço de produção do metanol. O catalisador usado industrialmente é baseado em Ni, que depende da alta relação H₂O / (CH₄ + CO₂) da mistura reacional para evitar acúmulo de carbono, elevando o custo do processo. Portanto, o desafio será o desenvolvimento de sistemas baseados em catalisadores de Ni com alta resistência ao acúmulo de carbono, mesmo em baixas relações H₂O / (CH₄ + CO₂). Por possuírem propriedades catalíticas, estabilidade térmica e química, os óxidos com estrutura do tipo perovsqita ABO₃ serão sintetizados por diferentes métodos, tais como o método sol-gel, pelo método de co-precipitação e pelo método de combustão assistida por micro-ondas usando ureia como combustível e serão investigados na bi-reforma do metano. O objetivo deste estudo é avaliar a eficiência de óxidos do tipo perovsqita como catalisadores mássicos e como suportes catalíticos na bi-reforma, tal que se promova a alteração das propriedades eletrônicas do Ni buscando catalisadores factíveis à oxidação de espécies de CH com intermediários OH antes da formação de carbono e/ou se promova o desenvolvimento de catalisadores com alta atividade para oxidação do carbono formado.

PALAVRAS-CHAVE: Síntese; Perovsqitas; Suportes catalíticos; NiO; metano; gás carbônico; gás de síntese

TEMA PARA MESTRADO – 1º SEMESTRE DE 2020

ÁREA DE PESQUISA: Reatores Químicos Heterogêneos e Catálise

PROFESSORA: Adriana Paula Ferreira Palhares

TÍTULO: Desenvolvimento de Catalisadores Bimetálicos à base de Ferro e Níquel para a Conversão de Biogás

RESUMO: O biogás (gás rico em CH_4 e CO_2) desempenha um papel vital no setor emergente de energia renovável e sua utilização eficiente está atraindo atenção significativa como potencial de energia alternativa aos recursos de combustíveis fósseis não renováveis. Além disso, a utilização de biogás de aterros sanitários e do tratamento de águas residuárias é muito importante para um desenvolvimento sustentável e demanda avanços tecnológicos. O processo de bi-reforma do CH_4 e do CO_2 para a produção de gás de síntese ($\text{CO} + \text{H}_2$) é uma das etapas desta tecnologia, o qual representa uma alternativa importante para a conversão de CO_2 obtido no gás natural, apesar de remeter ao tradicional processo industrial para conversão de CH_4 em metanol via gás de síntese. O uso de gás natural de baixo custo, com baixa purificação relativa para CO_2 e H_2O pode ser uma redução significativa do preço de produção do metanol. O catalisador usado industrialmente na bi-reforma é baseado em Ni, que depende da alta relação $\text{H}_2\text{O} / (\text{CH}_4 + \text{CO}_2)$ na mistura reacional para evitar acúmulo de carbono, elevando o custo do processo. Catalisadores bimetálicos à base de Ferro e Níquel podem ser obtidos através de métodos de sínteses que promovam a obtenção de nanopartículas metálicas cataliticamente ativas e/ou a formação de ligas metálicas que assegurem um efeito de confinamento das nanopartículas na matriz do suporte evitando a segregação de fases metálicas e promovendo resistência à deposição de coque. Os catalisadores bimetálicos serão sintetizados por diferentes métodos, tais como o método sol-gel, pelo método de co-precipitação e pelo método de combustão assistida por micro-ondas usando ureia como combustível, serão caracterizados e investigados na bi-reforma do metano.

PALAVRAS-CHAVE: Síntese; Catalisadores bimetálicos; ferro; níquel; biogás; gás carbônico; metano; gás de síntese.

TEMA PARA MESTRADO – 1º SEMESTRE DE 2021

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 PARA MESTRADO – 1º SEMESTRE DE 2021

ÁREA DE PESQUISA: Engenharia Bioquímica

PROFESSOR ORIENTADOR: Dra. Cristiane Sanchez Farinas

OBSERVAÇÃO:

TÍTULO: Processo para obtenção de nanocelulose a partir de macroalgas

RESUMO:

A nanocelulose vem sendo considerada como um material renovável avançado e com grande potencial para vários tipos de aplicações, tais como aditivos para compósitos, reforço de polímeros e papéis, emulsões para a indústria de alimentos, na medicina como curativos entre outras. Nas últimas décadas, muitas matérias-primas diferentes têm sido utilizadas para obter a nanocelulose, como madeiras, resíduos agroindustriais, e mais recentemente, as algas marinhas. Desta forma, pretende-se investigar neste projeto de mestrado a utilização de macroalgas para produzir nanocelulose usando hidrólise enzimática combinada com tratamentos químicos e físicos. A nanocelulose obtida será comparada com dois produtos: a obtida a partir de macroalgas pelo método ácido convencional e a nanocelulose obtida de matéria-prima celulósica modelo como a polpa de eucalipto. Além disso, será realizada a caracterização das nanoceluloses, bem como sua aplicação em filmes e emulsões para a indústria de alimentos e embalagens.

PALAVRAS-CHAVE: bioprocessos; nanocelulose; hidrólise enzimática.

TEMA PARA MESTRADO – 1º SEMESTRE DE 2021

ÁREA DE PESQUISA: Controle Ambiental

PROFESSOR ORIENTADOR: Edson Luiz Silva

TÍTULO: Planejamento experimental e otimização estatística da produção de hidrogênio e metano no tratamento anaeróbio do soro de leite e melaço

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>

RESUMO: O processo de digestão anaeróbia envolve dois 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 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.

Neste projeto, serão estudados 2 substratos (soro de leite e melaço) para a produção de biogás. O efeito das principais condições de processo (pH, concentração inóculo, concentração de substrato) na cinética de produção de biogás e outros metabólitos serão avaliados num planejamento fatorial.

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: produção de hidrogênio, produção de metano, planejamento de experimentos.

TEMA PARA MESTRADO – 1º SEMESTRE DE 2021

ÁREA DE PESQUISA: Controle Ambiental

PROFESSOR ORIENTADOR: Edson Luiz Silva

TÍTULO: Planejamento Experimental e otimização estatística da produção de hidrogênio e metano no tratamento anaeróbio de resíduos lignocelulósicos

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>

RESUMO: O aumento da geração de resíduos sólidos agroindustriais tem ocorrido principalmente devido aos processos de globalização e urbanização. Esses resíduos em sua grande maioria são dispostos inapropriadamente no meio ambiente, causando poluição ambiental. Estima-se que o Brasil gere cerca de 200 milhões de toneladas de resíduos agrícolas por ano. Grande parte destes resíduos são lignocelulósicos, sendo estes os mais abundantes no Brasil e no mundo. As composições destas biomassas são distintas, porém, se constituem principalmente de lignina e carboidratos formados por celulose e hemicelulose. Fazem parte desta biomassa os resíduos florestais (madeiras, grama, folhas e capim), frações orgânicas de resíduos sólidos municipais e como restos de comida, como a mandioca, o milho, a beterraba, o café e a batata.

A digestão anaeróbia é um processo biológico complexo formado por uma série de reações bioquímicas. Este processo é dividido nas etapas de hidrólise, acidogênese, acetogênese e metanogênese. Nesta última etapa ocorre a formação de metano por meio da conversão de acetato (metanogênese acetoclástica) ou a partir do consumo de hidrogênio e de dióxido de carbono (metanogênese hidrogenotrófica). Desta forma, o processo de digestão anaeróbia pode ser interrompido na etapa de acidogênese quando se pretende produzir o hidrogênio, ácidos orgânicos e álcoois. Este processo é denominado fermentação escura. Alguns fatores influenciam os produtos metabólicos gerados na fermentação escura. Os principais fatores são o tipo de inóculo, a temperatura, o pH e o pré-tratamento dos substratos.

O efeito das principais condições de processo (pH, concentração do inóculo, concentração de substrato, tipo e concentração do hidrolisante) na cinética de produção de biogás e outros metabólitos serão avaliados num planejamento fatorial.

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: produção de hidrogênio, produção de metano, planejamento de experimentos.

TEMA MESTRADO 1 – 1º SEMESTRE DE 2021

ÁREA DE PESQUISA: Reatores Químicos Heterogêneos e Catálise

PROFESSOR: Ernesto A. Urquieta-González

TÍTULO: Zeólitas e Sólidos Mesoporosos Ordenados Aplicados na Valorização de Moléculas Plataforma de Origem Lignocelulósica

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"

RESUMO:

A necessidade cada vez mais urgente de substituir processos catalíticos homogêneos altamente contaminantes e matérias primas oriundas de fontes minerais tem levado à busca por processos mais sustentáveis, com os quais se minimizem esses impactos, assim atendendo aos princípios da química verde. Assim, processos heterogêneos aplicados à valorização de moléculas bio (valorização da biomassa), vem adquirindo importância estratégica no cenário nacional e internacional. Com esse objetivo, durante o desenvolvimento da dissertação de mestrado, serão preparados e caracterizados catalisadores à base de zeólitas, sólidos mesoporosos ordenados funcionalizados ou outros materiais com propriedades híbridas, os que serão aplicados na transformação de moléculas plataforma derivadas de lignocelulose a intermediários ou produtos de maior valor agregado. A pesquisa será realizada no Laboratório de Adsorção e Catálise Aplicada do Centro de Pesquisas em Materiais Avançados e Energia/UFSCar:

<https://www.archdaily.com/777506/laboratories-ufscar-vigliecca-and-associados>).

A pesquisa está inserida dentro de projeto desenvolvido em conjunto com o Centro de Excelência em Pesquisas de Química Sustentável (www.cersuschem.ufscar.br), financiado pela FAPESP e, também, incluído na área de abrangência do PRH 39 ANP/FINEP – Biocombustíveis e Energias Alternativas.

PALAVRAS-CHAVE: catálise heterogênea, síntese orgânica, produtos químicos bio-derivados, zeólitas, sólidos mesoporosos, química verde.

TEMA Mestrado 2 – 1º SEMESTRE DE 2021

ÁREA DE PESQUISA: Reatores Químicos Heterogêneos e Catálise

PROFESSOR: Ernesto A. Urquieta-González

TÍTULO: *Desenvolvimento de Catalisadores para Aplicação em Processos no Refino de Petróleo e na Valorização do Metano*

RESUMO:

O desenvolvimento de catalisadores altamente ativos e seletivos é estratégico no contexto da Indústria de Refino de Petróleo e no emergente interesse da indústria de petróleo na Valorização do Metano. O interesse 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 mestrado:

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

Nos respectivos estudos se realizará a preparação dos catalisadores, sua caracterização física e química e sua avaliação no processo de reação a ser escolhido. As pesquisas são realizadas utilizando a infraestrutura do Laboratório de Adsorção e Catálise Aplicada do Centro de Pesquisas em Materiais Avançados e Energia/UFSCar:

(<https://www.archdaily.com/777506/laboratories-ufscar-vigliecca-and-associados>), que recebem suporte financeiro de Projeto Temático financiado pela FAPESP ou de projetos financiados por outras agências.

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

TEMA PARA MESTRADO – 1º SEMESTRE DE 2021

ÁREA DE PESQUISA: Simulação e Controle de Processos Químicos

**PROFESSOR ORIENTADOR: Prof. Felipe Fernando Furlan
Prof. Roberto de Campos Giordano**

TÍTULO: Implementação de Ferramenta Computacional para Alocação de Métricas de Impacto Ambiental a Produtos de Biorrefinarias

RESUMO:

Esta proposta se articula ao 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. Uma das linhas de pesquisa desse Projeto visa ao desenvolvimento de novas metodologias para análise tecno-econômico-ambiental de processos inseridos em biorrefinarias, que possam ser aplicadas desde o início do desenvolvimento de novos produtos e processos. Nesse contexto se insere o presente projeto de mestrado, cujo objetivo é desenvolver um método sistemático para a contabilidade detalhada da intensidade de carbono ao longo do processo industrial em biorrefinarias. Essas indústrias, cuja espinha dorsal é a produção de bioetanol, biodiesel ou outros biocombustíveis, incluem um portfólio de outros produtos de valor econômico agregado, que também devem ter seu ciclo de vida avaliado. A nova metodologia proposta será comparada com as principais abordagens existentes para a alocação das cargas ambientais considerando diferentes bases de cálculo dos diferentes produtos no portão da indústria. É importante ressaltar que, embora a contribuição do processamento industrial no impacto ambiental seja consideravelmente inferior à do setor agrícola, é do portão da indústria que saem os produtos finais. Dessa forma, quantificar a alocação desses índices de impacto de forma racional, com base em primeiros princípios, irá facilitar o processo de tomada de decisão, o desenvolvimento de novos processos desde o berço e a correta valoração de cada produto na futura economia de baixo carbono.

PALAVRAS-CHAVE: Análise de ciclo de vida; Simulação de processos; Biorrefinarias

TEMA PARA MESTRADO – 1º SEMESTRE DE 2020

ÁREA DE PESQUISA: Engenharia Bioquímica 2

PROFESSOR ORIENTADOR: Profa. Dra. Fernanda Perpétua Casciatori

TÍTULO: Produção de celulases por *Myceliophthora thermophila* I-1D3b em resposta a diferentes fontes de carbono e taxas de aeração em cultivos sólido e submerso

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>"

RESUMO:

Nas últimas décadas, o interesse nos sistemas celulolíticos de fungos termofílicos motivou o desenvolvimento de pesquisas visando o uso de suas enzimas em vários setores industriais, como na produção de biocombustíveis, particularmente do etanol de segunda geração. Na natureza, os fungos filamentosos detectam a disponibilidade de nutrientes e ajustam seu metabolismo para utilização, crescimento e reprodução ideais. Para que possam degradar a biomassa lignocelulósica, os fungos precisam reconhecer seus componentes e então induzir a produção de enzimas, bem como o metabolismo necessário para converter em energia os polissacarídeos da parede celular vegetal. Esses polissacarídeos são grandes e portanto não entram na célula, de modo que não atuam diretamente como indutores. A hipótese principal é que os fungos reconhecem a presença de polímeros complexos por meio de compostos de baixo peso molecular, como mono ou dissacarídeos. A resposta das células fúngicas aos diferentes indutores varia com a concentração e com o tipo de indutor. O fungo termofílico *Myceliophthora thermophila* demonstrou ser um excelente produtor de celulases, ao crescer de forma otimizada a temperaturas elevadas. No entanto, há pouco conhecimento sobre as preferências e utilização de açúcares por este fungo. Compreender como a biossíntese de celulases é induzida em *M. thermophila* é fundamental para estabelecer este fungo como uma plataforma para a produção de enzimas úteis à produção de etanol de segunda geração. Neste projeto, será avaliado o efeito da concentração de quatro diferentes fontes de carbono facilmente metabolizáveis (glicose, sacarose, frutose e lactose) sobre atividades celulolíticas atingidas nos cultivos sólido e submerso do fungo *M. thermophila* sob diferentes taxas de aeração. No caso dos cultivos sólidos, a serem realizados em leito empacotado, os açúcares serão adicionados à solução nutriente e de umidificação. Nos cultivos submersos em tanque agitado, o caldo será adicionado de bagaço de cana triturado. Nas duas formas de cultivo, serão avaliadas taxas de aeração de 0,5 e 1,0 vvm. Ao final dos ensaios, será determinada a atividade de endoglucanase e o teor de proteínas solúveis do caldo fermentado ou do extrato líquido. Busca-se a fonte de carbono indutora e a taxa de aeração que maximizem a produção de celulases pelo fungo termofílico estudado.

PALAVRAS-CHAVE: bioetanol; biomassa; enzimas; bioprocessos; fungos filamentosos.

TEMA PARA MESTRADO – 1º SEMESTRE DE 2020

ÁREA DE PESQUISA: Engenharia Bioquímica 2

PROFESSOR ORIENTADOR: Profa. Dra. Fernanda Perpétua Casciatori

TÍTULO: Análise da transferência de calor e parâmetros térmicos em leite empacotado de fermentação em estado sólido

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>"*

RESUMO:

Visando ampliação de escala de processos de fermentação em estado sólido (FES), torna-se necessário o desenvolvimento e o aprimoramento de biorreatores apropriados. Destacam-se os biorreatores de leite empacotado (BLEs), que já vem sendo estudados para produção, por FES, de enzimas úteis à cadeia de processamento de biocombustíveis. No entanto, um dos principais problemas na operação desta classe de biorreatores é o superaquecimento do leite, de modo que estudos de transferência de calor nestes sistemas se fazem necessários. Neste contexto, o objetivo do presente projeto é avaliar o comportamento térmico de um leite empacotado com rejeitos sólidos agroindustriais, sem e com a ocorrência de cultivo. O estudo de caso de cultivo será o da produção de celulases por *Aspergillus niger*, fungo bastante estudado na FES. Em ambos os casos, serão avaliados, com auxílio de termopares e de um termovisor, os perfis térmicos axiais e radiais em regime transiente e permanente, buscando-se identificar as frentes de transporte de calor com e sem escoamento de água na camisa, com e sem percolação de ar saturado de umidade, e ainda na ausência e na presença de atividade metabólica (sem e com cultivo). Nas situações com escoamento de água pela camisa e com percolação de ar simultâneas, serão avaliados escoamentos em correntes paralelas e contrárias. Nos casos com percolação de ar, duas vazões serão testadas. Com base nos perfis térmicos radiais e axiais obtidos experimentalmente, serão determinados parâmetros efetivos, empregando modelos da literatura para leitos recheados, sem e com geração de calor. Como resultado do estudo, espera-se maior entendimento dos fenômenos de transferência de calor em biorreatores de FES em leite empacotado, o que é fundamental para desenvolvimento de estratégias eficientes de manutenção de condições térmicas ideais nestes sistemas.

PALAVRAS-CHAVE: biorreatores; bioprocessos; fenômenos de transporte; energia.

TEMA PARA MESTRADO – 1º SEMESTRE DE 2020

ÁREA DE PESQUISA: Sistemas Particulados

PROFESSOR ORIENTADOR: Francisco Guilherme Esteves Nogueira

TÍTULO: Desenvolvimento de Biomateriais Fotoativos para Aplicações Ambientais e Biológicas.

OBSERVAÇÃO:

RESUMO:

O desenvolvimento de tecnologias para o tratamento de águas residuárias provenientes do setor agroindustrial, tem se tornado um fator relevante, devido principalmente, a fatores ambientais e econômicos. Dentre estes setores destaca-se a agroindústria do café, a qual vem crescendo significativamente nos últimos anos, sendo o Brasil o maior produtor e exportador do produto e o segundo maior consumidor. No entanto, durante o processamento por via úmida dos grãos de café há geração de grandes volumes de águas residuárias com alto teor de compostos fenólicos, tais como: ácido cafeico, ácido clorogênico, entre outros. Estas substâncias quando descartadas de forma inadequada, podem ser tóxicas aos seres humanos e aos microrganismos. Dentro deste contexto, este projeto tem como objetivo o desenvolvimento de biomateriais para adsorção e conversão destes compostos a produtos com valor agregado. Para obtenção dos biomateriais será utilizado como precursores resíduos de biomassa lignocelulósica, nas quais serão incorporadas nanopartículas de óxido de ferro e/ou cobre visando aumentar a capacidade de adsorção e conversão desses compostos fenólicos em produtos com maior valor agregado, como o metano, o qual poderá ser utilizado para geração de energia e o monóxido de carbono. Este último, por sua vez, pode ser utilizado como gás de síntese em diversas aplicações para química fina. Além disso, os biomateriais contendo ácido cafeico serão testados com fins biológicos, uma vez que diversos estudos mostram que esse composto apresenta uma elevada atividade antioxidante e possui propriedades anticarcinogênicas, antibacteriana e antimutagênica.

PALAVRAS-CHAVE: Águas residuárias, Ácido Cafeico, Biomateriais

TEMA PARA MESTRADO – 1º SEMESTRE DE 2020

ÁREA DE PESQUISA: Controle Ambiental

PROFESSOR ORIENTADOR: Gabriela Cantarelli Lopes

TÍTULO: Implementação de abordagem alternativa para o cálculo da fração volumétrica em simulações CFD-DEM para predição do escoamento em biorreatores de leito fluidizado

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>"*

RESUMO: Biorreatores de leito fluidizado são alternativas sustentáveis e de baixo custo para a produção de biogases combustíveis e tratamento de efluentes simultaneamente. De um modo geral, o projeto desses equipamentos é feito utilizando equacionamento de base empírica, não levando em consideração aspectos locais da dinâmica do equipamento, como características mecânicas das partículas. A utilização de técnicas de acoplamento CFD-DEM não resolvido permite a predição acurada do comportamento dinâmico desses sistemas, reduzindo custos nas etapas de projeto e otimização. Todavia, a assertividade das simulações depende da abordagem utilizada para o cálculo da fração de vazios por célula. Nesse sentido, o presente projeto tem por objetivo implementar a abordagem analítica para o cálculo da fração de vazios local em um sistema líquido-sólido, e comparar o resultado com os modelos baseados no Particle Centroid Method (PCM) e modelos não-analíticos. A implementação será feita no *software* de biblioteca aberta CFDEM@coupling, o qual realiza o acoplamento entre as fases fluida (CFD) e sólida (DEM) numericamente representadas utilizando-se os pacotes OpenFOAM e LIGGGHTS®, respectivamente. As simulações serão comparadas quanto ao perfil de pressão, velocidades, continuidade, porosidade (local e global) e custo computacional. Espera-se ao final do projeto que a abordagem analítica seja implementada com sucesso no pacote CFDEM@coupling, com isso podendo ser utilizada na validação de outras metodologias baseadas no PCM ou não-analíticas, possibilitando a ampla utilização da metodologia CFD-DEM no projeto de sistemas sólido-fluido.

PALAVRAS-CHAVE: Biorreatores, Acoplamento CFD-DEM, escoamento multifásico, abordagem analítica, fluidização.

TEMA PARA MESTRADO – 1º SEMESTRE DE 2021

ÁREA DE PESQUISA: Reatores Heterogêneos e Catálise

PROF. RESPONSÁVEL: Janaina Fernandes Gomes

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

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>

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.

PALAVRAS-CHAVE: hidrogenação de CO₂, produção de etanol, cobre, estudo quimiométrico

TEMA PARA MESTRADO – 1º SEMESTRE DE 2021

ÁREA DE PESQUISA: Reatores Heterogêneos e Catálise

PROF. RESPONSÁVEL: Janaina Fernandes Gomes

TÍTULO: Influência da fonte de hidrogênio na reação de hidrogenação de CO₂ a compostos C₂₊ em catalisadores à base de metais não nobres

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>

RESUMO:

A geração de CO₂ tem se intensificado nas últimas décadas, gerando o seu acúmulo na atmosfera terrestre. Com isso, inúmeras alterações ambientais negativas, como o agravamento do efeito estufa, vêm ocorrendo por todo o planeta. Medidas mitigadoras vêm sendo adotadas em diversos países do mundo, como, por exemplo, a captura e armazenamento do CO₂. Além disso, a utilização desse gás como insumo carbonáceo para a produção de compostos químicos de alto valor agregado, como o etanol, se mostra uma alternativa promissora. Nesse sentido, a hidrogenação catalítica do CO₂ é uma tecnologia de reciclagem de carbono que vem sendo bastante explorada nos últimos anos. Nessa reação, em geral, emprega-se H₂ como fonte de hidrogênio e a aplicação de catalisadores à base de cobre só promove de forma eficiente a formação de compostos com um átomo de carbono (C₁), como CO, metano e metanol. Essas reações ocorrem em temperaturas de 200 – 300 °C e sob pressões de 2 – 7 MPa. Recentemente, no nosso grupo de pesquisa, ensaios catalíticos de hidrogenação de CO₂ em cobre, conduzidos em fase gasosa com uma fonte alternativa de hidrogênio, levaram à formação de etanol à pressão atmosférica. Entretanto, a influência da fonte de hidrogênio na reação de hidrogenação de CO₂ a compostos com dois ou mais átomos de carbono (C₂₊), como o etanol, ainda foi pouco explorada. No presente trabalho, catalisadores à base de metais não-nobres serão sintetizados, caracterizados e aplicados à hidrogenação de CO₂, visando esclarecer a influência da fonte de hidrogênio na seletividade da reação à formação de compostos C₂₊.

PALAVRAS-CHAVE: hidrogenação de CO₂, produção de etanol, cobre

TEMA PARA MESTRADO – 1º SEMESTRE DE 2020

ÁREA DE PESQUISA: Reatores Químicos Heterogêneos e Catálise

PROFESSOR ORIENTADOR: João Batista Oliveira dos Santos

TÍTULO: Conversão do glicerol a produtos de interesse industrial

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

RESUMO:

A crescente demanda energética mundial tem impulsionado a produção de fontes de energia renováveis como o biodiesel. No Brasil, é obrigatória a adição de 7% de biodiesel ao óleo diesel convencional segundo a Lei nº 13.033 de setembro de 2014. Esse e outros fatores levaram a um crescimento extraordinário na produção de biodiesel na última década. O processo de transesterificação de óleos vegetais é amplamente utilizado na produção de biodiesel e o glicerol é o principal subproduto, sendo que 10% em massa de glicerol é gerado do total de biodiesel produzido. O baixo valor de mercado do glicerol e o elevado custo de sua purificação podem onerar a produção do próprio biodiesel. Dessa forma, desenvolver processos rentáveis utilizando glicerol como matéria-prima é economicamente atrativo e essencial também para impulsionar a produção de biodiesel.

O glicerol pode ser transformado cataliticamente em produtos de alto valor agregado e com demanda no mercado industrial, tais como 1,2 e 1,3 propanodiol, acroleína e ácido acrílico [1]. A produção de 1,2 propanodiol e 1,3 propanodiol pela conversão do glicerol pode ser realizada em fase líquida ou gasosa, mas é necessário alimentar o reator com hidrogênio, o que eleva o custo do processo. Um processo alternativo e em desenvolvimento é a geração de hidrogênio no meio reacional durante a reação [2]. Para isso pode ser utilizado um solvente apropriado, como o etanol ou o metanol. Resultados recentes indicam a formação de 1,2 propanodiol durante a reação do glicerol/metanol usando Cu como catalisador. Entretanto, o processo precisa ser detalhadamente estudado com o objetivo de otimizar a conversão e seletividade ao produto desejado [3].

Portanto, o objetivo deste trabalho é estudar o processo de valorização do glicerol a 1,2 propanodiol usando catalisador de Cu e sem adicionar hidrogênio externo. O projeto consiste em uma parte experimental e em simulação do processo. A parte experimental consiste no desenvolvimento do

catalisador e na realização das reações utilizando um reator batelada. A parte de simulação consiste na análise do processo global de conversão do glicerol utilizando o simulador ASPEN PLUS. A simulação é essencial para verificar a viabilidade do processo em escala industrial.

[1] Chaminand, J.; Djakovitch, L.; Gallezot, P.; Marion, P.; Pinel, C.; Rosier, C. Glycerol Hydrogenolysis on Heterogeneous Catalysts. *Green Chem.* 2004, 6(8), 359–361.

[2] Chun Hui Zhoua,, Kai Deng, Martino Di Serio, Sa Xiao, Dong Shen Tong, Li Li, Chun Xiang Lin, Jorge Beltramini, Hao Zhang, Wei Hua Yu, Cleaner hydrothermal hydrogenolysis of glycerol to 1,2-propanediol over Cu/oxide catalysts without addition of external hydrogen, *Molecular Catalysis* 432 (2017) 274–284.

[3] Lari, G. M.; Pastore, G.; Haus, M.; Ding, Y.; Papadokostantakis, S.; Mondelli, C.; Pérez-Ramírez, J. Environmental and Economic Perspectives of a Glycerol Biorefinery. *Energy Environ. Sci.* 2018, 11(5), 1012–1029.

PALAVRAS-CHAVE: glicerol, 1,2 propanodiol, valorização.

TEMA PARA MESTRADO – 2021

ÁREA DE PESQUISA: Reatores e Catálise

PROFESSOR: José Mansur Assaf

TÍTULO: Catalisadores para combustão catalítica do metano

RESUMO:

O metano, que é um subproduto formado em vários processos industriais, é o principal hidrocarboneto **poluente do ar** vindo, também de veículos e plantas de energia abastecidos com gás natural. Este poluente causa **um efeito estufa prejudicial muito maior que o gás carbônico**. A natureza inerte do metano impede a sua fácil destruição homogênea oxidativa a baixas temperaturas (abaixo de 600°C), porém, a eficácia da combustão do metano pode ser aumentada enormemente na presença de um catalisador.

A alta temperatura de queima operacional não catalisada favorece termodinamicamente a formação de óxidos de nitrogênio (NOx) resultantes do nitrogênio e oxigênio presentes no ar. A emissão de NOx afeta a saúde humana e ecossistemas terrestres e aquáticos. Para aliviar tais emissões, nos últimos anos as empresas, principalmente no exterior, foram levadas a reforçar a utilização de combustão catalítica em plantas de energia, caldeiras industriais e fornos.

Nos últimos anos, a combustão catalisada do metano e outros hidrocarbonetos leves tem sido o assunto de numerosos estudos. O objetivo desta proposta é encontrar materiais adequados que permitam que a reação ocorra a baixa temperatura, visando economia de energia e evitando a formação de NOx e que sejam resistentes à atmosfera corrosiva proporcionada por certos produtos da combustão.

PALAVRAS-CHAVE: catalisadores óxidos, oxidação, combustão

TEMA PARA MESTRADO – 2021

ÁREA DE PESQUISA: Reatores e Catálise

PROFESSOR: José Mansur Assaf

TÍTULO DO TEMA: Desenvolvimento de catalisadores heterogêneos e de equipamento para produção de biodiesel em sistema contínuo.

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 no link: <https://www.deq.ufscar.br/pt-br/prh-anp/prh-anp-1>

RESUMO:

O crescente interesse pela produção de combustíveis provenientes de matérias-primas renováveis tem incentivado estudos que propiciem a geração de uma tecnologia nacional neste campo. Entre este, pode-se destacar o biodiesel, que é produzido através da reação entre um óleo vegetal (ou uma gordura animal) com álcoois (como metanol ou etanol). No entanto, por si só, esta reação é muito lenta e precisa ser acelerada através da adição de catalisadores. Estes catalisadores podem ser ácidos ou básicos e o processo pode ser homogêneo (reagentes e catalisador na mesma fase, geralmente líquida) ou heterogêneo (reagentes e produtos na fase líquida e catalisador na fase sólida). Enquanto o processo homogêneo já é aplicado industrialmente, o heterogêneo, que pode apresentar várias vantagens (facilidade de manutenção dos equipamentos, reaproveitamento dos catalisadores, pureza dos produtos, operação contínua dos reatores), está em desenvolvimento nos laboratórios de indústrias e universidades.

Neste projeto, pretende-se:

1 - Desenvolver catalisadores sólidos com caráter básico para aplicação em processos heterogêneos de produção de biodiesel pelas rotas etílica e metílica, capazes de operar em condições brandas de temperatura e tempos curtos.

2 - Aprimorar e utilizar um sistema para a produção contínua de biodiesel utilizando reator rotativo e aquecimento por micro-ondas.

O trabalho consistirá de preparação, caracterização (medidas de áreas superficial – método BET, de composição química por absorção atômica, da estrutura cristalina por difração de raios-x, microscopia eletrônica, basicidade por TPD de CO₂ etc.) e testes em reações com moléculas-modelo e óleo vegetal.

PALAVRAS-CHAVE: biodiesel, catálise básica, reator rotativo

TEMA PARA MESTRADO – 1º SEMESTRE DE 2021

ÁREA DE PESQUISA: Sistemas Particulados

PROFESSOR: Luís A. M. Ruotolo

TÍTULO: Tratamento de efluentes industriais contendo compostos orgânicos poluentes utilizando tecnologia eletroquímica

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 fotocatalítica de radicais oxidantes. A tecnologia eletroquímica surgiu como uma alternativa ambientalmente compatível 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 processo a ser estudado neste projeto se baseará na utilização de um eletrodo tridimensional de PbO_2 para a geração de radicais oxidantes *in situ* utilizando-se reator eletroquímico de fluxo. O eletrodo de PbO_2 será preparado eletroquimicamente na forma de filmes finos sobre substratos tridimensionais.

Os resultados da eletroxidação serão comparados com o eletrodo comercial de diamante dopado com boro, o qual apresenta os melhores resultados de cinética e eficiência de degradação entre os materiais existentes. Resultados preliminares mostraram que o eletrodo tridimensional pode se igualar à performance do eletrodo de diamante, mas com a vantagem de ter um custo muito inferior. No entanto, alguns obstáculos ainda devem ser superados, como o desenvolvimento de um substrato adequado e a otimização dos parâmetros eletroquímicos e de transferência de massa.

Ao final do projeto, pretende-se então aplicar o eletrodo e o processo de eletroxidação para o tratamento de um efluente real contendo compostos fenólicos.

Mais informações sobre a linha de pesquisa podem ser obtidas no site do Latea (www.latea.deq.ufscar.br) ou pelo e-mail pluis@ufscar.br.

PALAVRAS-CHAVE: tratamento de efluentes, eletrocatalise, reatores eletroquímicos

TEMA PARA MESTRADO – 1º SEMESTRE DE 2021

ÁREA DE PESQUISA: SISTEMAS PARTICULADOS

PROFESSORA: Maria do Carmo Ferreira

PROCESSAMENTO DE FOLHAS MEDICINAIS: AVALIAÇÃO DE MÉTODOS DE SECAGEM HÍBRIDOS

RESUMO

O Brasil possui biomas ricos em espécies vegetais com propriedades bactericidas, antifúngicas e antioxidantes ainda pouco exploradas comercialmente, mas que constituem fontes potenciais de matéria-prima para diferentes setores industriais nas áreas farmacêutica, de cosméticos e alimentícia. A redução dos níveis de umidade das folhas é uma etapa essencial do processamento pós colheita para viabilizar a sua utilização nas cadeias produtivas industriais. Diferentes métodos de desidratação podem ser utilizados dependendo da natureza do material, mas em geral a remoção da umidade é uma operação de alto consumo energético e que pode provocar a degradação dos constituintes de interesse. O uso de métodos híbridos de secagem, combinando diferentes modos de aquecimento (como por exemplo, convecção e micro-ondas ou convecção e aquecimento por infravermelho), é uma alternativa promissora para preservar os constituintes bioativos e reduzir o consumo energético no processamento de folhas medicinais.

Essa proposta de mestrado visa avaliar processos de secagem híbridos para a desidratação de folhas medicinais provenientes do bioma do cerrado. O trabalho envolve a seleção das espécies a serem estudadas, sua caracterização, realização de ensaios experimentais de secagem em diferentes condições, obtenção de extratos e avaliação do teor de compostos bioativos presentes nos mesmos. Com isso pretende-se identificar configurações de secagem que permitam otimizar a qualidade dos extratos finais e a eficiência térmica do processo para as espécies investigadas.

PALAVRAS-CHAVE: compostos bioativos, eficiência térmica, cinética de secagem, atividade antioxidante.

TEMA PARA MESTRADO – 1º SEMESTRE DE 2021

ÁREA DE PESQUISA: CONTROLE AMBIENTAL

PROFESSOR ORIENTADOR: MÔNICA LOPES AGUIAR

**TÍTULO: FILTRAÇÃO DE MATERIAL PARTICULADO PM1 (<1 µM)
EM FILTROS HÍBRIDOS.**

OBSERVAÇÃO: Co-orientação: Vádila Giovana Guerra Béttega

RESUMO:

O consumo crescente dos seres humanos e a expansão dos centros urbanos são grandes responsáveis pelo aumento da poluição do ar. Essa poluição tende a prejudicar a qualidade de vida dos seres vivos, sendo nociva à saúde dos mesmos. Uma alternativa promissora para controle da poluição atmosférica por parte das indústrias é a substituição de equipamentos convencionais, tais como precipitadores eletrostáticos e filtros de mangas, por filtros híbridos, que combinam os fenômenos de precipitação eletrostática e filtração em tecido. Estes filtros híbridos podem aumentar a eficiência de coleta para nanopartículas, aumentar o tempo de vida útil das mangas e reduzir o consumo energético durante a operação de filtração. A filtração híbrida tem sido estudada nas três últimas décadas e bons resultados têm sido reportados, com relação à eficiência de filtração de material particulado fino, à possibilidade de controle da emissão de metais pesados, à operação a baixas quedas de pressão e altas velocidades de filtração. Entretanto, ainda existem lacunas a serem investigadas, principalmente quanto a performance destes filtros na filtração de nanopartículas. Tais partículas são extremamente perigosas para a saúde humana, pois, uma vez inaladas, penetram profundamente no corpo humano, podendo causar uma série de doenças graves, como: doenças respiratórias, cardíacas, derrames, cânceres e diminuição de funções cognitivas em crianças e adultos. Existem várias combinações de filtros híbridos compostos pela união de precipitadores eletrostáticos e filtros de manga, as mais investigadas são: filtro energizado eletricamente, filtro eletrostático híbrido e precipitador eletrostático híbrido. A maioria dos sistemas híbridos estudados foram projetados para a remoção de partículas dos gases de combustão em usinas a carvão e a utilização desses sistemas em outras indústrias é bastante promissora. Dessa forma, este trabalho tem como objetivo avaliar a filtração de nanopartículas em equipamento híbrido, composto por precipitador eletrostático e filtro tecido em série, para o material particulado com diferentes características, tais como dos processos de sinterização ou da aciaria de uma indústria siderúrgica.

PALAVRAS-CHAVE: Filtros híbridos, filtros de manga, precipitador eletrostático, nanopartículas, controle de poluição do ar.

TEMA PARA MESTRADO – 1º SEMESTRE DE 2021

ÁREA DE PESQUISA: Engenharia Bioquímica

PROFESSORES: Paulo Waldir Tardioli

TÍTULO: Síntese enzimática de triglicerídeos estruturados com propriedades nutracêuticas

RESUMO: As características nutricionais e funcionais dos óleos e gorduras dependem de suas composições em ácidos graxos saturados e insaturados, do comprimento das cadeias dos ácidos graxos, assim como da distribuição destes na cadeia dos triglicerídeos (TAGs). TAGs compostos por ácidos graxos de cadeia média nas posições *sn*-1 e *sn*-3 possuem algumas vantagens em relação àqueles contendo ácidos graxos de cadeia longa, tais como, maior velocidade de hidrólise do TAG pela lipase pancreática, menor valor calórico (prevenindo a obesidade), melhoria do sistema imunológico, diminuição do risco de câncer e dos níveis de colesterol. Alguns exemplos de ácidos graxos de cadeia média são o capríco, caprílico e cáprico, os quais não se depositam no tecido adiposo e são metabolizados diretamente no fígado. Além disso, ácidos graxos poli-insaturados, tais como, ácidos α -linolênico, eicosapentaenoico e docosahexaenoico (ácidos graxos essenciais do tipo ômega-3) possuem vários benefícios à saúde humana, como por exemplo a redução de riscos de doenças cardiovasculares. Portanto, TAGs estruturados com ácidos graxos de cadeia média nas posições *sn*-1 e *sn*-3 do glicerol e ácidos graxos de cadeia longa na posição *sn*-2, ou seja, TAGs do tipo MLM, apresentam características extremamente benéficas para o bom desenvolvimento e manutenção da saúde. Neste contexto, o objetivo deste trabalho é a síntese enzimática controlada de TAGs do tipo MLM por esterificação do glicerol com ácido caprílico (C8:0, naturalmente presente no óleo de coco, óleo de palma e no leite materno) catalisada por lipases estritamente 1,3-específicas, e com ácido docosahexaenoico (DHA, naturalmente presente em frutos do mar e peixes de água fria), catalisada por lipases 2-específicas ou não-específicas.

PALAVRAS-CHAVE: TAGs nutracêuticos; ácido octanóico; ácido docosahexaenoico; lipases.

TEMA PARA MESTRADO – 1º SEMESTRE DE 2021

ÁREA DE PESQUISA: Engenharia Bioquímica

PROFESSORES: Paulo Waldir Tardioli

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 (ésteres etílicos de ácidos graxos, EEAGs) e triacetina (trietil glicerol) por interesterificação enzimática de óleos vegetais com acetato de etila usando como catalisador a formulação líquida de lipase Eversa® Transform da Novozymes. Dessa forma, glicerol não será gerado e, portanto, a planta não necessitará de investimentos para a separação e purificação do coproduto. Para atender ao objetivo do trabalho, serão avaliadas diferentes concentrações do catalisador no meio reacional, 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.

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

TEMA PARA MESTRADO – 1º SEMESTRE DE 2021

ÁREA DE PESQUISA: Engenharia Bioquímica

PROFESSORES: Paulo Waldir Tardioli

TÍTULO: Síntese de surfactantes não-iônicos por transesterificação enzimática de óleos ricos em ácidos ômega 3 com xilose

RESUMO: Surfactantes são compostos orgânicos anfifílicos amplamente utilizados em vários seguintes industriais, devido as suas propriedades de detergência, emulsificação, estabilização de dispersão e formação de espuma. Existem diferentes tipos de surfactantes, tais como, aniônicos, catiônicos, não-iônicos e anfotéricos, dependendo do tipo de grupo polar presente na molécula. Há uma crescente demanda por surfactantes para aplicações nos setores de *home-care*, *personal-care* e agroquímicos. Por exemplo, o mercado mundial de surfactantes em 2019 foi de 39,9 bilhões de dólares, com projeção para 52,4 bilhões de dólares em 2025, sendo o segmento dos não-iônicos o que tem expectativa de maior crescimento nesse período, tanto em volume como em valor. Isso deve-se ao fato desses surfactantes não serem carregados e serem compatíveis com moléculas carregadas, além de terem baixa formação de espuma e melhor propriedade de emulsificação em relação aos outros surfactantes¹. Surfactantes não-iônicos podem ser sintetizados pela rota enzimática, por exemplo, por meio de uma reação de transesterificação de triglicerídeos com carboidratos (glicose, frutose, xilose, sacarose, lactose, etc.), formando os chamados ésteres graxos de açúcares. Neste contexto, a proposta deste trabalho é a síntese enzimática de ésteres graxos de açúcares a partir de óleos vegetais ricos em ácidos graxos ômega 3 e 6 (óleo de linhaça, por exemplo) e xilose (grupo polar), catalisada por lipases (livres e/ou imobilizadas) em reator de micro-ondas. A grande limitação dessa rota é a baixa velocidade de reação e a baixa solubilidade de carboidratos em solventes orgânicos, portanto, o aquecimento assistido pelas micro-ondas poderá ter um efeito positivo no aumento da taxa de reação e na solubilidade da xilose em solventes orgânicos compatíveis com a aplicação da molécula-alvo nos setores de alimentos, fármacos e cosméticos.

¹Surfactants Market by Type, Application, and Region - Global Forecast to 2025, Research and Markets, disponível em <https://www.globenewswire.com/news-release/2020/06/30/2055407/0/en/Surfactants-Market-by-Type-Application-and-Region-Global-Forecast-to-2025.html>, acesso em 16/12/2020.

PALAVRAS-CHAVE: Surfactante não-iônico; xilose; transesterificação; Reator de Micro-ondas.

TEMA PARA MESTRADO – 1º SEMESTRE DE 2021

ÁREA DE PESQUISA: Engenharia Bioquímica / Sistemas particulados

PROFESSOR: Raquel de Lima Camargo Giordano / Thiago Faggion de Pádua

TÍTULO: Purificação de β -xilosidase recombinante produzida em *E. coli* para aplicação em hidrólise de xilana.

RESUMO: A xilana é o principal componente da fração hemicelulósica de tecidos vegetais. Porém, para que possa ser usada como matéria-prima em bioprocessos, uma etapa de hidrólise é necessária para liberar os açúcares que a compõem, principalmente xilose. A principal aplicação da xilana ainda em desenvolvimento e com grande potencial de impacto econômico é a obtenção de etanol de segunda geração, mas outros produtos de alto valor agregado também poderiam ser obtidos, como o xilitol. A hidrólise da xilana em xilose depende de um coquetel de enzimas, dentre as quais a β -xilosidase é componente fundamental e responsável pela etapa final de hidrólise de xilooligômeros menores em xilose. No entanto, os custos e complexidade do processo de produção e purificação desta enzima ainda dificultam sua aplicação em larga escala. Notando a deficiência de coquetéis comerciais de β -xilosidases, foi desenvolvida cepa de *Escherichia coli* recombinante com gene de β -xilosidase de *Bacillus subtilis*, a qual produz eficientemente β -xilosidase em elevadas concentrações. A proteína recombinante produzida possui cauda de histidinas, que permite a purificação pelo uso da cromatografia de afinidade por íons metálicos imobilizados, mas possui baixa estabilidade. Neste contexto, o objetivo do presente tema de mestrado é definir em detalhes as condições operacionais de um protocolo de purificação da β -xilosidase recombinante, tendo em vista aspectos econômicos e técnicos. Diferentes materiais cromatográficos e condições de eluição serão testados. O trabalho será desenvolvido com foco tanto em escala laboratorial para aplicações em pesquisa, como na escala industrial, sempre tendo em vista a baixa estabilidade da enzima. A separação com partículas magnéticas também será avaliada como alternativa, esses materiais inovadores podem contribuir para maior recuperação de atividade e são destaque na literatura recente como alternativa eficiente para separação cromatográfica.

PALAVRAS-CHAVE: Cromatografia de afinidade, β -xilosidase, purificação

ÁREA DE PESQUISA: SISTEMAS PARTICULADOS

PROFESSOR: RODRIGO BÉTTEGA
COORDENADOR: THIAGO FAGGION DE PÁDUA

TÍTULO: SECAGEM DE PRODUTOS DE MINERAÇÃO EM LEITO FLUIDIZADO UTILIZANDO CFD

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 nas etapas de peletização e transporte. Novas tecnologias de beneficiamento vêm buscando desenvolver equipamentos para a secagem do minério em condições de contato direto do material com ar aquecido. 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 atualmente englobam estudos experimentais de caracterização e cinética, testes laboratoriais em unidades de bancada, construção de equipamentos de maior escala e simulação CFD de equipamentos em via de implantação na área da mineração. O trabalho de mestrado proposto está inserido nesse contexto, com o enfoque principal na caracterização física e química, bem como obtenção de cinética de secagem para o minério de manganês em secador de bancada. O objetivo principal do trabalho é a obtenção de cinéticas de secagem em leito fluidizado de bancada, mapeando-se o efeito de diferentes condições de operação no processo de secagem. A partir da análise dos resultados, será possível determinar o coeficiente de transferência de massa em função das condições operacionais para o material analisado. Com a determinação do coeficiente de secagem e sua dependência de parâmetros do processo, serão realizadas simulação computacionais utilizando CFD (*software Ansys Fluent*) buscando representar o comportamento da secagem no equipamento.

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

e-mail para contato: bettega@ufscar.br

ÁREA DE PESQUISA: SISTEMAS PARTICULADOS

ORIENTADOR: RODRIGO BÉTTEGA
COORIENTADOR: VÁDILA GIOVANA GUERRA BÉTTEGA

TÍTULO: EFEITO DA UMIDADE DO MATERIAL PARTICULADO NA EFICIÊNCIA DE SEPARAÇÃO EM CICLONE

RESUMO: Em alguns processos industriais a etapa de moagem é realizada a úmido e posteriormente ocorre a secagem do material cominuído, a fim de que ele seja transportado. O material transportado geralmente é constituído por partículas de diferentes composições que compreendem o material de interesse, impurezas e umidade. Considerando as impurezas, quanto menor a sua concentração, mais interessante o produto final se torna comercialmente. Diante desse contexto, o estudo de operações de secagem e separação que visem a concentração do material particulado de interesse são muito importantes do ponto de visto econômico. Os ciclones são equipamentos empregados na separação de suspensões sólido-gás através da coleta de partículas em campo centrífugo. Apesar de ser considerado um equipamento de simples construção, apresenta vários parâmetros geométricos e variáveis operacionais que influenciam diretamente o seu desempenho de coleta de partículas. A dinâmica do processo de separação e a influência da umidade no ciclone ainda é pouco compreendida, apesar de existir grande interesse na comunidade científica nos estudos do processo de separação neste equipamento. Assim, o presente trabalho propõe um estudo experimental e de simulação numérica em que se busca avaliar o desempenho de separadores ciclônicos na separação de misturas de partículas e a influência da umidade. Para tal fim é proposto o estudo de alterações nas características geométricas do ciclone e condições operacionais utilizando experimentação e simulação CFD.

PALAVRAS-CHAVE: ciclone, umidade, separação, CFD

e-mail para contato: bettega@ufscar.br

ÁREA DE PESQUISA: SISTEMAS PARTICULADOS

PROFESSOR: RODRIGO BÉTTEGA

TÍTULO: MÉTODO DOS ELEMENTOS DISCRETOS (DEM) APLICADO À PREVISÃO DA VAZÃO DE MÍNIMA FLUIDIZAÇÃO EM LEITOS FLUIDIZADOS

RESUMO: A utilização de técnicas computacionais para a descrição dos fenômenos de transporte em leito de jorro tem se tornado cada vez mais presente no estudo de aplicações de leitos móveis como por exemplo: leitos de jorro, fluidizados, transportadores pneumáticos, dentre outros. A Fluidodinâmica Computacional (*CFD – Computational Fluid Dynamics*) possui como uma das vantagens principais permitir a obtenção de informações sobre os fenômenos de transferência para equipamentos de diferentes características geométricas e operando em diferentes condições sem a necessidade de construção de diversas unidades laboratoriais. Diversos trabalhos da literatura vêm demonstrando que a simulação a partir de técnicas CFD-DEM pode promover melhores resultados de circulação dos sólidos e da interação entre os mesmos, quando comparada à abordagem Euleriana-Euleriana, extensivamente aplicada para leitos fluidizados. Neste trabalho é proposto um estudo avaliando a aplicação da simulação em elementos discretos (DEM) ao leito fluidizado para a previsão da vazão de mínima fluidização e a comparação com resultados previamente simulados utilizando a abordagem Euleriana-Euleriana. Os resultados obtidos por DEM serão também comparados com dados experimentais obtidos no Centro de Secagem do DEQ-UFSCar. Para tal fim, serão utilizados o pacote comercial ANSYS FLUENT, bem como códigos *open-source* para simulações DEM. A partir deste trabalho será possível indicar a viabilidade da aplicação da CFD-DEM e sua representatividade para diferentes condições de operação, bem como as vantagens e desvantagens frente à abordagem Euleriana-Euleriana.

PALAVRAS-CHAVE: CFD, DEM, leito fluidizado

e-mail para contato: bettega@ufscar.br

TEMA PARA MESTRADO – 1º SEMESTRE DE 2021

ÁREA DE PESQUISA: Simulação e Controle de Processos Químicos

PROFESSOR ORIENTADOR: Ruy de Sousa Júnior

TÍTULO: Modelagem Cinética Aplicada ao Estudo de Células a Combustível a Glicerol

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>"*

RESUMO: Células a combustível se apresentam como opções de dispositivos de conversão de energia limpos e silenciosos. Em particular, a célula a combustível de membrana trocadora de prótons (do inglês, PEMFC) é atualmente um dos mais promissores destes dispositivos. Embora uma PEMFC trabalhando com hidrogênio no ânodo e oxigênio no cátodo apresente boa eficiência, o hidrogênio pode não ser a melhor escolha como combustível. O uso de combustíveis líquidos tais como etanol, metanol e polióis, por outro lado, pode ser vantajoso. Novas tecnologias de células a combustível estão em desenvolvimento, as quais podem ser convenientes para o uso de tais compostos como combustível. A célula a combustível alcalina de membrana sólida, por exemplo, é uma hibridização de uma célula a combustível de eletrólito polimérico sólido com uma célula a combustível alcalina. Glicerol e etileno glicol são menos tóxicos do que o metanol. A oxidação direta de glicerol em uma célula a combustível pode não só conduzir à produção de energia elétrica, mas também à formação de produtos que normalmente são difíceis e/ou caros para produzir por meio de outros processos. Todavia, o desempenho elétrico destas células a combustível tem de ser melhorado. Este desempenho depende não só da atividade catalítica dos catalisadores, mas também de parâmetros operacionais da célula a combustível. Dentro deste contexto, a modelagem matemática é uma ferramenta importante para o estudo e desenvolvimento de células a combustível. Assim, este trabalho visa modelar a cinética de oxidação do glicerol em células a combustível a glicerol direto por meio de modelos fenomenológicos. Os modelos serão ajustados a dados experimentais já disponíveis para validação e determinação de seus parâmetros (constantes de velocidades de reação). Os ajustes dos parâmetros serão feitos pela minimização da soma dos erros ao quadrado (SSE), entre densidade de corrente real e experimental da célula a combustível. Para isto será utilizada a função fmincon do software MATLAB. Essa função admite como argumentos a função a ser minimizada, nesse caso a SSE, e restrições de igualdade não-lineares, representadas pelos balanços das espécies adsorvidas na superfície do catalisador anódico (em regime permanente). Por fim, estimar-se-á o erro padrão dos parâmetros dos modelos.

PALAVRAS-CHAVE: modelagem matemática; cinética; célula a combustível

TEMA PARA MESTRADO – 1º SEMESTRE DE 2020

ÁREA DE PESQUISA: Engenharia Bioquímica

PROFESSOR ORIENTADOR: Teresa Cristina Zangirolami

TÍTULO: Desenvolvimento de Processo Integrado para a Produção de Etanol 1G/2G a partir de levedura nativa

OBSERVAÇÃO:

RESUMO:

A viabilidade da produção de etanol 2G depende do aproveitamento integral dos açúcares presentes na biomassa vegetal. Nesse contexto, a incapacidade de leveduras *S. cerevisiae* nativas em assimilar xilose pode ser contornada com a utilização da enzima xilose isomerase (XI), que isomeriza a xilose à xilulose, fermentada por *S. cerevisiae*. O presente tema se insere em patente depositada junto ao INPI (BR 10 2019 025506 4, dezembro de 2019) e tem como objetivo desenvolver um processo de produção de etanol 2G compatível com as condições industriais empregadas nas usinas e integrado à produção do etanol 1G. Experimentos preliminares serão realizados em frascos agitados utilizando enzima XI comercial condicionada e levedura de panificação liofilizada em alta carga. Hidrolisado de hemicelulose obtido a partir de bagaço de cana de açúcar bruto será suplementado com diferentes concentrações de melaço para avaliar a cinética de co-fermentação dos açúcares. Definida a composição inicial do meio que acelere o consumo de xilose/xilulose, novos experimentos com suplementação adicional de melaço para obtenção de altas concentrações de etanol serão conduzidos em batelada repetida, utilizando frascos agitados, com reciclo de células e enzima. A utilização de outros hidrolisados (palha de cana de açúcar, bagaço de malte) poderá ser incorporada ao estudo. A estratégia será validada em reator de bancada. O acompanhamento dos experimentos exigirá a aplicação de diversas metodologias analíticas tais como cromatografia líquida de alto desempenho (para determinação da concentração de açúcares, etanol e outros metabólitos); medida de atividade de XI; medida de viabilidade celular; leitura de densidade ótica e método da massa seca (para acompanhamento do crescimento celular), dentre outras.

PALAVRAS-CHAVE: xilose isomerase; *S. cerevisiae*; hidrolisado de hemicelulose

TEMA PARA MESTRADO – 1º SEMESTRE DE 2020

ÁREA DE PESQUISA: Engenharia Bioquímica

PROFESSOR ORIENTADOR: Teresa Cristina Zangirolami

TÍTULO: Influência das condições de cultivo na produção de enzimas hidrolíticas por levedura recombinante desenvolvida para Bioprocessamento Consolidado

OBSERVAÇÃO:

RESUMO:

O Bioprocessamento Consolidado (CBP) é a nova fronteira nas pesquisas voltadas ao aproveitamento da biomassa vegetal. No CBP, as quatro transformações envolvidas na produção do bioetanol ou outros compostos (produção de enzimas, sacarificação, assimilação de hexoses e de pentoses) resultam da ação de um único organismo (ou consórcio de microrganismos). Estudos preliminares realizados com levedura *S. cerevisiae* recombinante capaz de fermentar xilose e secretar 7 enzimas hidrolíticas (gentilmente cedida pelo Prof. Dr. Johan Thevelein, NovelYeast, Bélgica) demonstraram que a produção de enzimas é a etapa limitante do processo. Desta forma, o presente tema tem como objetivos avaliar a influência das condições de cultivo na produção de enzimas e identificar a melhor estratégia para intensificar a mesma. Serão conduzidos experimentos preliminares em mini-reatores e/ou frascos agitados para estudar a influência da temperatura e da fonte de carbono na velocidade específica de crescimento e nas atividades das enzimas secretadas, em condições aeróbias e anaeróbias. A partir dos resultados obtidos nos experimentos preliminares, serão identificadas estratégias para intensificar a produção das enzimas, as quais serão validadas em cultivo em reator tipo tanque agitado. O acompanhamento dos experimentos exigirá a aplicação de diversas metodologias analíticas tais como cromatografia líquida de alto desempenho (para determinação da concentração de açúcares, etanol e outros metabólitos); medidas de atividades enzimáticas (endoglucanase, β -glicosidade, celobiohidrolases, xilanase, β -xilosidase e acetil-xilano esterase); medida de viabilidade celular; leitura de densidade ótica e método da massa seca (para acompanhamento do crescimento celular), dentre outras.

PALAVRAS-CHAVE: Bioprocessamento Consolidado; *S. cerevisiae* recombinante

TEMA PARA MESTRADO – 1º SEMESTRE DE 2020

ÁREA DE PESQUISA: Engenharia Bioquímica

PROFESSOR ORIENTADOR: Teresa Cristina Zangirolami

TÍTULO: Intensificação do Processo Integrado de produção de etanol 1G/2G por controle da microaeração

OBSERVAÇÃO:

RESUMO:

O Bioprocessamento Consolidado (CBP) é a nova fronteira nas pesquisas voltadas ao aproveitamento da biomassa vegetal. No CBP, as quatro transformações envolvidas na produção do bioetanol ou outros compostos (produção de enzimas, sacarificação, assimilação de hexoses e de pentoses) resultam da ação de um único organismo (ou consórcio de microrganismos). Estudos preliminares realizados com levedura *S. cerevisiae* recombinante capaz de fermentar xilose e secretar 7 enzimas hidrolíticas (gentilmente cedida pelo Prof. Dr. Johan Thevelein, NovelYeast, Bélgica) demonstraram que a produção de enzimas é a etapa limitante do processo. Desta forma, o presente tema tem como objetivos avaliar a influência da microaeração na produção de enzimas e na intensificação da fermentação. Os experimentos serão conduzidos em reator tipo tanque agitado utilizando tanto meio definido como meio formulado a partir de hidrolisados e celulignina. Diferentes estratégias de microaeração serão avaliadas, incluindo desde as mais simples (vazão constante de ar) até as mais complexas (controle de fornecimento de oxigênio baseado em redes neurais desenvolvido em estudo anterior). O acompanhamento dos experimentos exigirá a aplicação de diversas metodologias analíticas tais como cromatografia líquida de alto desempenho (para determinação da concentração de açúcares, etanol e outros metabólitos); medidas de atividades enzimáticas (endoglucanase, β -glicosidade, celobiohidrolases, xilanase, β -xilosidase e acetil-xilano esterase); medida de viabilidade celular; leitura de densidade ótica e método da massa seca (para acompanhamento do crescimento celular), dentre outras.

PALAVRAS-CHAVE: *S. cerevisiae* recombinante, etanol 2G, biomassa lignocelulósica