TEMAS DE DOUTORADO

EDITAL Nº 03/2022

DOCENTE ORIENTADOR: Alberto Colli Badino Junior

TÍTULO: Avaliação da produção de ácido glucônico em biorreatores pneumáticos utilizando "whole-cells" como biocatalisadores

O ácido glucônico (AG) é composto obtido a partir da oxidação da glicose e amplamente utilizado nas indústrias química, farmacêutica, alimentícia e de construção.

É produzido industrialmente a partir de cultivos aeróbios utilizando-se o fungo Aspergillus niger. Tal processo requer meios de cultura complexos para atender o crescimento celular, apresenta riscos de contaminação e a necessidade de diferentes etapas de recuperação do produto. Uma outra forma de se produzir AG é a partir de processos enzimáticos que, no entanto, apresentam custo elevado devido ao alto preço das enzimas comerciais, inviabilizando a produção em larga escala.

Alternativamente aos processos anteriores, propõe-se a utilização de "whole-cells" ou "células em condições de não crescimento" na produção de AG, que se apresentam como biocatalisadores robustos, de baixo custo e reutilizáveis. No caso da produção de AG, seleciona-se "whole-cells" de microrganismos selvagens não patogênicos que possuam as enzimas constitutivas glicose oxidase (GOD) e catalase (CAT), responsáveis por catalisar a oxidação de glicose a AG.

Nesse tema de doutorado pretende-se avaliar a produção de AG em biorreatores pneumáticos (coluna de bolhas e airlift) a partir de diferentes matérias primas como fontes potenciais de glicose utilizando e "whole cells" como catalisadores. Propõe-se uma abordagem de processo, onde serão avaliadas a demanda e a transferência de oxigênio, a identificação das etapas controladoras e o modo de operação do biorreator, visando otimizar condições de operação de forma a maximizar a produção de AG.

Palavras-chaves: ácido glucônico; "whole-cells"; transferência de oxigênio, biorreator coluna de bolhas, biorreator airlift.

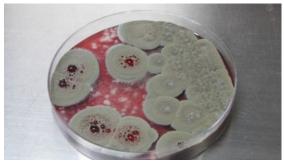
DOCENTE ORIENTADOR: Alberto Colli Badino Junior

TÍTULO: Estudo do bioprocesso integrado de produção e recuperação de colorante vermelho produzido por *Talaromyces sp.*

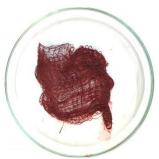
RESUMO:

Os colorantes podem ser utilizados nos mais diversos segmentos da indústria moderna, principalmente nos de cosméticos, alimentícios e farmacêutico, visando dar uma melhor aparência ao produto final. Para essa finalidade, há a necessidade que os corantes e pigmentos utilizados não sejam tóxicos ao ser humano. Os corantes sintéticos, apesar de serem baratos, não são ideais para essa finalidade, devido ao fato de estarem associados a problemas ambientais e de saúde. Sendo assim, os corantes de origem natural são os mais indicados para serem utilizados. Os pigmentos naturais são aqueles de origem animal, vegetal ou microbiana, sendo que um exemplo de corante natural vermelho é a Cochonilha, extraída de um inseto (*Dactylopius coccus*), sendo que para a produção 450 g de Cochonilha necessita-se de cerca de 70.000 insetos.

Uma maneira eficiente de produção de pigmentos é a utilização de microrganismos produtores, sendo que os fungos apresentam grande destaque, podendo-se citar as espécies de *Aspergillus, Penicillium, Paecilomyces* e *Monascus*. Em 2014, num trabalho de doutorado (PPG-Biotec/UFSCar) foi isolado um fungo endofítico (*Talaromyces sp.*) que se mostrou promissor para a produção de um colorante vermelho.







Nesse tema de doutorado pretende-se avaliar as condições de demanda e transferência de oxigênio na produção do colorante em cultivos submersos em biorreatores agitados e aerados, bem como integrar as etapas de produção e extração do bioproduto, processo integrado conhecido como "fermentação extrativa".

Palavras-chaves: fungo filamentoso, colorante vermelho, demanda e transferência de oxigênio, processo integrado, recuperação.

ÁREA DE PESQUISA: Termodinâmica e Processos de Separação

PROFESSOR: André Bernardo

TÍTULO: Avaliação do projeto de cristalizadores na qualidade do produto da cristalização de fármacos

RESUMO:

Moléculas utilizadas como princípios ativos na indústria farmacêutica têm uma complexidade estrutural que levam à alta probabilidade de ocorrência de fenômenos como o polimorfismo e o solvatomorfismo. Tais fenômenos podem ter impacto comercial – como na proteção de patentes – farmacológicos – como o prazo de validade e a biodisponibilidade de medicamentos – e industriais – como no tempo e no custo de produção.

Neste contexto, este trabalho propõe a avaliação e o dimensionamento de cristalizador contínuo tubular, e de misturadores estáticos associados a tanques de mistura para a cristalização de paracetamol e nicotinamida em mistura de solventes (água-etanol e água-propileno glicol) e em diferentes condições de processamento (velocidade de resfriamento, taxa de adição de antissolvente) para obtenção dos parâmetros cinéticos. Tais parâmetros bem como a caracterização dos produtos obtidos em diferentes condições permitem direcionar as melhores condições do processo industrial.

PALAVRAS-CHAVE: cristalização; fármacos; desenvolvimento de processo

DOCENTE ORIENTADOR: Edson Luiz Silva

TÍTULO: Co-digestão anaeróbia de vinhaça, glicerol e água residuária de cervejaria em reatores anaeróbios de leito fluidizado de 1 fase e 2 fases para otimização da recuperação de energia em biorrefinarias

RESUMO

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

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

O reator anaeróbio de leito fluidizado (RALF) foi testado com sucesso para a produção de H2 e CH4, devido ao seu potencial para oferecer vantagens de acumulo de grande quantidade de biomassa no meio suporte, possibilidade para altas taxas de carregamento orgânico, baixos tempos de residência (ou tempos de detenção hidráulica, TDHs), e boas características de mistura.

Face ao exposto, esse trabalho busca avaliar a produção de H2 e CH4 utilizando a a codigestão de vinhaça, glicerol e água residuária de cervejaria em reatores batelada e RALF de fase única. Posteriormente, será avaliado o sistema de 2 RALFs em série (reator acidogênico seguido de metanogênico), para as melhores condições obtidas para produção de H2 em RALF em fase única.

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

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

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

DOCENTE ORIENTADOR: Edson Luiz Silva

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

RESUMO

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

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

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

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

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

DOCENTE ORIENTADOR: Edson Luiz Silva

TÍTULO: Otimização da produção de hidrogênio e metano em reatores anaeróbios a partir de a partir da co-fermentação de vinhaça, soro de queijo e glicerol

RESUMO

Reduzir o custo do tratamento de águas residuárias e de encontrar formas de produzir produtos úteis a partir desse resíduo, vem ganhando importância na perspectiva de atingir a sustentabilidade ambiental.

A indústria alcooleira caracteriza-se pela produção de uma grande quantidade de resíduos, dos quais alguns, mais recentemente, ganharam o "status" de subprodutos, tais como bagaço, a torta de filtro, caldo, melaço e a vinhaça. O grande problema da agroindústria canavieira é que para cada litro de combustível temos de 10 a 15 litros de vinhaça efluente da coluna de destilação, que, pelo seu baixo pH e sua elevada DQO (demanda química de oxigênio), se encontra entre os rejeitos industriais de maior potencial poluidor. Se por um lado ficam evidenciados os problemas que o despejo desse resíduo acarreta, por outro, é ressaltada a riqueza destes materiais em componentes úteis à nutrição das plantas ou correção dos solos.

A indústria de biodiesel também processa grande volume de matéria prima, o que consequentemente acarreta em quantidades consideráveis de resíduo gerado. O glicerol é o principal resíduo gerado durante a produção do biodiesel, visto que a cada 9 kg de biodiesel produzidos é gerado 1 kg de glicerol bruto.

O soro de queijo é gerado durante a fabricação do queijo, na etapa de precipitação e remoção da caseína do leite. A cada 1 kg de queijo, 9 kg de soro são produzidos. Além do grande volume gerado, a sua DQO varia de 50 a 102kg.m-3, com a maior fração da sua carga orgânica referente a lactose do leite (39-60 kg.m-3)

Face ao grande volume de vinhaça, soro de queijo e glicerol gerados, há necessidade de desenvolver tecnologias para gestão destes resíduos, como sua utilização para obtenção de energia. A estratégia de co-fermentação de substratos distintos, visa não só a adequação ambiental de diferentes fontes por um único processo, mas também utilizar diferentes características destes substratos para compor meio de cultivo balanceado em relação à nutrientes e razão carbono/nitrogênio. No contexto apresentado, esta pesquisa tem como principal objetivo a otimização das condições operacionais do reator anaeróbio de leito fluidizado, que permitam avaliar a influência das concentrações, pH e tempo de tratamento a partir da co-fermentação de vinhaça, soro de queijo, e glicerol para produção de hidrogenio e metano.

<u>OBSERVAÇÃO 1:</u> 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

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

Palavras-chaves: Processo anaeróbio, acidogênese, metanogênese, vinhaça, soro de queijo, glicerol, co-digestão, co-substrato.

ÁREA DE PESQUISA: Reatores Químicos Heterogêneos e Catálise

PROFESSOR: Ernesto Antonio Urquieta-González

TÍTULO: Zeólitas como Catalisadores Aplicados na Transformação de Bio-Moléculas de Origem Lignocelulósica a Produtos Químicos de Maior Valor e Demanda

RESUMO:

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

Observação

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

PALAVRAS-CHAVE: catálise heterogênea, síntese orgânica, produtos químicos bioderivados, zeólitas, Processos químicos sustentáveis.

PROFESSOR ORIENTADOR: Profa. Dra. Fernanda Perpétua Casciatori

TÍTULO: Produção contínua de celulases por fermentação em estado sólido integrada à sua recuperação e aplicação na cadeia de etanol de segunda geração

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

Desenvolver matrizes energéticas renováveis tornou-se estratégico diante da crescente preocupação mundial com a sustentabilidade ambiental. No Brasil, o conceito de biorrefinaria emerge como de indústria centrada na produção de biocombustíveis e outras biomoléculas de alto valor agregado. Com ênfase na produção de etanol de segunda geração (E2G) por via bioquímica, a produção de celulases na própria biorrefinaria (in house) pode garantir sua autossuficiência dessas enzimas enquanto insumos. Isso pode ser conseguido anexando-se, à planta principal, uma unidade de produção de enzimas por fermentação em estado sólido (FES), que emprega como matérias-primas subprodutos da biorrefinaria. No entanto, para se tornarem industrialmente viáveis, os bioprocessos de FES ainda requerem pesquisa e desenvolvimento de biorreatores e de operações downstream, além de ser necessário caracterizar e validar a aplicação dos bioprodutos obtidos. Diante do exposto, neste projeto, propõe-se estudar o cultivo do fungo termofílico Myceliophthora thermophila I-1D3b em substrato composto por bagaço de cana e farelo de trigo em biorreator de leito empacotado (BLE) operado continuamente. O BLE consistirá em uma coluna constituída por módulos independentes, que serão movimentados como em um reator de escoamento pistonado ao longo do tempo de cultivo. Será variada a taxa de aeração e o tempo total de cultivo. Cada módulo com material fermentado retirado do BLE será encaminhado para operações downstream, que serão divididas em duas vias: obtenção de extrato enzimático líquido e de material sólido com atividade enzimática de endoglucanase. No caso do extrato líquido, será testada a extração por percolação com água destilada. No caso do sólido, será testada a secagem do material por percolação com ar quente e seco. Nos dois casos, será variada a vazão de fluido e o tempo de processo, com o material fermentado sendo mantido no próprio módulo. O extrato líquido passará por etapas de concentração por precipitação. O extrato concentrado e o sólido seco serão caracterizados em termos de pH e temperatura ótimos, termoestabilidade e parâmetros cinéticos. Por fim, serão aplicados na hidrólise de bagaço de cana para obtenção de acúcares fermentescíveis. Ao final do projeto, espera-se ter um bioprocesso e dois tipos de bioprodutos passíveis de patenteamento e de aplicação industrial, a partir de uma abordagem completa que ainda é inédita na literatura de FES.

PALAVRAS-CHAVE: biorreatores; bioprocessos; enzimas; bioenergia; biocombustíveis.

ÁREA DE PESQUISA: Sistemas Particulados

DOCENTE ORIENTADOR: Francisco Guilherme Esteves Nogueira

TÍTULO: Desenvolvimento de heteroestruturas de Nb₂O₅/g-C₃N₄ decoradas com nanopartículas Cu e Zn para fotoconversão de CO₂ em produtos para indústria química

Nas últimas décadas a concentração de gases causadores do efeito estufa vem aumentando significativamente. Dentre estes gases se destaca o dióxido de carbono (CO₂), emitido pela queima de combustíveis fósseis e por atividades industriais, como a produção de cimento, aço, refino petroquímico, dentre outras. Assim, o desenvolvimento de tecnologias para a redução ou conversão do CO₂ é fundamental e estratégico para o desenvolvimento ambiental e econômico do Brasil. Neste contexto, se destaca os processos fotocatalíticos, os quais podem utilizar a luz solar como fonte de energia para o processo. Neste cenário, o objetivo desse projeto é desenvolver heteroestruturas a base de Nb₂O₅ e g-C₃N₄ decoradas com Cu e Zn, uma vez que o acoplamento entre os semicondutores pode melhorar a separação das cargas fotogeradas, reduzindo a taxa de recombinação entre elas. O desenvolvimento desses sistemas possibilita controlar diversos parâmetros fundamentais envolvidos nos processos fotocatalíticos, tais como a mobilidade dos portadores de cargas, *band gap, índice* de refração, entre outros. Assim, os objetivos específicos desta proposta de doutorado é a síntese e caracterização de heteroestruturas a base de Nb₂O₅/g-C₃N₄ em diferentes proporções de Nb₂O₅ e g-C₃N₄ para fotoconversão de CO₂.

Além disso, a heteroestrutura que apresentar melhor atividade fotocatalítica para a reação de fotoconversão de CO₂ será decorada com Cu ou Zn em diferentes teores, através dos métodos de impregnação por via úmida e deposição por pulverização catódica (*DC-magnetron sputtering*), dado que a adição de um metal de transição nesses materiais pode contribuir para aumentar o tempo de vida dos portadores de carga, bem como a interação com o CO₂.

E-mail para contato: nogueira@ufscar.br

Palavras-chaves: Fotorredução de CO2; Nióbio; Semicondutores; Dióxido de Carbono;

ÁREA DE PESQUISA: Reatores Químicos Heterogêneos e Catálise

DOCENTE ORIENTADOR: João Batista Oliveira dos Santos

TÍTULO: Desenvolvimento do processo de produção de hidrogênio e nanotubos de carbono via decomposição catalítica do metano.

RESUMO

A decomposição catalítica do metano é o processo mais promissor para a produção de nanotubos de carbono (CNTs) e H₂. Nesse processo, o H₂ é produzido sem a presença de contaminantes, tais como CO e CO2, evitando assim etapas de purificação e diminuindo os custos com o processo. Em conjunto com o H₂, single-walled carbon nanotubes (SWNTs) e multi-walled carbon nanotubes (MWNTs) podem ser produzidos dependendo das condições reacionais e do catalisador empregado. Esses CNTs têm atraído a atenção da indústria devido as suas excelentes propriedades elétrica, térmica, ótica e mecânica. Esses materiais tem sido utilizados como supercapacitores, em baterias, na área de microeletrônica, como sensores, na área farmacêutica e em medicina. A produção de H₂ e CNTs pode ser realizada utilizando um reator de leito fluidizado. Entretanto, muitas barreiras precisam ser superadas para o sucesso do processo. Algumas barreiras são: os CNTs podem ficar fortemente aderidos ao catalisador e interromper o processo de produção; a resistência mecânica do catalisador precisa ser elevada, caso contrário, o catalisador poderá ser danificado pelo atrito com as paredes do reator; o metal ativo do catalisador precisa ser resistente a sinterização e ter baixo custo. A principal vantagem do reator de leito fluidizado é a alta produtividade de nanotubos de carbono com elevada pureza, visto que não é necessário etapas de separação dos nanotubos e catalisador. Portanto, o objetivo deste projeto é desenvolver um processo contínuo de produção de H₂ e CNTs utilizando o metano como fonte de carbono e um reator de leito fluidizado. Além disso, o processo desenvolvido neste trabalho precisará ser sustentável e economicamente viável. O projeto consiste em uma parte experimental de desenvolvimento de catalisadores de Ferro e do reator de leito fluidizado e uma parte de simulação no ASPEN PLUS. A simulação será do processo global de decomposição do metano com o objetivo de avaliar a produção em larga escala de hidrogênio e nanotubos de carbono.

Palavras-chaves: Metano; hidrogênio; nanotubos de carbono; leito fluidizado.

ÁREA DE PESQUISA: Reatores Heterogêneos e Catálise

DOCENTE ORIENTADOR: José Mansur Assaf

DOCENTE CO-ORIENTADOR: Janaina Fernandes Gomes

TÍTULO: Eletro-redução de CO2 em catalisadores à base de cobre

RESUMO

Estratégias para reduzir as emissões de CO₂ e controlar o aumento dos níveis atmosféricos deste gás são urgentes. Uma abordagem promissora para ajudar a minimizar o acúmulo de CO2 na atmosfera e os impactos ambientais negativos associados a ele inclui o uso de CO₂ como matéria-prima para produtos químicos, como combustíveis, por exemplo. Estes compostos podem ser sintetizados por eletrocatálise. Contudo, no estado-da-arte correspondente, os catalisadores utilizados na eletro-redução de CO2 apresentam baixa conversão de CO2, baixa seletividade à formação de um produto específico e/ou baixa estabilidade nas condições de reação. Portanto, é necessário o desenvolvimento de catalisadores mais eficientes e estáveis, preferencialmente baseados em elementos não nobres. Estudos prévios, realizados em vários grupos de pesquisa, inclusive no nosso, indicam que estratégias independentes, como a realização da reação em meio ácido na presença de cátions de metais alcalinos, o emprego de catalisadores bimetálicos de Cu e Ag ou Cu e Au ou Cu e Zn, a aplicação de processos oxidativos a catalisadores à base de Cu, o aumento da área superficial do catalisador e a utilização de partículas com geometria cúbica podem intensificar a conversão eletroquímica de CO2 a compostos com dois ou mais átomos de carbono. No presente trabalho, combinações destas estratégias serão avaliadas. O objetivo deste estudo é sintetizar catalisadores bimetálicos de Cu, caracterizá-los e aplicálos à eletro-redução de CO2 em diferentes condições reacionais, visando maximixar a produção de compostos com dois ou mais átomos de carbono, como o etanol.

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

Palavras-chaves: eletrocatálise; eletro-redução de CO₂; etanol; cobre

ÁREA DE PESQUISA: Reatores Químicos Heterogêneos e Catálise

DOCENTE ORIENTADOR: Jose Maria Correa Bueno

TÍTULO: Understanding the surface chemistry on Cu-based catalysts on the CO2 hydrogenation to methanol

RESUMO

CO₂ 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 CO₂ can follow three main pathways: (i) formation of formate (HCOO), which is further hydrogenated to dioxymethylene (H2COO), followed by methoxide (H3CO) to methanol; (ii) formation of CO following the retro-Water Gas Shift reaction (r-WGS); (iii) CO₂ could be protonated to hydrocarboxyl (COOH) followed by COHOH, which then decomposes to COH, an intermediate to methanol. ¹⁻³ Indeed, the r-WGS pathway appears to be the most energetically favorable process² which is a major drawback in the process, since CO₂ and H₂ are consumed to form CO and water. Hence, the suppression of the r-WGS is one of the major challenges in the CO₂ hydrogenation to methanol. The costprohibitive In₂O₃ was found to block the r-WGS pathway due to the arrangement of the vacancies which are selectively activate CO₂ over CO.^{3,4} In this project, it will be proposed the synthesis of Cu-based catalysts, their modification and use in the CO₂ reduction to methanol. Copper catalysts have shown high catalytic activity for hydrogenation, but also to WGS and r-WGS. Bueno and coworkers⁵ have identified a correlation between Cu⁰/Cu⁺ ratio as well as the bond length Cu-O. As it regards the hydrogenation of CO₂, the role of Cu0 and Cu⁺ is not yet clear and different studies have reached contradictory conclusions on their roles. Indeed, the understanding of the of the CO₂ 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 SiO₂, Al₂O₃, ZrO₂ and CeO₂ 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. Understanding the surface chemistry on Cu-based catalysts on the CO₂ hydrogenation to methanol

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) (5) Caldas, P. C. P.; Gallo, J. M. R.; Lopez-Castillo, A.; Zanchet, D.; C. Bueno, J. M. Acs Catalysis 2017, 2419.

Palavras-chaves: Methanol; CO2; Cu catalysts; Cu-ZrO2 catalysts;

ÁREA DE PESQUISA: Sistemas Particulados Laboratório de Tecnologias Ambientais

PROFESSOR: Luís A. M. Ruotolo

TÍTULO: Desenvolvimento de Tecnologias de Dessalinização

A questão da água vem ganhando cada vez mais destaque no mundo contemporâneo devido à crescente demanda. No contexto brasileiro, o desenvolvimento de tecnologias de dessalinização é de grande interesse para a produção de água potável a partir da água salobra presente em regiões semiáridas, promovendo assim o desenvolvimento social e econômico da região.

No Laboratório de Tecnologias Ambientais (Latea) essas questões são abordadas em uma linha de pesquisa denominada dessalinização eletroquímica, a qual tem atraído cada vez mais a atenção devido ao seu baixo custo operacional. Essa tecnologia baseia-se no conceito de remoção dos íons presentes na fase aquosa e seu armazenamento na superfície de eletrodos polarizados positivamente (remoção de Cl⁻) e negativamente (remoção de Na⁺). Ainda, como o princípio de funcionamento é semelhante ao de um capacitor, parte da energia utilizada na eletrossorção pode ser recuperada, tornando o processo competitivo em termos energéticos.

Em 2017 foi desenvolvido e patenteado pelo nosso grupo de pesquisa um novo carvão ativado com elevada capacidade de remoção de sais (~22 mg sal/g carvão ativado), figurando entre as maiores capacidades relatadas na literatura. Recentemente, em testes realizados em colaboração com a Universidade de Wageningen (Holanda), foi possível aumentar essa capacidade para o impressionante valor de 85 mg/g, através da modificação da célula de dessalinização.

Este projeto visa dar continuidade ao desenvolvimento da célula de dessalinização, buscando *design* e condições operacionais que visam sua aplicação comercial. O Projeto conta com a colaboração de pesquisadores do IMDEA-Energy (Espanha).

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

PALAVRAS-CHAVE: Carvão ativado, célula de dessalinização

ÁREA DE PESQUISA: Simulação e Controle de Processos/Reatores Químicos Heterogêneos e Catálise (AP5/AP2)

DOCENTE ORIENTADOR: Marcelo Perencin de Arruda Ribeiro (orientador), João Batista Oliveira dos Santos (co-orientador)

TÍTULO: Estudo computacional de microrreator de placas para a reforma a vapor do etanol

RESUMO

A produção de H₂ sem emissão de carbono é um desafio para provimento de soluções energéticas não poluentes. Setores industriais são consumidores massivos de H₂, normalmente produzido pela reforma em altas temperaturas de CH₄, majoritariamente oriundo de gás natural. A possibilidade de substituir o metano por hidrocarbonetos de fonte renovável, como o etanol, teria como vantagem a recuperação do CO₂ emitido durante o processo de produção da biomassa, neutralizando o ciclo. Porém, a disseminação do processo necessita de soluções compartimentalizáveis, de escalonamento simples e de alta eficiência energética, evitando os sistemas de reforma de grande porte. Na literatura, microrreatores de placas com microcanais vem sendo estudados para reformada a vapor de metanol.

O Objetivo central da proposta é desenvolver um modelo de sistema de reação capaz de promover a reforma de uma mistura de etanol e água a H₂, como mistura com CO (CO + H₂) ou com CO₂ (acoplando-se à reação de water shift no mesmo processo), utilizando dados cinéticos da reação de reforma do etanol obtidos pelo grupo de Catálise do DEQ. A partir do modelo desenvolvido, o aluno estudará de forma computacional os efeitos de geometria e condições reacionais em termos de conversão, perda de carga e troca térmica.

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

ÁREA DE PESQUISA: Simulação e Controle de Processos Químicos (AP5)

DOCENTE ORIENTADOR: Marcelo Perencin de Arruda Ribeiro

TÍTULO: Ferramentas Computacionais para o Desenvolvimento do Processo de Síntese Enzimática de Biodiesel Etílico

RESUMO

Embora a rota enzimática para a síntese de biodiesel por transesterificação tenha vantagens frente à rota química (pois permite o uso de óleos de baixa qualidade e facilita a recuperação do glicerol), o alto custo da enzima ainda é o principal fator que impede uma ampla utilização industrial desta abordagem. A imobilização de enzimas ou o uso de enzimas livres mais estáveis podem aumentar a produtividade específica do biocatalizador, reduzindo seu impacto no custo de produção. De qualquer forma, o uso de ferramentas matemáticas são importantes e podem ajudar no design do processo a ponto de avaliar o custo em condições já otimizadas. A transesterificação enzimática é um sistema complexo onde diversas fases estão envolvidas. Além disso, fenômenos distintos podem ocorrer quando utilizados diferentes biocatalisadores (enzimas livres ou imobilizadas). Neste tema de doutorado propõe-se a aplicação de métodos computacionais para a modelagem cinética, design, otimização, monitoramento e controle da síntese de biodiesel etílico por transesterificação enzimática. Modelos cinéticos e métodos de monitoramento já vêm sendo desenvolvidos pelo grupo. O papel do aluno será melhorar os modelos cinéticos já disponíveis. Utilizá-los no design e otimização matemática do processo, validando as propostas experimentalmente. A ideia é focar tanto na parte experimental quanto na computacional. Conhecimento de simulação utilizando Matlab ou Scilab é pré-requisito necessário para desenvolver este tema.

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

DOCENTE ORIENTADOR: Mônica Lopes Aguiar

TÍTULO: Controle de poluição atmosférica por material particulado superfino da indústria siderúrgica – Projeto em parceria com a ArcelorMittal

RESUMO

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 equipamentos clássicos na separação gás-sólido como os precipitadores eletrostáticos, filtros de mangas e ciclones tecido em um único equipamento. 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, existem muito poucos trabalhos científicos que abordam este tema que é muito importante para as indústrias em diversas áreas de aplicação, principalmente na siderurgia. Como a performance da filtração híbrida é função de variáveis relacionadas às características do material particulado e às condições do processo, investigações sistemáticas são necessárias para avaliar sua viabilidade em cada situação. Este projeto propõe-se a analisar a performance da filtração híbrida eficiência de coleta para nano e micro partículas, queda de pressão, redução do gasto energético, penetração de partículas no meio filtrante, sistemas de limpeza, durabilidade das mangas em operação, deposição das partículas (porosidade da torta) - utilizando material particulado proveniente da indústria siderúrgica. Para isso, um equipamento híbrido em escala laboratorial será utilizado. Nele, serão realizados ensaios de filtração, com diferentes meios filtrantes comerciais, de acordo com delineamento experimental prévio. Os fatores a serem considerados serão os fornecidos pela indústria siderúrgica, parceira deste projeto a ArcelorMittal. A partir dos resultados obtidos, será analisada a viabilidade de substituição de equipamentos e alteração de processos dentro da siderurgia. Além dos aspectos experimentais, este projeto tem como meta simular o equipamento com as melhores condições operacionais.

PALAVRAS-CHAVES: Poluição do ar, Filtros híbridos, Indústria siderúrgica, Simulação do processo de filtração, Filtros de mangas.

PROFESSOR ORIENTADOR: Mônica Lopes Aguiar

TÍTULO: *Membranas nanofibrosas com atividade antiviral e biocida para usos em EPI e filtros de ar.*

RESUMO:

Um dos grandes problemas enfrentados por profissionais em ambientes hospitalares e centros cirúrgicos é a contaminação por patógenos. Assim, o desenvolvimento de meios filtrantes modificados (inteligentes) através do uso de nanofibras de polímeros sintéticos ou naturais com ou sem a presença de nanopartículas de prata (Ag), cobre (Cu), óleos essenciais, ou outros agentes com caráter biocida/virucida para aplicação em sistemas de ventilação, se apresenta como alternativa promissora para a aplicação nestes locais. A elaboração de meios filtrantes com nanofibras visa maior eficiência de retenção de partículas nanométricas visto o atual cenário mundial da pandemia, já que vírus apresentam tamanho entre 20 e 400 nm, bactérias entre 0,2 e 2,0 µm, e esporos de fungos, 2,0 a 8,0 µm. A presença de nanofibras aumenta em muito a deposição de nanopartículas, aumentando assim a eficiência do meio filtrante com acréscimo reduzido à resistência a passagem do ar. Soma-se a este aumento, o incremento da capacidade biocida do tecido modificado através do efeito combinado do uso de nanofibras e nanopartículas, que poderão ser incorporados aos meios filtrantes, para sistemas de ventilação (como ar condicionado). Portanto, o objetivo deste estudo é desenvolver Meios filtrantes utilizando nanofibras poliméricas e naturais com característica virucida. Serão analisados os parâmetros para obter ou modificar meios filtrantes (MF) de sistemas de ventilação (ar condicionados, ventiladores mecânicos) que proporcione alta eficiência de coleta para partículas nanométricas, com meta de reter vírus, bactérias e fungos e que tenham potencial de mitigação ou até mesmo inativação desses patógenos que ficam aderidos a sua superfície. Esta proposta objetiva-se reduzir a contaminação por patógenos, uma vez que a transmissão de patógenos no ambiente hospitalar (AH) pode também ocorrer através do ar. Assim pretende-se contribuir com a redução da transmissão de patógenos em ambientes inóspitos, como a dos hospitais, e até mesmo evitar futuras possíveis pandemias e epidemias relacionadas a vírus, bactérias e fungos além de manter o ar mais puro em ambientes internos.

PALAVRAS-CHAVES: Meios filtrantes, nanopartículas, bioaerossóis, eficiência de filtração de ar, atividade bactericida.

ÁREA DE PESQUISA: Simulação e Controle de Processos Químicos

DOCENTE ORIENTADOR: Prof. Dr. Ruy de Sousa Júnior

TÍTULO: Modelagem e simulação de células a combustível biológicas

RESUMO

As células a combustível podem ser categorizadas em células a combustível abióticas, nas quais os componentes da célula a combustível não compreendem qualquer material biológico, e células a combustível biológicas (bióticas), que compreendem organismos vivos ou material biológico. As células a combustível biológicas usam microrganismos ou enzimas como catalisadores. Em uma célula a combustível microbiana, as reações de oxidação são catalisadas por micróbios (in vivo). Alternativamente, quando o catalisador é uma enzima (sistema in vitro), a célula é chamada de célula a combustível enzimática. A operação de uma célula a combustível biológica se assemelha ao funcionamento da célula a combustível convencional: um combustível sofre oxidação, catalisada por enzima ou microrganismo, no ânodo. Esta reação libera elétrons que alcançam o cátodo através de um circuito externo. No cátodo, um oxidante (geralmente oxigênio) é reduzido. As células a combustível biológicas usualmente utilizam (no ânodo) substratos orgânicos, como álcoois e açúcares, e operam em temperatura amena. Trabalhos que empregam enzimas como álcool e aldeído desidrogenases (associadas à metabolização de etanol), por exemplo, são apresentados na literatura. Todavia, ainda é necessário compreender melhor e/ou prever o comportamento de sistemas de células a combustível biológicas por meio de seus principais processos eletroquímicos, biológicos e de transferência de massa, a fim de desenvolver ainda mais essa tecnologia (de modo a viabilizar suas aplicações práticas). Dentro deste contexto, este trabalho visa fazer um levantamento na literatura das abordagens de modelagem propostas para células a combustível biológicas, bem como das técnicas analíticas (como redes neurais artificiais e lógica fuzzy) e ferramentas computacionais avançadas (como dinâmica de fluidos computacional) usadas para descrever estes sistemas. Finalmente, tendo como base dados experimentais disponíveis na literatura (de potencial da célula versus densidade de corrente elétrica, principalmente), desenvolver-se-á um trabalho de modelagem matemática para uma célula a combustível biológica.

Palavras-chaves: célula a combustível biológica; modelagem matemática; processos eletroquímicos e biológicos

DOCENTE ORIENTADOR: Teresa Cristina Zangirolami

TÍTULO: Desenvolvimento de processo para obtenção de xilooligossacarídeos com elevada capacidade prebiótica: produção, purificação e propriedades medicinais

RESUMO

Xilooligossacarídeos (XOS) são oligômeros pequenos de xilose de alto valor agregado que apresentam propriedades prebióticas interessantes para as indústrias farmacêutica e alimentícia, por estimular o crescimento de microrganismos probióticos e a produção de substâncias com atividade antimicrobiana, como as bacteriocinas. Recentemente, estudos demonstraram o potencial anticancerígeno destes oligômeros. Os XOS podem ser obtidos a partir de uma hidrólise branda da hemicelulose, evitando assim excessiva produção de xilose, o que dificultaria a etapa de purificação. Primeiramente, um pré-tratamento de baixa severidade reduz o tamanho dos heteropolissacarídeos da hemicelulose, os quais são então submetidos a uma hidrólise enzimática controlada para obtenção dos XOS de alto valor agregado. A composição de XOS resultante da hidrólise enzimática de xilooligômeros dependerá da matéria-prima lignocelulósica, do pré-tratamento para extração da hemicelulose e da especificidade do complexo enzimático utilizado. Na presente proposta de Doutorado, será desenvolvido um processo para obtenção de XOS de alta pureza a partir do bagaço e da palha de cana de açúcar, contribuindo para o aproveitamento da fração hemicelulósica e para a valorização desses coprodutos de menor valor agregado. As atividades propostas envolvem inicialmente a obtenção de hidrolisado de hemicelulose por pré-tratamento hidrotérmico do bagaço ou da palha (em reator Parr), o qual será submetido à hidrólise em reatores de diferentes configurações contendo xilanases imobilizadas, operados em diferentes condições, para avaliação do rendimento e da produtividade em XOS dos diferentes processos. Os produtos da reação enzimática nas diversas condições estudadas conterão alto teor de XOS, além de grandes quantidades de substâncias indesejadas, como extrativos, lignina solubilizada e carboidratos, que também estarão presentes na solução. Assim, a etapa seguinte será dedicada à obtenção de XOS com elevada pureza, a partir do desenvolvimento de processo de purificação de XOS por adsorção em micropartículas magnéticas. Em todos os estudos desenvolvidos, os XOS serão caracterizados quanto ao tamanho e concentração por Cromatografia Líquida de Alto Desempenho. Finalmente, os XOS purificados obtidos serão ainda caracterizados quanto às propriedades nutracêuticas e antitumorais utilizando cultivos de células animais. As atividades propostas serão realizadas em colaboração com o LABEN (Laboratório de Biologia do Envelhecimento) da UFSCar e contarão com a Profa. Dra. Thaís Suzane Milessi-Esteves (DEQ/UFSCar) como coorientadora.

Palavras-chaves: xilanases; imobilização de enzimas; hidrolisado de hemicelulose; xilooligassacarídeos.