

## TEMA PARA DOUTORADO – EDITAL N° 04/2021

**ÁREA DE PESQUISA:** Engenharia Bioquímica

**PROFESSOR ORIENTADOR:** Adilson José da Silva

**OBSERVAÇÃO:**

**TÍTULO:** Produção de fenazinas naturais em *E. coli* para aplicação em baterias

### **RESUMO:**

As fenazinas são uma classe de metabólitos secundários produzidos por algumas espécies de microrganismos. Essas biomoléculas apresentam anéis aromáticos nitrogenados capazes de sofrer reações reversíveis de óxido-redução e, neste projeto, esta característica particular será explorada para o desenvolvimento de baterias de íons zinco. Para viabilizar esse estudo, será produzido um conjunto de fenazinas de forma heteróloga utilizando células de *E. coli*. Para isso, os genes envolvidos na biossíntese das fenazinas selecionadas serão clonados e expressos utilizando vetores baseados em *BioBricks*, e a linhagem produtora terá sua via de produção de compostos aromáticos otimizada. As fenazinas produzidas serão utilizadas na confecção de catodos orgânicos e avaliadas para o desenvolvimento de baterias de íons zinco em meio aquoso. Essa configuração inédita combina a segurança e baixo custo dos dispositivos baseados em zinco com o uso de compostos orgânicos de origem biológica, gerando um produto ambientalmente mais amigável e sustentável que as baterias de íons lítio atualmente utilizadas nos dispositivos eletrônicos portáteis. Dessa forma, pretende-se gerar uma plataforma de produção de fenazinas por via fermentativa combinada ao desenvolvimento de novos dispositivos de armazenamento de energia eficientes e sustentáveis.

**PALAVRAS-CHAVE:** Engenharia Metabólica, fábricas celulares, catodos orgânicos, bateria de íons zinco.

## TEMA DE MESTRADO – EDITAL N° 04/2021

**ÁREA DE PESQUISA: Engenharia Bioquímica**

**DOCENTE ORIENTADOR: Alberto Colli Badino Junior**

**TÍTULO: Estudo do bioprocesso integrado de produção e recuperação de corante 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 corante vermelho.



Nesse tema de doutorado pretende-se avaliar as condições de demanda e transferência de oxigênio na produção do corante 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 filamentososo, corante vermelho, demanda e transferência de oxigênio, processo integrado, recuperação.

## TEMA DE MESTRADO – EDITAL N° 04/2021

**ÁREA DE PESQUISA: Engenharia Bioquímica**

**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.

## TEMA PARA DOUTORADO – 1º SEMESTRE DE 2022

**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**

## TEMA PARA DOUTORADO – 1º SEMESTRE DE 2022

**ÁREA DE PESQUISA: Termodinâmica e Processos de Separação**

**PROFESSOR: André Bernardo**

**TÍTULO: Melhoria do Processo de Recristalização de Cinza das Plantas de Remoção de Cloreto e Potássio em Fábricas de Celulose.**

### **RESUMO:**

Nos últimos anos, as fábricas produtoras de celulose e papel têm buscado insistentemente a redução dos custos de produção. Um dos caminhos adotados para a diminuição dos custos é o fechamento do ciclo de recuperação química, reduzindo as purgas e as perdas químicas. A iniciativa é adequada, mas traz um problema para a operação da Caldeira de Recuperação Kraft, principal equipamento de uma fábrica de celulose, onde os compostos de cloreto e potássio presentes no licor negro concentrado para a queima na caldeira têm aumentado a concentração. Esses compostos em maior concentração provocam o abaixamento do ponto de fusão das cinzas geradas durante a queima de licor, produzindo: corrosão química nos superaquecedores da caldeira; o entupimento da passagem de gases, provocando uma parada da caldeira. Como o uso da Cristalização é um processo relativamente novo para a remoção de cloreto e potássio das cinzas produzidas durante a queima do licor negro nas Caldeiras de Recuperação nas fábricas de celulose e papel tanto no Brasil como em outros países, e mesmo os próprios fornecedores dos equipamentos de remoção de cloreto e potássio ainda não dominam completamente a operação desse processo, este trabalho propõe a avaliação de plantas existentes, simulação dos processos e proposição de melhorias à operação das plantas atuais.

**PALAVRAS-CHAVE: cristalização; desenvolvimento de processo; celulose; sulfato de sódio**

## TEMA DE DOUTORADO – EDITAL Nº 04/2021

**ÁREA DE PESQUISA: Engenharia Bioquímica**

**DOCENTE ORIENTADOR: Cristiane Sanchez Farinas**

**TÍTULO: Extração e funcionalização de nanocelulose para aplicação em bioinsumos**

### **RESUMO**

Estudos direcionados a uma economia de baixo carbono, tendo como premissa a exploração sustentável de recursos renováveis para oferecer soluções concretas para os grandes desafios das áreas sociais, econômicas e ambientais se fazem cada vez mais necessários. Considerando que a biomassa lignocelulósica configura-se como a opção mais promissora para substituição dos recursos não-renováveis, seu uso como matéria-prima para obtenção de novos materiais de alto-valor agregado, como a nanocelulose, apresenta grande potencial. A nanocelulose pode ser obtida na forma de nanofibras de celulose (NFC) ou nanocristais de celulose (NCC) e seu uso em materiais poliméricos resulta em aumentos significativos nas propriedades de resistência mecânica dos produtos obtidos. Atualmente, a produção de nanocelulose já vem sendo realizada em escala industrial, sendo que os processos convencionais utilizam a rota química via hidrólise ácida. No entanto, o desenvolvimento de processos que utilizem rotas mais ambientalmente favoráveis, tais como o processo mecânico, se faz necessário. Além da etapa de extração, dependendo do tipo de aplicação, a funcionalização destes nanomateriais se faz necessária para que novos grupamentos na superfície permitam um maior número de interações entre os componentes. A fim de abordar essa demanda e contribuir para a implementação de processos industriais mais sustentáveis, este projeto de doutorado tem como objetivo principal desenvolver uma rota tecnológica para a obtenção e funcionalização de nanocelulose via rotas química e mecânica visando a sua aplicação na formulação de nanocompósitos com propriedades adequadas para uso em diferentes produtos de interesse agroindustrial.

**Palavras-chaves:** Bioprocesso, nanocelulose; biomassa vegetal, bioinsumos

## TEMA DE DOUTORADO – EDITAL Nº 04/2021

**ÁREA DE PESQUISA: Controle Ambiental**

**DOCENTE ORIENTADOR: Edson Luiz Silva**

**TÍTULO: Co-digestão anaeróbia de vinhaça, melão e caldo de cana em reatores anaeróbios de leito fluidizado de 1 fase e 2 fases para otimização da recuperação de energia em biorrefinarias de cana de açúcar**

### **RESUMO**

O processo de digestão anaeróbia envolve 2 grupos principais de consórcios de microrganismos: as bactérias acidogênicas, que decompõem os substratos principalmente em H<sub>2</sub>, ácido acético e CO<sub>2</sub>; e as arqueias metanogênicas, que convertem o ácido acético, H<sub>2</sub> e CO<sub>2</sub> em CH<sub>4</sub>. Assim, em processos anaeróbios de fases separadas, estes grandes grupos de microrganismos podem ser combinados de modo a permitir a extração de H<sub>2</sub> em um primeiro estágio e CH<sub>4</sub> em um segundo estágio.

O aspecto atrativo da produção biológica de H<sub>2</sub> 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 H<sub>2</sub>, uma vez que a remoção de matéria orgânica é baixa durante o processo. Por outro lado, a geração de CH<sub>4</sub> envolve necessariamente remoções significativas de matéria orgânica porque os ácidos e outros produtos remanescentes gerados durante a produção de H<sub>2</sub> constituem os principais substratos para a produção desse gás.

O reator anaeróbio de leito fluidizado (RALF) foi testado com sucesso para a produção de H<sub>2</sub> e CH<sub>4</sub>, 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 H<sub>2</sub> e CH<sub>4</sub> utilizando a co-digestão de vinhaça, melão e caldo de cana 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 H<sub>2</sub> em RALF em fase única.

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

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

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

## TEMA DE DOUTORADO – EDITAL Nº 04/2021

**ÁREA DE PESQUISA: Controle Ambiental**

**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.

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

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

## TEMA DOUTORADO 1 – PPGEQ/UFSCar - EDITAL Nº 04/2021

**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 catalíticos heterogêneos. O outro, também de grande relevância, considera a substituição de matérias primas de origem fóssil por outras de origem renovável, minimizando os impactos ao meio ambiente e contribuindo para a sustentabilidade do planeta. Assim, processos catalíticos heterogêneos aplicados à transformação de biomoléculas, vem adquirindo importância estratégica no cenário nacional e internacional. Com esse objetivo, durante o desenvolvimento da pesquisa em nível de 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 e Energia (CPqMAE/UFSCar: <https://www.archdaily.com/777506/laboratories-ufscar-vigliecca-and-associados>), a qual faz parte da temática do projeto em desenvolvimento no Centre of Excellence for Research in Sustainable Chemistry (CERSusChem/UFSCar), financiado pela FAPESP”.

**PALAVRAS-CHAVE: catálise heterogênea, síntese orgânica, produtos químicos bio-derivados, zeólitas, Processos químicos sustentáveis.**

## TEMA DOUTORADO 2 – PPGEQ/UFSCar - EDITAL 04/2021

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

**PROFESSOR: Ernesto A. Urquieta-González**

**TÍTULO: Desenvolvimento de Catalisadores para a Oxidação Parcial de Metano em Metanol**

### **RESUMO:**

O desenvolvimento de processos que utilizem catalisadores altamente ativos e seletivos na transformação do metano a intermediários e produtos químicos é estratégico para a indústria de petróleo e gás (<https://www.alemdasuperficie.org/>). O metano, de alta abundância *on* e *offshore*, é o principal constituinte do gás natural. A estratégia é a busca por tecnologias que minimizem o uso do metano como combustível, consequentemente evitando a geração de gases responsáveis pelo aquecimento global. Nesse contexto e tendo como foco a sustentabilidade do planeta, esse gás vem sendo considerado um elemento de transição na substituição de matérias primas de origem fóssil por fontes renováveis. A pesquisa, em nível de doutorado envolverá a preparação de catalisadores contendo cátions de cobre oxidados incorporados em estruturas de zeólitas, sua caracterização física e química por técnicas espectroscópicas avançadas e sua avaliação em reator catalítico, na conversão direta de metano em metanol. Os trabalhos experimentais serão realizados utilizando a infraestrutura do Laboratório de Catálise do Centro de Pesquisas em Materiais Avançados e Energia da UFSCar:

<https://www.archdaily.com/777506/laboratories-ufscar-vigliecca-and-associados>, tendo o suporte financeiro da FAPESP (fapesp.br), via projeto temático

**PALAVRAS-CHAVE: gás natural, metano, metanol, zeólitas, cobre, oxocátions.**

## TEMA PARA DOUTORADO – 1º SEMESTRE DE 2022

**ÁREA DE PESQUISA:** Engenharia Bioquímica

**PROFESSOR ORIENTADOR:** Profa. Dra. Fernanda Perpétua Casciotori

**TÍTULO:** Produção contínua de celulasas 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 celulasas 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 açúcares fermentescíveis. Ao final do projeto, espera-se ter um bioprocessos 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.

## TEMA DE DOUTORADO – EDITAL Nº 04/2021

**ÁREA DE PESQUISA: Sistemas Particulados**

**DOCENTE ORIENTADOR: Francisco Guilherme Esteves Nogueira**

**TÍTULO: Desenvolvimento de adsorventes magnéticos para tratamento de águas residuárias da agroindústria.**

### **RESUMO**

O desenvolvimento de tecnologias para o tratamento de águas residuárias provenientes do setor agroindustrial tem se tornado um fator relevante, devido a fatores ambientais e econômicos. Neste contexto, destaca-se a agroindústria do café que nos últimos anos apresentou um crescimento significativo no mundo e no Brasil. De acordo, com a Organização Internacional do Café (OIC) o Brasil produziu aproximadamente 69 milhões de sacas de 60 kg de café em 2020, sendo responsável pela metade da produção mundial de café. No entanto, durante a etapa de processamento dos grãos de café por via úmida são utilizados aproximadamente 40 a 45 l de água por quilograma de café com elevado teor de compostos orgânicos, quando descartadas de forma inadequada podem ocasionar sérios danos ambientais e de saúde pública.

Dentro deste contexto, este projeto tem como objetivo o desenvolvimento de adsorventes magnéticos de baixo custo para a remoção e recuperação de compostos fenólicos provenientes da agroindústria do café. Para obtenção do carvão ativado magnético serão utilizados como matérias primas o bagaço da cana de açúcar e a casca de café, resíduos gerados em grandes quantidades. As nanopartículas de magnéticas serão incorporadas nos materiais utilizando polímeros previamente sintetizado e pelo método de pulverização catódica (“*magnetron sputtering*”). Assim, a combinação das propriedades adsorventes do carvão ativado com as propriedades magnéticas das nanopartículas incorporadas ao material, poderá facilitar de maneira significativa a separação e a reutilização do adsorvente do meio reacional, operações estas fundamentais, uma vez que a viabilidade econômica do processo está diretamente ligada com sua regeneração e reutilização.

**Maiores informações sobre o projeto e a linha de pesquisa podem ser obtidas por e-mail:**

**nogueira@ufscar.br**

**Palavras-chaves:** adsorção; agroindústria; materiais magnéticos.

## TEMA DE DOUTORADO – EDITAL N° 04/2021

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

**DOCENTE ORIENTADOR: José Mansur Assaf**

**DOCENTE CO-ORIENTADOR: Janaina Fernandes Gomes**

**TÍTULO: Eletro-redução de CO<sub>2</sub> em catalisadores à base de cobre**

### **RESUMO**

Estratégias para reduzir as emissões de CO<sub>2</sub> e controlar o aumento dos níveis atmosféricos deste gás são urgentes. Uma abordagem promissora para ajudar a minimizar o acúmulo de CO<sub>2</sub> na atmosfera e os impactos ambientais negativos associados a ele inclui o uso de CO<sub>2</sub> como matéria-prima para produtos químicos, como combustíveis, por exemplo. Estes compostos podem ser sintetizados por eletrocatalise. Contudo, no estado-da-arte correspondente, os catalisadores utilizados na eletro-redução de CO<sub>2</sub> apresentam baixa conversão de CO<sub>2</sub>, 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 CO<sub>2</sub> 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 aplicá-los à eletro-redução de CO<sub>2</sub> em diferentes condições reacionais, visando maximizar 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 - e poderá ser beneficiado com bolsa de estudos deste Programa. Mais informações sobre o PRH 39 podem ser obtidas no link: <https://www.deq.ufscar.br/pt-br/prh-anp/prh-anp-1>

**Palavras-chaves:** eletrocatalise; eletro-redução de CO<sub>2</sub>; etanol; cobre

## TEMA PARA DOUTORADO – 1º SEMESTRE DE 2022

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

**PROFESSOR: José Mansur Assaf**

**Biocombustíveis para aviação: Tecnologia Álcool-para-Jatos (APJ)**

**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:** No grande esforço atualmente empreendido para substituição dos atuais combustíveis fósseis utilizados em veículos por outros que sejam de origem renovável, entre os quais se destacam o etanol e o biodiesel, deve-se também voltar a atenção para as necessidades da aviação. *De maneira diversa à atualmente utilizada em veículos com motor flex, onde álcool etílico e gasolina podem ser associados em quaisquer proporções, o combustível para aviação requer maior rigor e compatibilidade entre os compostos, impossibilitando a utilização direta de etanol. Para contornar este problema, estuda-se a conversão direta de álcoois em biocombustíveis que sejam compatíveis com combustíveis tradicionais, como o querosene. Desta maneira, poderão ser utilizados na aviação sem grandes modificações dos motores e da infraestrutura atualmente existente.*

Nesta direção, começa a despontar a tecnologia chamada *álcool para jatos*, na qual o composto oxigenado passa por transformações químicas em três etapas:

- desidratação para formação de olefina
- oligomerização da olefina
- hidrogenação dos oligômeros

Entre estas, a oligomerização do etileno, obtido da desidratação do etanol, requer atenção especial. Assim, nesta etapa pretende-se estudar a produção de alfa-olefinas lineares de cadeia maior. Estas constituem um grupo de olefinas industrialmente importantes, como 1-buteno, 1-hexeno, etc., sendo necessário otimizar o processo para a faixa de C8-C16, típica de querosene.

Em resumo, neste projeto será estudada a produção de combustível para aviação, dando-se destaque para o *desenvolvimento de catalisadores heterogêneos para a etapa de oligomerização do eteno* e, com isso, contribuir com os esforços da comunidade científica para a *produção de compostos de origem renovável* que possam substituir os combustíveis fósseis atualmente em uso nos diversos meios de transporte.

O trabalho constará de:

- design, com auxílio de dados da literatura, de compostos que possam ser ativos como catalisadores para esta reação
- preparação de catalisadores heterogêneos sólidos
- caracterização dos catalisadores utilizando técnicas químicas e físicas
- testes em reatores de laboratório.
- integração no processo APJ.

**PALAVRAS-CHAVE: biocombustível; combustível para jatos; tecnologia APJ; oligomerização.**

## TEMA PARA DOUTORADO – 1º SEMESTRE DE 2022

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

**PROFESSOR: José Mansur Assaf**

**Valorização de derivados de biomassa: gama-valerolactona como plataforma química para produção de biocombustíveis e bioaditivos**

**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 conversão de biomassa lignocelulósica em combustíveis e outros produtos químicos requer a utilização de hemicelulose e celulose, consistindo principalmente de açúcares C5 e C6.

A conversão catalítica da hemicelulose é particularmente importante devido a dificuldades na conversão biológica de açúcares C5 quando comparado à conversão de C6.

Dentre os compostos que podem ser obtidos a partir dos açúcares C5, o furfural torna-se uma opção promissora, sendo precursor da síntese de uma série de compostos de relevância na indústria química, como por exemplo, a gama-valerolactona, que se apresenta como uma alternativa para processos sustentáveis visando a substituição de petroquímicos, sendo uma importante matéria-prima na produção de polímeros e de biocombustíveis e bioaditivos para combustíveis.

A produção da gama-valerolactona a partir do furfural envolve etapas de desidratação e transferência de hidrogênio, portanto, *este projeto é focado no desenvolvimento de catalisadores bifuncionais que apresentem sítios ativos capazes de promover a conversão direta.*

Materiais que combinem sítios ácidos de Brønsted e sítios metálicos serão avaliados no processo utilizando H<sub>2</sub> puro, enquanto materiais que combinem sítios ácidos de Brønsted e de Lewis serão avaliados em processo que envolvam a transferência de hidrogênio do solvente para os intermediários de reação.

O trabalho constará de:

- Design, com auxílio de dados da literatura, de compostos que possam ser ativos como catalisadores heterogêneos para estas reações.
- Preparação de catalisadores heterogêneos sólidos.
- Caracterização dos catalisadores utilizando técnicas químicas e físicas.
- Testes e aplicações em reatores de laboratório.

**PALAVRAS-CHAVE:** **plataforma química para biocombustíveis; valorização de biomassa; conversão química de açúcares C5; conversão direta de derivados de biomassa em produtos**

## TEMA DE DOUTORADO – EDITAL N° 04/2021

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

**DOCENTE ORIENTADOR: José Maria Corrêa Bueno**

**TÍTULO: Conversão Direta de CO<sub>2</sub> a olefinas**

### **RESUMO**

As emissões atmosféricas de CO<sub>2</sub> estão contribuindo diretamente para as mudanças climáticas, varias tecnologias estão sendo desenvolvidas para reduzir a emissão desse gás de efeito estufa. Uma das principais formas para reutilização do CO<sub>2</sub> baseia-se na hidrogenação catalítica para formação de metanol. Contudo esta reação apresenta restrições termodinâmicas, mesmo sendo realizadas em alta pressão (50 bar). Uma possibilidade de contornar essa barreira é a realização de reações em cascata termodinamicamente favoráveis para transformação de metanol em produtos químicos como exemplo: dimetil éter ou olefinas. Um dos desafios é o desenvolvimento de catalisadores multifuncionais, pois as reações que exigem várias funções distintas. Por exemplo o catalisador para hidrogenação seletiva do CO<sub>2</sub> à metanol, necessita de sítios ativação do CO<sub>2</sub> e sítios para ativação do H<sub>2</sub>. Além da especificidade para que o catalisador não promova a hidrogenação via CO ou formação de metano, que aumentaria ainda mais as restrições termodinâmica para a formação do metanol. A faixa de temperatura para operação do catalisador deve ser definida pela segunda reação a ser acoplada nesse sistema. No caso da segunda reação ser a oligomerização do metanol para formação olefinas (O), essa reação exigira sítios ácidos do tipo H-zeolitas (Chabazita), distintos dos sítios necessários para hidrogenação do CO<sub>2</sub> a metanol, “alta” temperatura e força dos sítios ácidos forte para catalisar as reações de oligomerização. Nesse caso de reação em temperaturas altas (340 °C), os catalisadores são óxidos contendo vacâncias aniônicas podem ser usados para ativação do CO<sub>2</sub>. Contudo, o nível de atividade não é determinado apenas pela presença desses dois tipos de sítios no catalisador sólido, vários efeitos podem modificar o caminho reacional e promoverem a reação de hidrogenação, esse efeitos podem ser de diferentes natureza: i) densidade e propriedades redoxi dos sítios óxidos; ii) tamanho das partículas do oxido; iii) tamanho de partícula de zeolitas e iv) propriedades acida da H-zeolita. Os efeitos que contribuem para hidrogenação devem ser identificados e estabelecer as condições de preparação que favoreçam a formação desses sítios. O catalisador multifuncional a serem estudados nessa dissertação deverá ser mistura de catalisadores para hidrogenação seletiva do CO<sub>2</sub> a metanol (CO<sub>2</sub>TM) e catalisador para conversão de metanol a Olefinas (MTO). Os catalisadores para CO<sub>2</sub>TM será óxidos (In<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, ZrO<sub>2</sub>). Os catalisadores para MTO deverão ser do tipo zeolita tipo chabazita. Diferentes métodos de mistura dos catalisadores deverão ser testados como por exemplo: mistura física, dispersão dos sólidos através de moagem em suspensão e uso de suspensões para construção de pellets através de uma impressora 3D.

**Palavras-chaves:** CO<sub>2</sub>, Hidrogenação, Olefinas;

## TEMA PARA DOUTORADO – 1º SEMESTRE DE 2022

**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  $\text{Cl}^-$ ) e negativamente (remoção de  $\text{Na}^+$ ). 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](mailto:pluis@ufscar.br).

**PALAVRAS-CHAVE: Carvão ativado, célula de dessalinização**

## TEMA DE DOUTORADO – EDITAL N° 04/2021

**ÁREA DE PESQUISA: Simulação e Controle de Processos Químicos**

**DOCENTE ORIENTADOR: Marcelo Perencin de Arruda Ribeiro/ Co-orientador: Juliano Lemos Bicas (UNICAMP)**

**TÍTULO: Biosensor for the prediction of amino acid content of meats and protein products using natural pigments as biomarkers**

### **RESUMO**

There is a considerable demand for rapid and low-cost determination of food safety and quality, particularly in the meat and meat products industry since meat authenticity requires appropriate analytical tools. Biosensors have emerged as interesting tools for food quality analysis, offering certain operational advantages over standard photometric methods, such as rapidity, ease-of-use, cost, simplicity, portability, and ease of large scale manufacturing. It is possible to detect either a particular target protein or a broad range of proteins. In this case, genipin and bikaverin are good candidates for reactants to determine amino acid profile, since they react differently with each amino acid, yielding different colored products. Thus, this project aims to investigate a biosensor for adulteration detection in meat products, specifically with other types of meats or additives, using natural pigments – e.g.: genipin (GP) and bikaverin (BK) – as biomarkers. For this purpose, the influence of reaction time, pH, and pigment: amino acid ratio will be evaluated using spectroscopic techniques (UV-Vis and NIR) and a multivariate calibration procedure for detecting the amino acid profile in a matrix after reaction with GP and/or BK. This project will be carried out in collaboration with Dr. Bicas' research group at Faculdade de Engenharia de Alimentos, UNICAMP.

**Palavras-chaves:** biosensor; NIR; UV-vis; meat adulteration; biopigments

## TEMA DE DOUTORADO – EDITAL N° 04/2021

**ÁREA DE PESQUISA: Simulação e Controle de Processos Químicos**

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

**TÍTULO: Sustainability Analysis of Artificially Lit Photobioreactor.**

### RESUMO

Microalgae are photosynthetic microorganisms that can be used to produce commodities as biofuels as well as high added value products as pharmaceuticals and cosmetics. Due to the characteristics of the culture medium, the process can be characterized in the green chemistry scope. The production of microalgae in photobioreactor depends on several factors such as temperature, pH, carbon dioxide and light quality. Light quality is characterized by its intensity and its spectrum profile and can alter the metabolic molecule produced by the photoautotrophic microorganism. In this context, specific products that require fine control of the quality of light need to be produced from artificial light sources, since they can be manipulated at optimal profiles. However, the effect of this electricity consumption on the environmental impact of the overall process must be assessed, since it can compromise its sustainability. Thus, this project aims to create a structure for the analysis of feasibility and sustainability of photobioreactors. In this project, *Scenedesmus* is used as case study. This microalgae is known to have high biomass productivity. Moreover, it produces large amounts of carbohydrates and other specific bioproducts. During this research, the following tasks are proposed: (i) building of mathematical models of the process and defining the optimal light profile; (ii) formulation of state, feasibility and sustainability mapping; (iii) experimental validation the optimized bioprocess. Skills to be developed during the project: Modelling; optimization; fuzzy control; microalgae growth; photobioreactor; Arduino basic programming; Labview basic programming.

**Palavras-chaves:** Modeling; optimization; fuzzy control; microalgae; photobioreactor

## TEMA DE DOUTORADO – EDITAL Nº 04/2021

**ÁREA DE PESQUISA: Sistemas Particulados**

**PROFESSORA: Maria do Carmo Ferreira**

**TÍTULO: Secagem de folhas medicinais do cerrado em tambor rotativo**

### RESUMO

As folhas aromáticas e medicinais são uma importante fonte de constituintes químicos com ações anti-inflamatórias, antioxidantes e anticarcinogênicas. Tais compostos são ingredientes valiosos na composição de medicamentos, produtos alimentícios e cosméticos, entre outros, sendo, portanto, utilizados em diferentes setores industriais. A recuperação dos constituintes bioativos presentes nas folhas para inserção nas cadeias produtivas pode ser efetuada por diferentes métodos extrativos. A operação, contudo, requer a redução prévia dos níveis de umidade das folhas *in-natura*, de forma a viabilizar a padronização da matéria-prima e permitir o armazenamento para a posterior extração. A desidratação é usualmente feita através de processos de secagem térmica, que devem ser conduzidos em equipamentos e condições adequadas para reduzir a degradação dos constituintes termo sensíveis. Essa proposta se insere no contexto de um projeto que visa contribuir para a exploração comercial de plantas do cerrado, bioma característico da região sudeste do Brasil com ampla variedade de espécies vegetais ainda pouco exploradas comercialmente. O objetivo é efetuar uma análise teórico-experimental da secagem de folhas em um secador rotativo de parede perfurada, através da avaliação do efeito das condições de processamento na qualidade do produto seco e na recuperação dos compostos bioativos. O trabalho prevê as seguintes etapas: (i) aprimorar a instrumentação do secador para obtenção de dados dinâmicos de temperatura e umidade das fases fluida e sólida; (ii) avaliar experimentalmente a influência das condições operacionais de secagem na redução de umidade e qualidade do produto seco; (iii) obter extratos vegetais em diferentes solventes e avaliar sua composição em função das condições de secagem; (iv) propor e implementar modelos para a simulação da operação no secador rotativo, visando a estimativa de variáveis de interesse para o controle do processo.

### PALAVRAS-CHAVE:

Transferência de calor e massa, modelos matemáticos, compostos bioativos.

## TEMA DE DOUTORADO – EDITAL Nº 04/2021

**ÁREA DE PESQUISA: Controle Ambiental**

**DOCENTE ORIENTADOR: Mônica Lopes Aguiar**

**TÍTULO: Controle de poluição atmosférica por material particulado superfino da indústria siderúrgica**

### **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.

## TEMA PARA DOUTORADO – EDITAL 04/2021

**ÁREA DE PESQUISA: Engenharia Bioquímica**

**PROFESSORES: Paulo Waldir Tardioli – LabEnz/DEQ/UFSCar**

**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 surfactantes<sup>1</sup>. 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.

**Informações do docente:** ORCID (<https://orcid.org/0000-0002-5011-9881>) e Lattes/CNPq (<http://lattes.cnpq.br/0808991927126468>). Para maiores informações, contacte o professor pelo e-mail [pwtardioli@ufscar.br](mailto:pwtardioli@ufscar.br).

<sup>1</sup>Surfactants 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 DE DOUTORADO – EDITAL Nº 04/2021

**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-chave:** célula a combustível biológica; modelagem matemática; processos eletroquímicos e biológicos

## TEMA DE DOUTORADO – EDITAL N° 04/2021

**ÁREA DE PESQUISA: Engenharia Bioquímica**

**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 o LPFENz (Laboratório de Processos Fermentativos e Enzimáticos) da UNIFEI.

**Palavras-chaves:** xilanases, imobilização de enzimas, hidrolisado de hemicelulose, xilooligossacarídeos.

## TEMA DE DOUTORADO DIRETO – EDITAL N° 04/2021

**ÁREA DE PESQUISA: Reatores Heterogêneo e Catalise**

**DOCENTE ORIENTADOR: José Maria Correa Bueno**

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

**RESUMO:** CO<sub>2</sub> is a molecule present in natural gas and also formed as byproduct of methane reforming. A commercial utilization of this molecule would improve the overall sustainability degree of the natural gas use. The hydrogenation of CO<sub>2</sub> can follow three main pathways: (i) formation of formate (HCOO), which is further hydrogenated to dioxymethylene (H<sub>2</sub>COO), followed by methoxide (H<sub>3</sub>CO) to methanol; (ii) formation of CO following the retro-Water Gas Shift reaction (r-WGS); (iii) CO<sub>2</sub> could be protonated to hydrocarboxyl (COOH) followed by COHOH, which then decomposes to COH, an intermediate to methanol.<sup>1-3</sup> Indeed, the r-WGS pathway appears to be the most energetically favorable process<sup>2</sup> which is a major drawback in the process, since CO<sub>2</sub> and H<sub>2</sub> are consumed to form CO and water. Hence, the suppression of the r-WGS is one of the major challenges in the CO<sub>2</sub> hydrogenation to methanol. The cost-prohibitive In<sub>2</sub>O<sub>3</sub> was found to block the r-WGS pathway due to the arrangement of the vacancies which are selectively activate CO<sub>2</sub> over CO.<sup>3,4</sup> In this project, it will be proposed the synthesis of Cu-based catalysts, their modification and use in the CO<sub>2</sub> reduction to methanol. Copper catalysts have shown high catalytic activity for hydrogenation, but also to WGS and r-WGS. Bueno and coworkers<sup>5</sup> have identified a correlation between Cu<sup>0</sup> /Cu<sup>+</sup> ratio as well as the bond length Cu-O. As it regards the hydrogenation of CO<sub>2</sub>, the role of Cu<sup>0</sup> and Cu<sup>+</sup> is not yet clear and different studies have reached contradictory conclusions on their roles. Indeed, the understanding of the of the CO<sub>2</sub> hydrogenation over the Cu surface needs refinement and fundamental surface studies, which include controlling the electronic properties and the surface species distribution at an atomic level and the electronic properties. The interaction of Cu with the support or an alloys heteroatom might lead to significant changes in these properties. Cu nanoparticles supported in metal oxides with different surface properties, such as SiO<sub>2</sub>, Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, ZrO<sub>2</sub> and CeO<sub>2</sub> will be prepared, seeking to understand the effect of the support. The catalytic activities will be rationalized based on the characterization techniques, with a special attention to the in situ EXAFS. Understanding the surface chemistry on Cu-based catalysts on the CO<sub>2</sub> 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) Caldas, P. C. P.; Gallo, J. M. R.; Lopez-Castillo, A.; Zanchet, D.; C. Bueno, J. M. *Acs Catalysis* 2017, 2419.

**Palavras-chaves:** CO<sub>2</sub>; Hydrogenation; Methanol; CAtalysts