

TEMAS DE MESTRADO

EDITAL Nº 02/2022

ÁREA DE PESQUISA: Engenharia Bioquímica

DOCENTE ORIENTADOR: Adilson José da Silva

TÍTULO: Otimização da produção de ácido 3-hidroxipropiônico por linhagens recombinantes de *E. coli*

RESUMO

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

Palavras-chaves: 3-HP; Ácidos orgânicos; Biorrefinaria; Engenharia metabólica; Biologia Sintética.

ÁREA DE PESQUISA: Termodinâmica e Processos de Separação

PROFESSOR: André Bernardo

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

RESUMO:

Aminoácidos são moléculas orgânicas que contêm um radical amina e um radical carboxila em sua estrutura. São moléculas utilizadas como aditivos à nutrição animal, em suplementação de dietas, como agentes quelantes de fertilizantes e na síntese de medicamentos e cosméticos. Essas moléculas têm uma complexidade estrutural que leva à alta probabilidade de ocorrência de fenômenos como o polimorfismo e o solvatomorfismo. Tais fenômenos podem ter impacto comercial – como na proteção de patentes – e de desempenho – como o prazo de validade e a disponibilidade em formulações. Neste contexto, este trabalho propõe a determinação do equilíbrio sólido-líquido de aminoácidos de interesse industrial em mistura de solventes (água-etanol) e (água-propileno glicol), e em diferentes temperaturas, e o ajuste desses dados experimentais com diferentes modelos termodinâmicos.

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

ÁREA DE PESQUISA: Controle Ambiental

DOCENTE ORIENTADOR: Edson Luiz Silva

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

RESUMO

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

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

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

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

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

ÁREA DE PESQUISA: Controle Ambiental

DOCENTE ORIENTADOR: Edson Luiz Silva

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

RESUMO

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

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

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

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

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

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

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

ÁREA DE PESQUISA: Controle Ambiental

DOCENTE ORIENTADOR: Edson Luiz Silva

TÍTULO: Planejamento experimental e modelagem da produção de hidrogênio e metano via fermentação anaeróbia da água residuária de cervejaria e glicerol

RESUMO

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

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

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

A modelagem de processos é uma ferramenta importante que, entre outros usos, pode ajudar na avaliação matemática de diferentes estratégias de processo, indicando melhores regiões de operação. O efeito das principais condições de processo (pH, concentração inóculo, concentração de substrato) na cinética de produção de biogás e outros metabólitos serão avaliados num planejamento fatorial. Modelo cinético será desenvolvido e ajustado utilizando dados experimentais.

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

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

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

Palavras-chaves: produção de hidrogênio, fermentação anaeróbia, modelo cinético.

ÁREA DE PESQUISA: Reatores Químicos Heterogêneos e Catálise

PROFESSOR: Ernesto Antonio Urquieta-González

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

RESUMO:

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

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, zeólitas, produtos bio-derivados, lignocelulose, processos químicos sustentáveis.

ÁREA DE PESQUISA: SISTEMAS PARTICULADOS

PROFESSOR ORIENTADOR: FÁBIO BENTES FREIRE

TÍTULO: VALORIZAÇÃO DE BIOMASSA ATRAVÉS DA PELLETIZAÇÃO

OBSERVAÇÃO: COORIENTAÇÃO DO PROFESSOR JOSÉ TEIXEIRA FREIRE

RESUMO: A contribuição da biomassa na matriz energética brasileira vem crescendo nos últimos anos, seguindo uma tendência mundial de reaproveitamento de recursos materiais. O incentivo à energia renovável para garantir o crescimento sustentável das economias em todo o mundo redefiniu o papel dos resíduos sólidos e dos bagaços. O presente tema de mestrado visa analisar os efeitos da secagem na qualidade de pellets de biomassa. Uma célula de estudo instrumentada tipo leito fixo, com a possibilidade de reversão do escoamento de ar para melhorar a uniformidade do produto, será usada para prover o conhecimento necessário sobre os diferentes mecanismos de transferência de calor e de massa durante a secagem. A partir desse conhecimento, serão obtidas as condições operacionais para o processamento eficiente e econômico da biomassa. A umidade ideal para a produção dos pellets será determinada experimentalmente, garantindo a qualidade física de resistir à fragmentação e abrasão durante o manuseamento e a estocagem. Após moldagem e prensagem, testes de combustão serão feitos tendo como índice de qualidade o poder calorífico do pellet. Serão avaliados e comparados pellets de bagaço de cana, de borra de café, de malte de cevada e de misturas dessas biomassas. O grupo de pesquisa em sistemas particulados dispõe da infraestrutura completa para o desenvolvimento desse tema dentro do prazo previsto para o mestrado.

PALAVRAS-CHAVE: Energia, leito fixo, biomassa, pellets

ÁREA DE PESQUISA: Engenharia Bioquímica

PROFESSOR ORIENTADOR: Profa. Dra. Fernanda Perpétua Casciatori

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

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

RESUMO

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

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

ÁREA DE PESQUISA: Engenharia Bioquímica

PROFESSOR ORIENTADOR: Profa. Dra. Fernanda Perpétua Casciotori

TÍTULO: Produção de endoglucanase por fungo termofílico cultivado em bagaço de cana: efeito de pré-tratamentos e de diferentes tamanhos de partícula do substrato

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

RESUMO

Nas últimas décadas, o interesse nos sistemas celulolíticos de fungos termofílicos motivou o desenvolvimento de pesquisas visando o uso de suas enzimas em vários setores industriais, como na produção de biocombustíveis, particularmente do etanol de segunda geração. Neste contexto, o cultivo em estado sólido (CES) surge como tipo alternativo de bioprocessos viável e interessante para a produção de celulases, por possibilitar o emprego de rejeitos sólidos agroindustriais como substratos e por proporcionar a obtenção dessas enzimas na própria biorrefinaria. Neste tipo de cultivo, as propriedades físico-químicas do substrato podem interferir de forma significativa sobre os rendimentos do bioprocessos. Neste contexto, o presente trabalho tem como objetivo investigar o efeito de diferentes pré-tratamentos e vários tamanhos de partícula sobre a produção de endoglucanase pelo fungo termofílico *Myceliophthora thermophila* I-1D3b, já reportado na literatura como excelente produtor de tais enzimas, quando cultivado em bagaço de cana-de-açúcar acrescido de farelo de trigo. O emprego de pré-tratamentos antes do cultivo tem potencial de impulsionar a produção de endoglucanase por aumentar a exposição da fração celulósica da fibra. Similarmente, a seleção de tamanhos de partícula de bagaço mais apropriados ao CES pode favorecer a síntese enzimática, havendo que se encontrar o balanço adequado entre o aumento da área superficial para crescimento do fungo e a manutenção da porosidade ótima do meio. Neste projeto, será avaliado o efeito de pré-tratamentos com ácido, com base, hidrotérmico e com ozônio sobre a atividade de endoglucanase obtida de cultivos em escala de frascos. Da mesma forma, diferentes tamanhos de partícula de bagaço serão empregados na composição dos meios nos frascos de cultivo. As condições de cultivo que proporcionarem os melhores resultados em escala de frascos, tanto em termos de pré-tratamento quanto de tamanho de partícula do substrato, serão replicados em escala de biorreator de leito empacotado, tendo em vista avaliar se o resultado se mantém com a ampliação de escala.

PALAVRAS-CHAVE: fermentação em estado sólido; resíduos agrícolas; enzimas; bioprocessos; biocombustíveis.

ÁREA DE PESQUISA: Sistemas Particulados

DOCENTE ORIENTADOR: Francisco Guilherme Esteves Nogueira

TÍTULO: Desenvolvimento de materiais a base de g-C₃N₄ decorados com nanopartículas de Cu e Zn para fotoconversão de CO₂

RESUMO

O desenvolvimento de tecnologias que visem conversão de dióxido de carbono (CO₂) se apresenta como um dos maiores desafios científicos da atualidade diante da problemática ambiental envolvendo os combustíveis fósseis. O excesso de CO₂ na atmosfera relacionado com a queima dos combustíveis fósseis é apontado como a principal causa do aquecimento global, aparecendo no centro dos debates ambientais e discussões da comunidade científica. Neste contexto, o desenvolvimento de materiais fotoativos para a conversão do CO₂ em produtos de interesse industrial, tais como: metanol, metano, monóxido de carbono, ácido fórmico dentre outros pode ser uma alternativa viável, tanto do ponto de vista ambiental quando econômico.

Dentre os semicondutores utilizados para o processo de fotoconversão do CO₂ pode-se destacar os materiais a base de nitreto de carbono grafítico (g-C₃N₄), dado que este é um material que possui uma energia de banda proibida (E_g) em torno de 2,7 eV, sendo assim, fotoativo na região visível do espectro eletromagnético. No entanto, estudos mostram que o g-C₃N₄ *bulk* possui elevado número de folhas de carbono empilhadas e condensadas em sua estrutura, ocasionando uma redução na área superficial específica, bem como no número de sítios ativos disponíveis para a reação, levando a uma perda na eficiência fotocatalítica. Assim, este projeto tem como objetivo desenvolver fotocatalisadores a base de g-C₃N₄ decoradas com Cu ou Zn, em diferentes proporções, através dos métodos impregnação por via úmida e deposição por pulverização catódica (*DC-magnetron sputtering*), visando melhorar as propriedades fotocatalíticas desses materiais.

Palavras-chaves: Nitreto de Carbono Grafítico; Dióxido de Carbono; Fotocatálise.

ÁREA DE PESQUISA: Controle Ambiental

DOCENTE ORIENTADOR: Gabriela Cantarelli Lopes

TÍTULO: Estudo numérico do processo de separação supersônica de contaminantes do gás natural do pré-sal

RESUMO

O gás natural do pré-sal contém quantidades significativas de vapor d'água e outros contaminantes, tais como enxofre, gás sulfídrico (H_2S) e outros gases inertes (como CO_2 e N_2). A presença desses contaminantes, além de diminuir o poder calorífico do gás, acarretam em perdas de energia e corrosão dos dutos durante o seu transporte das plataformas até as unidades de processamento. Desta forma, é importante remover o máximo desses componentes ainda nas plataformas de extração. Atualmente, os métodos de separação mais comuns incluem operações de absorção, adsorção e separação por membrana. No entanto, esses métodos são, muitas vezes, inviabilizados devido aos altos níveis de CO_2 presentes no gás natural do pré-sal e das altas vazões de trabalho. Uma nova tecnologia que vem sendo aplicada para a remoção de compostos contaminantes do gás natural é a separação supersônica, que pode ser aplicada tanto para a remoção de água e hidrocarbonetos pesados, quanto dos gases ácidos, como CO_2 e H_2S . Os separadores supersônicos possuem algumas vantagens em relação às outras tecnologias mencionadas, tais como o fato de não necessitarem do uso de produtos químicos ou de sistemas de regeneração. Além disso, são equipamentos estáticos (sem peças rotativas), que possuem baixo tempo de residência e que ocupam muito menos espaço do que as outras unidades, sendo esta característica de grande importância para a indústria de óleo e gás offshore. Apesar de ser uma técnica de separação muito promissora, ela ainda tem sido pouco aplicada no processamento offshore do gás natural, uma vez que o projeto e operação desses equipamentos são limitados devido às complexidades do escoamento, que incluem condensação, evaporação, alta vorticidade, turbulência e presença de ondas de choque. Uma ferramenta que vem sendo usada para auxiliar nesta tarefa é a Fluidodinâmica Computacional (CFD), que permite a simulação detalhada de escoamentos complexos. Alguns estudos sobre a otimização de separadores supersônicos são encontrados na literatura. No entanto, a maioria deles se limita à simulação do escoamento do gás (incluindo a expansão supersônica), ou consideram o gás como sendo incompressível e estudam a dispersão das gotículas ou a transferência de massa por condensação/evaporação. Assim, há uma falta de estudos de CFD que sejam capazes de prever, de forma mais completa, o processo de separação supersônica, combinando a formação de turbilhão, a nucleação e crescimento das gotículas, bem como os fenômenos de colisão, quebra e coalescência. Neste sentido, este projeto propõe o uso de CFD para a simulação mais detalhada de separadores supersônicos, visando melhorar o desempenho de separação de contaminantes do gás natural do pré-sal.

Palavras-chaves: Separador supersônico; gás natural; pré-sal; Fluidodinâmica computacional; monetização.

ÁREA DE PESQUISA: Controle Ambiental

DOCENTE ORIENTADOR: Gabriela Cantarelli Lopes

TÍTULO: Estudo numérico de reatores de Fischer-Tropsch para produção de combustíveis limpos de aviação

RESUMO

Os reservatórios do pré sal apresentam enorme potencial de fornecimento de gás natural (GN). Tradicionalmente, esse gás tem sido usado para o fornecimento do mercado energético na forma de gás liquefeito do petróleo (GLP). Mais recentemente, tem se observado um interesse crescente em converter o GN em hidrocarbonetos líquidos, que são mais fáceis de transportar e que podem ser usados como combustíveis limpos. Esta transformação ocorre por meio de um processo conhecido como Fischer-Tropsch (F-T), onde o gás de síntese (H_2 e CO) pode ser transformado em hidrocarbonetos com cadeias de tamanhos diversos. Em comparação aos combustíveis obtidos a partir da exploração do petróleo, os combustíveis sintetizados pelo processo de F-T não possuem compostos sulfurosos, nitrogênio ou metais pesados. Além disso, possuem baixos teores de compostos aromáticos, o que confere boa qualidade aos combustíveis produzidos. O querosene de aviação produzido por este processo (também conhecido como querosene parafínico sintético ou bioquerosene), por exemplo, tem propriedades quase idênticas, ou em alguns casos superiores, às do combustível fóssil de aviação, e sua combustão produz menos emissões de CO_2 do que a sua versão fóssil. O tipo de combustível produzido pela tecnologia de F-T irá depender de uma série de fatores, como do tipo de reator, das condições de operação e do catalisador empregados. Hidrocarbonetos pesados na forma líquida, como os usados como combustível de aviação, são sintetizados, principalmente, em reatores trifásicos, operando a temperaturas mais baixas. Os reatores de leito de lama são os mais empregados para este fim. Neste tipo de reator, as partículas de catalisador são suspensas em uma fase líquida, através da qual o gás de síntese é borbulhado. O projeto adequado do reator desempenha um papel crucial na eficiência do processo de F-T, uma vez que a cinética de reação está intrinsecamente ligada à dinâmica do escoamento, que é bastante complexa em reatores de leito de lama. Neste sentido, a Fluidodinâmica Computacional (CFD) pode ser usada como uma ferramenta útil no projeto deste tipo de reator, bem como no melhoramento do seu desempenho. Desta forma, é proposto neste projeto, o estudo da dinâmica do escoamento em reatores de leito de lama para a produção de querosene parafínico de aviação pelo processo de F-T, com foco no melhoramento do processo. Pretende-se avaliar os modelos mais adequados para a representação do processo e propor melhorias no projeto desses reatores.

Palavras-chaves: Fischer-Tropsch; Fluidodinâmica computacional; combustíveis limpos; querosene parafínico sintético; aviação.

ÁREA DE PESQUISA: Reatores Químicos Heterogêneos e Catálise

DOCENTE ORIENTADOR: Janaina Fernandes Gomes

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

RESUMO

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

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

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

ÁREA DE PESQUISA: Reatores Químicos Heterogêneos e Catálise

DOCENTE ORIENTADOR: João Batista Oliveira dos Santos

TÍTULO: Produção de materiais estruturados e energia limpa via decomposição catalítica do metano

RESUMO

A produção de materiais estruturados, ou seja, nanotubos de carbono e energia limpa pode ser feita pela decomposição do metano utilizando um catalisador metálico suportado. A energia limpa consiste no Hidrogênio, que é produzido sem a presença de contaminantes, tais como CO e CO₂, evitando assim etapas de purificação e diminuindo os custos com o processo. Os metais (Fe, Ni, Co), em conjunto com os suportes (alumina, sílica, magnésia e zircônia), são os mais utilizados na decomposição do metano. Single-walled carbon nanotubes (SWNTs) e multi-walled carbon nanotubes (MWNTs) podem ser produzidos dependendo das condições reacionais e do catalisador empregado. O crescimento de carbono sobre a superfície de um catalisador depende de vários fatores, como por exemplo: tipo e teor do metal, tamanho médio da partícula metálica, interação metal-suporte e velocidade de difusão do carbono. O catalisador de Ni é o mais ativo para a decomposição do metano e mostra elevada atividade em temperaturas entre 450 e 500 °C. O Cobalto apresenta baixa atividade catalítica e a produção de nanotubos de carbono é bem menor em relação ao catalisador de Ni. O catalisador de Ferro é interessante para a produção de nanotubos de carbono, mas a reação de decomposição do metano deve ser realizada em temperaturas acima de 650 °C. A utilização de catalisadores bimetálicos ou a utilização de promotores pode aumentar a produção de nanotubos de carbono. Por exemplo, a adição de Cu ao catalisador de Ni aumenta a produção de nanotubos de carbono de 22 para 525 g de carbono por g de catalisador. A adição de Pd ao catalisador de Ni resultou na maior produção de nanotubos de carbono, cerca de 1170 g de carbono por g de catalisador. Portanto, para se obter elevada conversão do metano em hidrogênio e produzir nanotubos de carbono é essencial encontrar um catalisador com elevada atividade e estabilidade. O objetivo desse trabalho é desenvolver um catalisador bimetálico e otimizar o processo de produção de nanotubos de carbono.

Palavras-chaves: Metano; hidrogênio; nanotubos de carbono

ÁREA DE PESQUISA: Reatores Químicos Heterogêneos e Catálise

DOCENTE ORIENTADOR: José Maria Correa Bueno

TÍTULO: Produção de Hidrocarbonetos a partir de CO₂

RESUMO

As emissões atmosféricas de CO₂ 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 CO₂ 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 CO₂ à metanol, necessita de sítios ativação do CO₂ e sítios para ativação do H₂. 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 distintos dos sítios necessários para hidrogenação do CO₂ a metanol, baixa temperatura e força dos sítios ácidos forte para catalisar as reações de oligomerização. Nesse caso de reação em temperaturas altas (340 °C), sítios metálicos podem ser utilizados para a quebra da molécula de H₂, e óxidos contendo vacâncias aniônicas podem ser usados para ativação do CO₂. 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) geração de sítios redox em interface metal-óxidos;; ii) densidade e propriedades redoxi dos sítios óxidos; iii) formação de ligas, iv) tamanho das partículas de metal; v) tamanho de partícula de óxidos e vi) afinidade do metal para formação de interfaces do tipo M1- OM2, sendo M1 sitio metálico e M2 cátion metálico. 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 CO₂ a metanol (CO₂TM) e catalisador para conversão de metanol a dimetil éter (MTDME). Os catalisadores para CO₂TM será metal tipo Cu suportado em óxidos (In₂O₃, ZrO₂, preparados pelo método de impregnação-coprecipitação. Os catalisadores para MTDEM deverão ser do tipo Zn(Al,Ga)₂O₄ ou 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: CO₂; Metanol; Catalise; catalisador de Cu; Cu-In₂O₃

ÁREA DE PESQUISA: Sistemas Particulados
Laboratório de Tecnologias Ambientais

PROFESSOR: Luís A. M. Ruotolo

TÍTULO: Produção de Água Potável através da 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.

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: Sistemas Particulados

PROFESSORA: Maria do Carmo Ferreira

Processamento de biomassas para geração de energia: avaliação de dispositivo tipo jorro para alimentação de resíduos de indústria madeireira em reator pneumático circulante (Opção 1)

RESUMO

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

PALAVRAS-CHAVE:

Ângulos de repouso; funções de fluxo; serragem, transporte pneumático.

ÁREA DE PESQUISA: Sistemas Particulados

PROFESSORA: Maria do Carmo Ferreira

Secagem de folhas medicinais do cerrado em tambor rotativo (Opção 2)

RESUMO

As folhas aromáticas e medicinais constituem importante fonte de compostos químicos com ações anti-inflamatórias, antioxidantes e anticarcinogênicas, os quais são ingredientes valiosos na composição de medicamentos, alimentos industrializados e cosméticos, entre outros. Os constituintes bioativos presentes nas folhas podem ser recuperados através de métodos extrativos adequados para inserção nas cadeias produtivas dos diferentes setores industriais. 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 seu armazenamento até o processamento subsequente. A desidratação é usualmente feita através de processos de secagem térmica, que devem ser conduzidos em condições adequadas para minimizar a degradação e perda dos inúmeros 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, bem como avaliar diferentes métodos de aquecimento na secagem (ar aquecido, ar aquecido com intermitência, infravermelho). 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) comparar a secagem sob diferentes métodos de aquecimento; (iv) obter extratos vegetais em diferentes solventes e avaliar sua composição em função das condições de secagem.

PALAVRAS-CHAVE:

Transferência de calor e massa, extratos vegetais, compostos bioativos.

ÁREA DE PESQUISA: *Controle Ambiental*

PROFESSOR ORIENTADOR: *Mônica Lopes Aguiar*

TÍTULO: *Caracterização de meios filtrantes e máscaras de EPI's utilizados na filtração de ar de alta eficiência na retenção de material particulado fino, de vírus e de outros contaminantes.*

RESUMO:

Durante a pandemia causada pelo vírus SARS-CoV-2 (COVID-19), a demanda por EPIs aumentou exponencialmente. Isso levou a uma necessidade (mundial) de EPIs, como máscaras, que utilizem meios filtrantes (MF) eficientes e menos dispendiosos, garantindo o acesso e o uso da população. No entanto, há uma falta de informações sobre a eficiência de coleta de aerossóis nanométricos (nm) e micrométricos (μm) por materiais têxteis (MF) utilizados na fabricação de EPIs (p. ex., máscaras, membranas de filtração, etc.) e de meios filtrantes empregados na filtração de ar; uma vez que os vírus têm um tamanho entre 20 e 400 nm, bactérias entre 0,2 e 2,0 μm e esporos de fungos, 2,0 a 8,0 μm . Além destes bioaerossóis, as partículas menores que 2,5 μm , provocam sérios problemas de saúde. Portanto, as características do material utilizado na fabricação de máscaras e meios filtrantes são extremamente importantes, porque precisam ter alta eficiência na remoção destes materiais particulados e permeabilidade adequada à passagem de ar. A contaminação por patógenos é um dos principais problemas enfrentados pelos profissionais que trabalham em ambientes hospitalares, centros cirúrgicos e outras áreas contaminadas. Estudos recentes também revelaram que os sistemas de ventilação e ar condicionado podem ser um meio de transmissão do novo SARS-CoV-2. Assim uma maneira bastante eficaz de evitar ou amenizar tal contaminação é utilizar materiais filtrantes ou de proteção, como os de ar condicionado, sistemas de ventilação interno, respiradores mecânicos, máscaras, entre outros. Desta forma, a seleção e utilização apropriadas do material filtrante que compõe esses meios filtrantes são extremamente importantes. Entretanto, a escolha do meio filtrante não é uma tarefa fácil e precisa ser melhor abordada. Devido à escassez de serviço especializado para caracterizar os materiais filtrantes para ar, bem como uma norma bem definida para estes tipos de materiais de proteção, este trabalho tem como objetivo estabelecer protocolos de caracterização de materiais filtrantes, tanto no que diz respeito a testes físicos como de desempenho, buscando inovação no desenvolvimento de metodologias adequadas para caracterizá-los para as diversas aplicações. Espera-se propor procedimentos para tais testes, a fim de se obter resultados mais eficientes e próximos da realidade na tomada de decisões tanto na fabricação destes materiais, bem como na sua compra, porque a vida das pessoas depende disto.

PALAVRAS-CHAVES: Poluição do ar, Meios Filtrantes, Nanopartículas, Alta Eficiência, caracterização, nanoaerossóis.

ÁREA DE PESQUISA: *Controle Ambiental*

DOCENTE ORIENTADOR: *Mônica Lopes Aguiar*

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

RESUMO

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

PALAVRAS-CHAVES: Meios filtrantes, nanopartículas, nanofibras, filtros de ar, atividade biocida.

ÁREA DE PESQUISA: SISTEMAS PARTICULADOS

PROFESSOR: RODRIGO BÉTTEGA

TÍTULO: SIMULAÇÃO CFD DA SECAGEM CONVECTIVA DE MINÉRIO DE MANGANÊS

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

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

e-mail para contato: bettega@ufscar.br

ÁREA DE PESQUISA: Simulação e Controle de Processos Químicos

DOCENTE ORIENTADOR: Prof. Dr. Ruy de Sousa Júnior

TÍTULO: Modelagem matemática e simulação computacional de células a combustível biológicas aplicadas ao tratamento de efluentes

RESUMO

Sistemas bioeletroquímicos, como células a combustível microbianas (MFCs), são dispositivos que exploram a capacidade de microrganismos exoeletrogênicos para transferir elétrons. Ao longo dos últimos anos, as MFCs têm recebido crescente interesse devido à abordagem sustentável para o tratamento de águas residuais, juntamente com o uso como sistemas alternativos para geração de energia. MFCs podem converter em corrente elétrica a energia química contida nos substratos orgânicos presentes em águas residuais. Recentemente, alguns estudos experimentais foram realizados usando efluentes de refinaria de petróleo em MFCs. As águas residuais de refinarias de petróleo são poluentes ambientais se o tratamento não for adequado. Um dos parâmetros mais importantes de uma MFC é a sua curva de polarização, que é usada para avaliar o desempenho com base na geração de energia elétrica. Uma curva de polarização representa a tensão em função da corrente. A MFC é um sistema relativamente complexo que envolve processos bioeletroquímicos, transferência de carga, massa e energia. Assim, tendo como base dados experimentais disponíveis na literatura (de tensão da célula versus densidade de corrente elétrica, principalmente), desenvolver-se-á um trabalho de modelagem matemática para uma célula a combustível biológica. Mais especificamente, pretende-se aplicar um modelo unidimensional simples de estado estacionário, considerando a transferência acoplada de calor, carga e massa, juntamente com as reações bioeletroquímicas que ocorrem em uma MFC, na previsão do desempenho de uma MFC usada no tratamento de água residual de refinaria de petróleo. A abordagem pode ser estendida a MFCs aplicadas ao tratamento de águas residuais de biorrefinarias de bioetanol/biodiesel. Utilizar-se-á o software Scilab (ou o Matlab) para a implementação do modelo, ajuste de seus parâmetros e solução das suas equações. O modelo poderá prever as tendências para a influência da densidade de corrente na tensão da célula, bem como a influência da concentração do(s) substrato(s) no desempenho da MFC.

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

ÁREA DE PESQUISA: Engenharia Bioquímica

DOCENTE ORIENTADOR: Teresa Cristina Zangirolami

TÍTULO: Aplicação de processo racional para a purificação de proteína recombinante obtida em plataforma de expressão detoxificada

RESUMO

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

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

ÁREA DE PESQUISA: Engenharia Bioquímica

DOCENTE ORIENTADOR: Teresa Cristina Zangirolami

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

RESUMO

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

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

ÁREA DE PESQUISA: Controle Ambiental

DOCENTE ORIENTADOR: Vádila Giovana Guerra Béttega

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

RESUMO

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

Palavras-chaves: Filtração; nanofibras; nanopartículas; eletrofiação