

Projeto 1 – Estudo das modificações no ambiente eletrônico da superfície (até 10nm) e da interface dos materiais (metálicos ou não) por espectroscopia de fotoelétrons excitados por raios-X(XPS).

Introdução

A espectroscopia fotoeletrônica por raios X (XPS) é uma técnica extremamente relevante para a análise de superfícies de poucas camadas atômicas e é uma ferramenta essencial tanto para a nanociência, como para a nanotecnologia. A técnica é voltada para a identificação e quantificação de elementos químicos na superfície dos materiais (em uma superfície até 10 nm). Além disso, possui um diferencial das demais técnicas, pois é capaz de determinar os diferentes estados de oxidação dos elementos, permitindo um estudo do comportamento de suas interações e interfaces. Um número infinito de aplicações é encontrado, principalmente, nas áreas de materiais, catálise, corrosão, polímeros, etc. Especialmente na área de catálise, as espécies metálicas ou óxidas são os sítios ativos de inúmeras reações químicas de grande relevância. Em muitos casos, elementos químicos como o rutênio, o vanádio, o nióbio, o cério, o zinco, prata e níquel, zircônio, entre outros são o objeto de investigação e as interações entre as interfaces metálicas ou óxidas de composições entre esses elementos é um grande desafio. Muitos desses elementos são ditos não convencionais pois produzem espectros com linhas que carregam interferências quando passam pelo processo de excitação fotoeletrônica. O tratamento dos dados gerados pela técnica de XPS e a interpretação do espectro obtido pressupõe o conhecimento avançado do software CASAXPS e dos fundamentos teóricos que envolvem a técnica e norteia as atividades em P&D¹⁻⁶. Neste viés, o sucesso das linhas de pesquisa em andamento no INT, passa pelo domínio e conhecimento das propriedades físico-químicas da superfície e das interações entre os materiais. Sendo assim, o desenvolvimento de uma metodologia para a especificação elementar e o domínio do tratamento dos dados gerados, com base no uso avançado do software CASAXPS é essencial para trazer a luz do conhecimento questões que envolvem problemas ocorridos nas indústrias de transformação e energia. A natureza do ambiente eletrônico elementar na superfície dos catalisadores de refino (níquel), oxidação de propano (vanádio) e redução do CO₂ (prata), na hidrogenação do benzeno (rutênio) e nos processos de corrosão (ferro e nitretos) irá definir os mecanismos de reação, desativação, desempenho, regeneração e sinterização, o que impacta diretamente na performance destes materiais. Dentro das atividades de pesquisa a que se propõe este projeto destacam-se os temas já em estudo: uso do CO₂ para a obtenção de combustível e derivados químicos, hidrogenação parcial do benzeno e oxidação do propano. Neste escopo, está em andamento atividades em P&D que utilizam a técnica por XPS para avaliar catalisadores contendo em sua formulação elementos como prata, vanádio, rutênio, titânio, molibdênio, cério, entre outros. Em suma, este projeto busca solução de problemas físico-químicos dos materiais que figuram como desafios na atividade industrial de produção de petróleo e no aproveitamento dos recursos oriundos das atividades do pré-sal, como é o caso do aproveitamento do CO₂.

Objetivo Geral

O presente projeto tem como objetivo geral desenvolver metodologias para o estudo das alterações eletrônicas na superfície dos catalisadores e/ou materiais através da técnica de espectroscopia de fotoelétrons excitados por raios X (XPS) e pelo uso avançado do software CASAXPS.

Objetivo Específico 1: Realizar buscas em bases de periódicos sobre divulgação recente, sobre o emprego da técnica de XPS e interpretação sobre, principalmente, catalisadores e/ou materiais contendo os elementos rutênio, vanádio e prata em sua formulação.

Objetivo Específico 2: Determinar a composição elementar com base, na aquisição dos dados gerados pela técnica de XPS e de seu tratamento com base no uso avançado do software CASAXPS.

Objetivo Específico 3: Realizar a interpretação dos dados obtidos, com base no acervo levantado no objetivo específico 1 e apresentar a metodologia utilizada para a identificação da superfície dos materiais investigados.

Objetivo Específico 4: Consolidar o conhecimento através de registro em relatórios intermediários e reuniões periódicas, abordando os resultados dos objetivos 1 a 3.

Objetivo Específico 5: Divulgar os resultados para a comunidade científica, por meio da participação em eventos, submissão de artigos em periódicos, cursos e editais de fomentos para apoio ao desenvolvimento e transferência do conhecimento acerca da técnica de espectroscopia de elétrons excitados por raios X (XPS).

Modalidade de Bolsas

Formação Acadêmica / Titulação	Área de Experiência	Objetivo Específico	PCI categoria/nível	Meses	quantidade
Graduação	Química e/ou Engenharia química	1 a 5	D-D	60	1

Atividades de Execução

Atividades	Objetivo Específico	Indicadores	Metas				
			2019	2020	2021	2022	2023
Levantamento em bases de periódicos	1	Relatório contínuo sobre o levantamento bibliográfico	2	2	2	2	2

Determinar a composição elementar por XPS- uso do software CasaXPS	2	Relatório parcial com o tratamento dos espectros obtidos	1	1	1	1	1
Realizar a interpretação dos dados obtidos	3	Relatório apresentando a interpretação dos espectros	1	1	1	1	1
Consolidação e divulgação dos resultados	4	Divulgação dos resultados em eventos externos e internos	1	x	1	x	1
Submissão de artigos em periódicos indexados	5	Artigos submetidos		1	x	1	x

Cronograma de Atividades

Atividades	Semestre									
	2019		2020		2021		2022		2023	
	1	2	1	2	1	2	1	2	1	2
Levantamento em bases de periódicos	x		x		x		x		x	
Determinar a composição elementar por XPS- uso do software CasaXPS		x		x		x		x	x	
Realizar a interpretação dos dados obtidos			x		x		x	x	x	
Consolidação e divulgação dos resultados		x		x		x		x		x
Submissão de artigos em periódicos indexados						x				x

Produtos

Produtos	Objetivo Específico	Indicadores	Metas					
			2019	2020	2021	2022	2023	

Relatório do estado da arte do uso da técnica de XPS com (Ru/V/Ag/Ti)	1	Número de relatórios entregues=5	1	1	1	1	1
Espectros gerados/interpretados com uso da técnica XPS (Ru/V/Ag/Ti/Zn/Zr)	2 e 3	Número de espectros gerados e tratados=100	20	20	20	20	20
Participação em eventos-visibilidade e network	4	Número de participação em eventos (externos e internos)=13	4	2	3	2	3
Submissão de artigos em periódicos especializados na área	5	Número de artigos submetidos=2			1		1

Resultados Esperados

Resultados	Objetivo Específico	Indicadores	Metas				
			2019	2020	2021	2022	2023
Metodologia de especiação elementar da superfície dos catalisadores e materiais contendo principalmente os elementos (Ru/V/Ag/Ti/Zn e Zr)	1 a 4	a) Relatório parcial; b) Relatório final;	1	1	1	1	1

Capacitação do Bolsista e transferência de conhecimento para a Instituição	4 e 5	Participação em workshop interno da Divisão de Catálise do INT, no seminário Interno de Avaliação dos Bolsistas PCI.	1	1	1	1	1
Visibilidade nacional, internacional e network científico	4 e 5	Participação em congressos nacionais e/ou internacionais e/ou em co-autoria de artigos submetidos para periódicos	1	-	1	-	1

Referências Bibliográficas

- [1] Introdução à técnica de espectroscopia fotoeletrônica por raios X”- (“ISBN 978-85-61325-61-9).
- [2] Introdução à técnica de espectroscopia fotoeletrônica por raios X: Tratamento dos dados gerados- tutorial do software XPS- (“ISBN 978-85-68483-10-7).
- [3] Propane oxidation by vanadium supported on activated carbon from sugarcane straw. Virgílio J.M. Ferreira Neto , Thiago de S. Belan Costa , André L. L. Magalhães , Alexandre B. Gaspar , Paulo G. Pries de Oliveira, Fabiana M. T. Mendes, *Molecular Catalysis* (2017), <http://dx.doi.org/10.1016/j.mcat.2017.11.010>.
- [4] Pedro Fonseca Teodoro, Carla Ramos Moreira, Marcia Gomes Oliveira, Fernanda Cristina Fernandes Braga, Javier Alejandro Carreno Velasco, Marcelo Ferreira Leão de Oliveira e Fabiana Magalhães Teixeira Mendes, Anais do XVI Encontro Regional da Sociedade Brasileira de Química, PUC, Rio de Janeiro, 05 a 08 de dezembro de 2017.
- [5] P. C. Silva Neto, , F. G. R. Freitas, D. A. R. Fernandez, R. G. Carvalho, L. C. Felix, A. R. Terto, R. Hubler, , F. M. T. Mendes, A. H. Silva Junior, E. K. Tentardini, *Surface & Coatings Technology* 353 (2018) 355–363, <https://doi.org/10.1016/j.surfcoat.2018.07.106>.
- [6] Carla Ramos Moreira, Pedro F. Teodoro, Marcelo F. L. de Oliveira, Fernanda C. F. Braga, Marcia G. Oliveira, Javier A.C. Velasco, Fabiana M. T. Mendes "*Synthesis and characterization of silver nanoparticles supported on activated carbon for electrode preparation*", 16th ICCDU

Congress - International Congress on Carbon Dioxide Utilization-27 a 30 de agosto de 2018, Rio de Janeiro-RJ.

Projeto 2: Caracterização de materiais através de técnicas microscopia eletrônica de varredura (MEV/FEG/FIB) e de microanálise correlacionadas (EDS/EBSD).

Introdução

A microscopia eletrônica de varredura é uma ferramenta muito importante no âmbito da pesquisa focada em caracterização de materiais utilizados na indústria. O Microscópio Eletrônico de Varredura (MEV) é um equipamento que permite uma análise microestrutural mais aprofundada do que aquela que pode ser obtida com o uso de um microscópio ótico. Seu funcionamento baseia-se na emissão de elétrons, a partir de uma fonte, que pode ser um filamento de tungstênio ou um canhão de emissão de elétrons pela aplicação de um campo elétrico a partir de um canhão filamento ("Field Emission Gun": FEG: canhão de emissão por campo), de tal modo que esses elétrons primários colidem com a superfície de uma amostra, interagindo com a mesma. Como resultado desta interação são gerados diferentes tipos de sinais (elétrons secundários, elétrons retroespalhados e espectros de energia dispersiva de raios X), os quais são coletados, e, como consequência de uma varredura executada sobre uma determinada área da amostra, permitem a geração de imagens, com grande profundidade de campo, desta superfície, e também a determinação qualitativa da composição química da amostra e eventualmente também a análise cristalográfica. Mais recentemente desenvolveu-se a microscopia eletrônica de varredura com feixe de íons focalizados ("Focused Ions Beam"; FIB) como importante ferramenta para a análise de camadas e revestimentos em materiais.

Entre os resultados obtidos com o uso do MEV podem ser mencionados a geração e captura de imagens com resolução muito superior à do microscópio ótico, com aumentos de até 50.000 X (através dos elétrons secundários), imagens com contraste de fase (através dos elétrons retroespalhados), imagens fractográficas (a visualização de superfícies de fratura é beneficiada pela grande profundidade de campo), a determinação qualitativa dos elementos químicos presentes numa amostra (através dos espectros de energia dispersiva de raios X obtidos com uma microsonda, também conhecida como EDS ou EDX), assim como a análise cristalográfica por EBSD ("Electron Back Scattering Diffraction": Difração de Elétrons Retroespalhados), que permite a obtenção de dados sobre diferenciação de fases com diferentes estruturas cristalinas, determinação de planos/direções/texturas cristalográficas e de tamanho médio de cristais [1-3].

Como os conhecimentos sobre a microestrutura de materiais são fundamentais para compreender e melhorar as propriedades mecânicas destes, o uso do MEV e de suas técnicas correlatas tornou-se, há muito tempo, uma ferramenta de vital importância na análise e desenvolvimento de materiais, metálicos, poliméricos e cerâmicos para diferentes tipos de aplicações industriais, desde a indústria de petróleo e gás natural, até os implantes cirúrgicos ortopédicos, odontológicos e outros biomateriais.

Aços inoxidáveis são ligas à base de Fe-Cr ou Fe-Cr-Ni desenvolvidas desde as primeiras décadas do século XX com propriedades que conjugam basicamente excelente resistência à corrosão com boa resistência mecânica, com a finalidade de serem submetidas a diversos tipos de aplicações para as quais estes requisitos químicos e mecânicos são de fundamental importância [4-7].

De acordo com diversas fontes da literatura técnica especializada, os aços inoxidáveis são classificados inicialmente em alguns grandes grupos, de acordo com as fases que predominam

em sua microestrutura. Assim, esses aços são conhecidos como: ferríticos, austeníticos, martensíticos, duplex e endurecíveis por precipitação. E em cada grupo destes, os diferentes aços com diferentes teores de elementos de liga/composição química são designados por uma numeração de acordo com o sistema de classificação AISI-SAE estabelecido por essas associações técnicas: American Institute of Steel and Iron (AISI) e Society of American Engineers (SAE). Neste sistema, o aço inoxidável ferrítico contendo cerca de 17 % de cromo é conhecido como AISI-SAE 430 [3-4].

O aço inoxidável ferrítico 430 é usado em diversas aplicações: cunhagem de moedas, grades externas de aparelhos de ar condicionado, componentes de eletrodomésticos, adornos de automóveis, calhas, revestimento da câmara de combustão para motores diesel, equipamentos para fabricação de ácido nítrico, fixadores, aquecedores, portas para cofres, pias e cubas, baixelas, utensílios domésticos e revestimentos de elevadores, entre outras [5-6].

As amostras aço inox 430 serão submetidas às análises de microscopia ótica, microscopia eletrônica de varredura (MEV/EDS/EBSD) e ensaios de dureza na escala Vickers. Acredita-se que os resultados possam revelar modificações na microestrutura, causadas pelos tratamentos térmicos, que possam variar de acordo com as diferentes condições de tratamento, alterando suas propriedades e consequentemente afetando suas potenciais aplicações.

Objetivo Geral

O presente projeto tem como objetivo geral desenvolver metodologias para a caracterização do aço inoxidável ferrítico AISI-SAE 430 por obtenção de imagens por MEV/FEG/FIB e de dados de microanálise química e cristalográfica por EDS/EBSD.

Objetivo Específico 1: Realizar buscas em bases de periódicos sobre divulgação recente, sobre o emprego das técnicas de MEV/FEG/FIB e EDS/EBSD em geral e também para a caracterização da microestrutura do aço inoxidável ferrítico AISI-SAE 430.

Objetivo Específico 2: Realizar tratamentos térmicos de recozimento (temperaturas de 900, 1000 e 1100°C e tempos de 1, 2 e 3 horas no aço inox 430.

Objetivo Específico 3: Caracterizar a microestrutura do aço inoxidável ferrítico AISI-SAE 430 por MEV (imagens), EDS e WDS (composição química) e EBSD (características cristalográficas).

Objetivo Específico 4: Realizar ensaios de dureza na escala Vickers (HV) com carga de 1, 5 ou 10 kgf.

Objetivo Específico 5: Registro e divulgação; Consolidar o conhecimento através de registro em relatórios intermediários e reuniões periódicas, abordando os resultados dos objetivos 1 a 4; Divulgar os resultados para a comunidade científica, por meio da participação em eventos, submissão de artigos em periódicos, cursos e editais de fomentos à pesquisa.

Modalidade de Bolsas

Formação Acadêmica / Titulação	Área de Experiência	Objetivo Específico	PCI categoria/nível	Meses	quantidade
Graduação	Química e/ou Engenharia química, mecânica, de materiais e metalúrgica	1 a 5	D-D	60	1

Atividades de Execução

Atividades	Objetivo Específico	Indicadores	Metas				
			2019	2020	2021	2022	2023
Levantamento em bases de periódicos	1	Relatório contínuo sobre o levantamento bibliográfico	2	2	2	2	2
Realizar tratamentos térmicos de recozimento (temperaturas de 900, 1000 e 1100°C e tempos de 1, 2 e 3 horas no aço inox 430.	2	Relatório apresentando a metodologia dos tratamentos térmicos	1	1	1	1	1
Caracterizar a microestrutura do aço inoxidável ferrítico AISI-SAE 430 por MEV (imagens), EDS e WDS (composição química) e EBSD (características cristalográficas).	3	Relatório apresentando as imagens de MEV, os espectros e mapas de EDS e os mapas de EBSD	1	1	1	1	1

Realizar ensaios de dureza na escala Vickers (HV) com carga de 1, 5 ou 10 kgf.	4	Relatório apresentando os resultados dos ensaios de dureza HV	1	1	1	1	1
Registro e divulgação.	5	Relatórios e artigos			1		1

Cronograma de Atividades

Atividades	Semestre										
	2019		2020		2021		2022		2023		
	1	2	1	2	1	2	1	2	1	2	
Levantamento em bases de periódicos	x				x					x	
Realizar tratamentos térmicos de recozimento (temperaturas de 900, 1000 e 1100°C e tempos de 1, 2 e 3 horas no aço inox 430).	x	x									
Caracterizar a microestrutura do aço inoxidável ferrítico AISI-SAE 430 por MEV (imagens), EDS e WDS (composição química) e EBSD (características cristalográficas).			x		x		x			x	
Realizar ensaios de dureza na escala Vickers (HV) com carga de 1, 5 ou 10 kgf.		x	x								
Registro e divulgação						x					x

Produtos

Produtos	Objetivo Específico	Indicadores	Metas					
			2019	2020	2021	2022	2023	

Levantamento em bases de periódicos	1	Número de relatórios entregues=3	1		1		1
Realizar tratamentos térmicos de recozimento (temperaturas de 900, 1000 e 1100°C e tempos de 1, 2 e 3 horas no aço inox 430.	2	Número de relatórios entregues=1	1				
Caracterizar a microestrutura do aço inoxidável ferrítico AISI-SAE 430 por MEV (imagens), EDS e WDS (composição química) e EBSD (características cristalográficas).	3	Número de relatórios entregues=3	1		1		1
Realizar ensaios de dureza na escala Vickers (HV) com carga de 1, 5 ou 10 kgf.	4	Número de relatórios entregues=1	1				
Registro e divulgação	5	Número de artigos submetidos=2			1		1

Resultados Esperados

Resultados	Objetivo Específico	Indicadores	Metas				
			2019	2020	2021	2022	2023

Caracterizar a microestrutura do aço inoxidável ferrítico AISI-SAE 430 por MEV (imagens), EDS e WDS (composição química) e EBSD (características cristalográficas).	1 a 4	a) Relatório parcial; b) Relatório final;	x	x	x	x	x
Capacitação do Bolsista e transferência de conhecimento para a Instituição	5	Participação em workshop de competência internas (WCI) e no seminário Interno de Avaliação dos Bolsistas PCI.	x	x	x	x	x
Visibilidade nacional, internacional e network científico	5	Participação em congressos nacionais e/ou internacionais e/ou em co-autoria de artigos submetidos para periódicos	x		x		x

Referências Bibliográficas

[1] - W.A. Mannheimer, Microscopia dos Materiais, E-Papers, Rio de Janeiro, 2002, 221 p.

- [2] - J. Goldstein et al., Scanning Electron Microscopy and X-Ray Microanalysis, Springer, New York, 2003, 690 p.
- [3] - A. J. Schwartz, M. Kumar, B.L. Adams, Electron Backscatter Diffraction in Materials Science, Kluwer, New York, 2000, 339 p.
- [4] - L. Colombier; J. Hochmann, Aciers Inoxydables - Aciers Réfractaires, Dunod, Paris, 12^{ème} édition, 1965, 619 p.
- [5] - André Luiz V. Costa e Silva e Paulo Roberto Mei, Aços e Ligas Especiais, Editora Edgard Blücher, São Paulo, 2^a edição, 2006, 646 p.
- [6] - ASM Handbook volume 1, properties and Selection: Irons, Steels and High performance Alloys, ASM International, Materials Park, Ohio, USA, 1990, 6th printing 2001, 1063 p.
- [7] - Vicente Chiaverini, Aços e Ferros Fundidos , ABM (Associação Brasileira de Metais), São Paulo, 6^a edição, 1988, 576 p.

Projeto 3- Caracterização de materiais nanoestruturados por técnicas avançadas de microscopia.

Introdução

A manufatura de catalisadores é responsável pela movimentação de bilhões de dólares em todo o mundo, principalmente no que se refere aos setores de refino, polimerização e automotivo. Porém, o valor total recuperado pela produção de bens resultante de processos catalíticos com base em fontes fósseis provoca um impacto na economia global da ordem de trilhões por ano (1). Por possuir tal relevante papel em diferentes ramos produtivos, o desenvolvimento de novos instrumentos capazes de alavancar a eficiência de catalisadores será sempre alvo de pesquisa. De forma mais abrangente, na Ciência de Materiais, o domínio das características de nanoestruturas pode modular as propriedades finais do produto, ampliando e aprimorando sua aplicação. Átomos podem ser ligados em diferentes geometrias para gerar estruturas mono, bi e tridimensionais, como nanofibras, nanotubos, nanofios e nanofolhas. O processamento dessas configurações requer o domínio de técnicas inovadoras de preparação e sua caracterização avançada. Neste contexto, nanoestruturas de óxidos de vanádio, cério, ítrio titânio, zinco, nanopartículas metálicas, sólidos de estrutura ordenada, entre outros, são exemplos de materiais que têm sido estudados por grupos de pesquisa deste instituto. Os métodos de preparação empregados incluem diversas técnicas comuns à Ciência de Materiais, como precipitação, uso da química coloidal, direcionadores de estruturas, métodos hidrotérmicos e solvotérmicos; metodologias que podem ser aperfeiçoados com auxílio das técnicas aqui abordadas.

Um grande destaque nessa área de desenvolvimento pode ser considerado como o progresso em Nanotecnologia, um campo altamente interdisciplinar, envolvendo a Física, a Química, a Biologia, Ciência de Materiais e uma grande gama de disciplinas ligadas à Engenharia. Nesse contexto, ela trata da funcionalização de sistemas através da sua manipulação controlada, com destaque especial para a capacidade de provocar configurações atômicas

precisas para criando estruturas que possuam propriedades adequadas a uma aplicação particular. Esse aspecto, sem dúvida, é capaz de provocar um grande impacto científico em Catálise e Ciência de Materiais, permitindo a obtenção de sistemas estruturados com geometria e características desenhados especificamente para um determinado processo. De fato, tais impactos já vêm sendo percebidos através da produção de inúmeras inovações tecnológicas (2). No INT, de forma geral, o uso de materiais modernos alinha-se à filosofia de aproveitamento de biomassa e resíduos em geral, os processos que envolvem a utilização de energia renovável, além do foco no aumento da eficiência do material ou da transformação química.

Uma das ferramentas de caracterização crítica para o desenvolvimento e domínio dos materiais avançados é o microscópio eletrônico de transmissão (MET). O modelo Tecnai-G20 da Thermo Fisher/FEI, instalado no CENANO (Centro de Caracterização em Nanotecnologia) do Instituto Nacional de Tecnologia, é imprescindível no impulsionamento desta área de competência, pois, a capacidade de geração de imagens em alta resolução é inerente ao estudo de materiais em escala micro e nanométrica. Em especial, este equipamento possui funcionalidades avançadas que devem ser bem desenvolvidas ao máximo, como: a técnica de Tomografia, a geração de imagens de varredura por transmissão - STEM (*Scanning Transmission Electron Microscopy*), a associação com a espectroscopia de energia dispersiva (EDS) e a geração de imagens de campo escuro de alto ângulo - HAADF (*High-angle annular dark-field imaging*). Vale ressaltar que a técnica de HAADF é uma valiosa ferramenta para o estudo de homogeneidades químicas dos materiais contendo elementos com números atômicos suficientemente diferentes. Em combinação à Tomografia, a microscopia pode sair do patamar bidimensional e alcançar resolução espacial dos materiais, atingindo aspectos ligados a defeitos estruturais, distribuição de tamanho de partícula mais precisas, porosidade e homogeneidade global (3). Assim, os recursos de imagem aqui descritos agregarão excelência ao desenvolvimento de materiais avançados.

No escopo das atividades de pesquisa nas quais este projeto está inserido, destacam-se os temas já em estudo no INT, particularmente, conversão de renováveis para obtenção de bioprodutos e biocombustíveis e remediação de águas contaminadas por resíduos químicos. Existem nesses temas atividades em P&D correntes no INT que utilizam as técnicas avançadas de microscopia para investigar as propriedades estruturais e morfológicas de catalisadores e materiais nanoestruturados contendo em sua composição compostos como vanádio, nióbio, alumínio, silício, prata, platina, paládio, rutênio, cobre, entre outros.

Objetivo Geral

Caracterização morfológica e estrutural de materiais e catalisadores nanoestruturados e de estrutura organizada no âmbito das atividades de pesquisa ligadas à conversão de renováveis e remediação de águas contaminadas. A caracterização visa explorar em alto nível a capacidade do instrumental existente no laboratório e ao mesmo tempo aprofundar o conhecimento técnico-científico da equipe no uso de microscopia eletrônica de transmissão (TEM), microscopia eletrônica de varredura por transmissão (STEM) e tomografia.

Objetivo Específico 1: Realizar buscas em bases de periódicos sobre o uso das técnicas TEM, STEM, tomografia, EDS e HAADF, bem como de métodos de preparo de amostras para análises de materiais nanoestruturados, com estrutura ordenada e materiais híbridos;

Objetivo Específico 2: Desenvolvimento de materiais nanoestruturados, materiais de estrutura ordenada e materiais híbridos, contendo em sua composição compostos como vanádio, nióbio, alumínio, silício, prata, platina, paládio, rutênio, cobre, entre outros;

Objetivo Específico 3: Caracterização estrutural por TEM, STEM, EDS e HAADF de materiais nanoestruturados, materiais de estrutura ordenada e materiais híbridos sintetizados;

Objetivo Específico 4: Desenvolver protocolos específicos (ultramicrotomia) para preparação das amostras nanoestruturadas e materiais híbridos para análise estrutural

Objetivo Específico 5: Análise morfológica e estrutural de materiais nanoestruturados, materiais de estrutura ordenada e materiais híbridos sintetizados por Tomografia associada à Microscopia Eletrônica (TEM e STEM);

Objetivo Específico 6: Produção de dados para a elaboração de textos para procedimentos técnicos e relatório de atividades e redação de comunicações científicas.

Modalidade de Bolsas

Formação Acadêmica / Titulação	Área de Experiência	Objetivo Específico	PCI categoria/nível	Meses	Quantidade
Doutorado	Física, Química ou Engenharia.	1 a 6	D-A	60	1

Atividades de Execução

Atividade 1. Desenvolvimento de protocolos para análises de materiais nanoestruturados por STEM e HAADF;

Atividade 2. Síntese de materiais nanoestruturados contendo em sua composição compostos como vanádio, nióbio, alumínio, silício, prata, platina, paládio, rutênio, cobre, entre outros;

Atividade 3. Caracterização estrutural dos materiais nanoestruturados sintetizados por TEM, STEM, EDS e HAADF;

Atividade 4. Desenvolver metodologias específicas (ultramicrotomita) de preparação das amostras;

Atividade 5. Síntese de materiais ordenados a base alumínio, silício, zircônio, estanho e ítrio;

Atividade 6. Caracterização estrutural dos materiais ordenados sintetizados por TEM e STEM, EDS e HAADF;

Atividade 7. Síntese de materiais híbridos orgânico-inorgânicos;

Atividade 8. Caracterização estrutural dos materiais híbridos orgânico-inorgânicos sintetizados por TEM, STEM, EDS e HAADF;

Atividade 9. Treinamento e desenvolvimento de protocolos de análise em Tomografia;

Atividade 10. Caracterização morfológica e estrutural dos materiais nanoestruturados por Tomografia;

Atividade 11. Elaborar textos para procedimentos técnicos e relatório de atividades e apoiar a redação de artigos científicos

Atividades	Objetivo Específico	Indicadores	Metas				
			2019	2020	2021	2022	2023
1	1,3	Protocolo de análise estabelecido	1	-	-	-	-
2	2,3	Materiais sintetizados	10	-	-	-	-
3	3	Análises realizadas	-	20	-	-	-
4	4	Protocolo de análise estabelecido	-	1	-	-	-
5	2	Materiais sintetizados	-	-	15	-	-
6	3	Análises realizadas	-	-	35	-	-
7	2	Materiais sintetizados	-	-	-	15	-
8	3	Análises realizadas	-	-	-	35	-
9	4	Protocolo de análise estabelecido	-	-	-	1	-
10	5	Análises realizadas	-	-	-	-	15

11	6	Textos técnicos, relatórios e publicações	2	3	5	5	5
----	---	---	---	---	---	---	---

Cronograma de Atividades

Atividades	Semestre									
	2019		2020		2021		2022		2023	
	1	2	1	2	1	2	1	2	1	2
Atividade 1	X	X								
Atividade 2		X								
Atividade 3			X	X						
Atividade 4			X	X						
Atividade 5					X	X				
Atividade 6					X	X				
Atividade 7							X	X		
Atividade 8							X	X		
Atividade 9							X	X		
Atividade 10									X	X
Atividade 11		X		X		X		X		X

Produtos

Produto 1 – Protocolo para análises de materiais nanoestruturados por STEM e HAADF.

Produto 2 – Protocolo para preparação de amostra por ultramicrotomia

Produto 3 – Protocolo para análises de materiais nanoestruturados por tomografia.

Produto 4 – Relatórios e comunicações científicas produzidos.

Produtos	Objetivo Específico	Indicadores	Metas				
			2019	2020	2021	2022	2023
Produto 1	1,3	Nº de protocolos	1	-	-	-	-
Produto 2	4	Nº de protocolos	-	1	-	-	-
Produto 3	4,5	Nº de protocolos	-	-	-	1	-
Produto 5	2,6	Nº de textos	2	3	5	5	5

Resultados Esperados

Resultado 1 – Manutenção de análises para caracterização de materiais através de técnicas de MET (modo normal e STEM, Tomografia) e integração com a plataforma de preparação de amostras (FIB, ultracriomicrotomo, embutimento);

Resultado 2 - Novos recursos técnicos em Microscopia Eletrônica;

Resultado 3 – Estruturas avançadas para Catálise e Materiais;

Resultado 4 – Capacitação de pessoal (usuários e especializados) em técnicas avançadas Microscopia Eletrônica;

Resultado 5 – Divulgação da pesquisa e comunicações científicas.

Resultados	Objetivo Específico	Indicadores	Metas				
			2019	2020	2021	2022	2023
Resultado 1	3 a 6	Análises realizadas	30	40	60	60	60
Resultado 2	1,3,5	Novos recursos disponíveis	-	1	1	-	-
Resultado 3	2,3	Nº patentes ou publicações internacionais	-	2	2	2	2
Resultado 4	6	Nº de pessoas capacitadas	20	15	10	10	6
Resultado 5	6	Nº de comunicações	2	3	5	5	5

Referências

- 1- Council for Chemical Research (1998). *Vision 2020 catalysis report*, www.ccrhq.org/vision/index/roadmaps/catrep.html
- 2.- M. Manoharan, *Technology in Society*. Volume 30, 2008, 401.
- 3-. J. M. Thomas. Reflections on the value of electron microscopy in the study of heterogeneous catalysts. *Proc. R. Soc. A* 473, 2017, 20160714. <http://dx.doi.org/10.1098/rspa.2016.0714>

Projeto 4- Transformação catalítica de açúcares em fase aquosa

Introdução

Independentemente das previsões quanto às reservas de petróleo, os produtos baseados em fontes renováveis tendem a ser cada vez mais demandados, seja por questões ambientais, legais ou econômicas, devido às oscilações dos preços dos insumos fósseis tradicionais. Nesse contexto, a participação de matérias primas renováveis tem sido amplamente incentivada em diversos países. No caso do Brasil, a disponibilidade de biomassa residual em setores econômicos relevantes nos obriga a identificar potenciais compostos que possam ser transformados em produtos de maior valor agregado e de grande demanda industrial. No caso da biomassa lignocelulósica, constituída por lignina e carboidratos, o beneficiamento da fração sacarídica exige o emprego de catalisadores específicos, com uma arquitetura adequada que possa garantir a formação dos compostos químicos de interesse com rendimentos que tornem o processo custo-competitivo. Além disso, a configuração do processo deve ser apropriada às particularidades dessa corrente, caracterizada pela sua alta reatividade, baixa volatilidade e elevada hidrofobicidade, sendo, na verdade, disponibilizada já em fase aquosa.

Nesse contexto, as pesquisas no INT têm buscado novas estratégias para o desenvolvimento de processos intensificados de beneficiamento de carboidratos de segunda geração visando a produção de compostos estratégicos, como o álcool furfurílico, ácido láctico, ácido levulínico e levulinatos. As estratégias propostas exploram dois aspectos essenciais: o catalisador e o processo catalítico. Assim, busca-se desenvolver catalisadores heterogêneos com morfologias e topologias distintas que direcionem suas propriedades físico-químicas e sua atividade superficial para transformação de pentoses e hexoses. Ademais, são focados os processos contínuos, onde as reações sequenciais envolvidas na transformação dos carboidratos possam ser promovidas em um único e ambientalmente amigável meio reacional (aquoso).

Objetivo Geral

Esta proposta tem como objetivo geral explorar novas estratégias para a conversão de carboidratos derivados de biomassa lignocelulósica residual em produtos químicos com valor agregado e de interesse do setor químico industrial. Dessa forma, atendendo as diretrizes do INT de contribuir para o desenvolvimento tecnológico do país no âmbito da Química Verde a partir de sua competência em Catálise e Processos Químicos.

Objetivo Específico 1: Desenvolver catalisadores heterogêneos com composição química, morfologias e topologias distintas

Objetivo Específico 2: Caracterizar as propriedades físico-químicas dos catalisadores formulados para o processamento de carboidratos

Objetivo Específico 3: Desenvolver processos contínuos, onde as reações sequenciais envolvidas na transformação dos carboidratos possam ser promovidas em um único e

ambientalmente amigável meio reacional (aquoso), com foco na obtenção de produtos de alto valor agregado, particularmente álcool furfurílico, ácido levulínico e ácido láctico.

Modalidade de Bolsa

Para o desenvolvimento deste projeto, necessitamos de uma bolsa PCI-DA com duração de 60 meses.

Formação Acadêmica / Titulação	Área de Experiência	Objetivo Específico	PCI categoria/nível	Meses	quantidade
Engenharia Química ou Química / Doutorado	Catálise heterogênea	1, 2 e 3	D-A	60	1

Atividades de Execução

As atividades de pesquisa serão realizadas no Instituto Nacional de Tecnologia (INT-RJ), sob a supervisão dos pesquisadores Marco André Fraga e Andréa Maria Duarte de Farias.

Atividade 1: Síntese de catalisadores a base de aluminossilicatos com topologias FAU, BEA e lamelares.

Atividade 2: Síntese nanoestruturas de óxidos com diferentes morfologias.

Atividade 3: Síntese de catalisadores a base de metais não nobres a partir de estruturas perovskitas precursoras.

Atividade 4: Caracterização dos catalisadores sintetizados quanto a sua estrutura, porosidade, morfologia, composição química e acidez superficial.

Atividade 5: Avaliação do desempenho dos catalisadores sintetizados na conversão em fase líquida da xilose.

Atividade 6: Estabelecer condições operacionais que permitam maximizar a produção de álcool furfurílico, ácido láctico e ácido levulínico.

Atividade 7: Avaliar o desempenho da melhor formulação com hidrolisado real de bagaço de cana de açúcar.

Atividades	Objetivo Específico	Indicadores	Metas				
			2019	2020	2021	2022	2023
Atividade 1	1	Número de catalisadores sintetizados	8	6	0	6	0

Atividade 2	1	Número de nanoestruturas sintetizadas	4	6	0	0	0
Atividade 3	1	Número de catalisadores sintetizados	0	3	5	0	0
Atividade 4	2	Número de análises de caracterização realizadas	60	75	25	30	0
Atividade 5	3	Número de testes catalíticos realizados	36	45	15	18	18
Atividade 6	3	Número de protocolos otimizados redigidos	1	2	0	0	0
Atividade 7	3	Número de testes catalíticos realizados	0	0	0	5	15

Cronograma de Atividades

Atividades	Semestre									
	2019		2020		2021		2022		2023	
	1	2	1	2	1	2	1	2	1	2
Síntese de catalisadores a base de aluminossilicatos com topologias FAU, BEA e lamelares	X	X	X							
Caracterização quanto a sua estrutura, porosidade, morfologia, composição química e acidez superficial dos catalisadores sintetizados a base de aluminossilicatos		X	X	X						
Avaliação do desempenho dos catalisadores a base de aluminossilicatos na conversão em fase líquida da xilose			X	X	X					
Síntese nanoestruturas de óxidos com diferentes morfologias					X	X				

Caracterização quanto a sua estrutura, porosidade, morfologia, composição química e acidez superficial das nanoestruturas de óxidos						X	X			
Avaliação do desempenho das nanoestruturas de óxidos na conversão em fase líquida da xilose						X	X	X		
Síntese de catalisadores a base de metais não nobres a partir de estruturas perovskitas precursoras							X	X		
Caracterização quanto a sua estrutura, porosidade, morfologia, composição química e acidez superficial dos catalisadores sintetizados a base de metais não nobres a partir de estruturas perovskitas precursoras							X	X	X	
Avaliação do desempenho dos catalisadores a base de metais não nobres a partir de estruturas perovskitas precursoras na conversão em fase líquida da xilose								X	X	
Avaliar o desempenho da melhor formulação com hidrolisado real de bagaço de cana de açúcar								X	X	X

Produtos

Produto 1: Artigo científico em congresso.

Produto 2: Artigo científico em periódico.

Produtos	Objetivo Específico	Indicadores	Metas				
			2019	2020	2021	2022	2023
Produto 1	1-3	Número de artigos em congressos	1	2	2	2	2

Produto 2	1-3	Número de artigos em periódicos	0	1	2	1	2
-----------	-----	---------------------------------	---	---	---	---	---

Resultados Esperados

Os resultados são mudanças observadas no curto prazo sobre indivíduos, grupos ou instituições, como resultado da intervenção realizada.

Resultados	Objetivo Específico	Indicadores	Metas				
			2019	2020	2021	2022	2023
Domínio da síntese de estruturas ordenadas	1,2	Protocolo de síntese de estruturas BEA, FAU ordenadas	0	1	0	0	0
Domínio da síntese de óxidos com morfologias controladas	1,2	Protocolo de síntese de óxidos com morfologias controladas	1	0	0	0	0
Domínio da síntese de catalisadores a base de metais não nobres a partir de estruturas perovskitas precursoras	1,2	Protocolo de síntese de catalisadores a base de metais não nobres a partir de estruturas perovskitas precursoras	0	0	1	0	0
Condições de processo de transformação de açúcares	3	Descritivos detalhados de processos para conversão de açúcares em fase aquosa para produção de álcool furfúrico, ácido lático e ácido levulínico	0	1	0	1	1

Projeto 5- Desenvolvimento de metodologias de caracterização de catalisadores por análises termoprogramáveis e espectroscópicas

Introdução

Algumas das metodologias mais utilizadas para caracterização de catalisadores são as análises termoprogramáveis como TPO (oxidação a temperatura programada), TPR (redução a temperatura programada) e TPD (dessorção a temperatura programada) [1,2]. Estas práticas possibilitam, por exemplo, o mapeamento da redutibilidade e de propriedades superficiais como acidez e basicidade. O LACAT - Laboratório de Catálise do INT possui atualmente dois tipos de equipamentos para este tipo de análise: um automatizado comercial e um montado no próprio laboratório. O primeiro possui um detetor de condutividade térmica para identificação e quantificação dos componentes da mistura gasosa de saída, enquanto o segundo possui um espectrômetro de massas. Para o segundo equipamento também se pode acompanhar o desempenho do catalisador diante de reagentes para estudar a interação da amostra com moléculas de especial interesse para o processo em estudo por TPSR (reação superficial a temperatura programada). Neste contexto, o espectrômetro de massas recém-instalado será usado nas atividades do projeto. Uma das etapas previstas neste projeto é o desenvolvimento de metodologias de análises de TPR com mistura gás inerte + hidrogênio, TPO com mistura gás inerte + oxigênio e TPD de gases H₂, CO, CO₂ e vapores de etanol e de água com catalisador metálico suportado em óxido e misturas físicas de catalisadores. Outra etapa do projeto prevê o desenvolvimento de metodologia de TPSR para reações de vapor de etanol + gás oxigênio, etanol + gás inerte, etanol + vapor de água e combinações destes. A atividade e seletividade a produtos como acetato de etila, ácido acético, acetaldeído, etileno e hidrogênio será monitorada.

Por outro lado, os diversos tipos de espectroscopia são essenciais na compreensão das propriedades, da configuração molecular e no acompanhamento de reações. O LACAT dispõe de equipamentos para espectroscopia de infravermelho (IV), ultravioleta (UV), e Raman, além da já citada espectrometria de massas. O desenvolvimento de metodologias de análise destas técnicas à infraestrutura existente no laboratório é de extrema importância, sem esquecer o uso de acessórios, como câmaras para ensaios in-situ. Em especial, em Catálise, torna-se muito útil o uso da espectroscopia infravermelho quando associada a uma unidade de vidro para limpeza das superfícies e adsorção de moléculas. Uma das etapas deste projeto prevê o desenvolvimento de metodologia de análises de acidez e basicidade por adsorção de piridina e CO₂, respectivamente, nos catalisadores e misturas por IV. Do mesmo modo, se prevê o uso do UV e do RAMAN na caracterização do estado de oxidação do metal ativo nos catalisadores e misturas e interações entre as espécies componentes dos catalisadores. Após a validação das metodologias, serão redigidos os protocolos das técnicas. Além destas técnicas tradicionais, uma célula para experimentos in situ tipo DRIFTS (*Diffuse Reflectance Infrared Fourier Transform Spectroscopy*) acoplada ao espectrômetro de infravermelho pode realizar experimentos em atmosfera controlada simulando a ação de moléculas de interesse sobre o catalisador [3].

Novamente, está previsto o uso desta célula para reações de vapor de etanol + gás oxigênio, etanol + gás inerte, etanol + vapor de água e combinações destes.

Ainda no contexto de análises termoprogramáveis, pretende-se adaptar um calorímetro, para a caracterização ácido-base de catalisadores avaliando o calor de adsorção/dessorção de moléculas-sonda como CO₂. A calorimetria tem se mostrado uma técnica muito assertiva para a quantificação de sítios ácidos e básicos em sólidos [4]. A necessidade de informações sobre essas funções do material é recorrente no estudo de reações catalíticas dado que inúmeros processos químicos dependem delas. Assim, as atividades contarão com experimentos para a familiarização, ensaios preliminares e demais avanços para o conhecimento deste tipo de análise. Essas são ações que compõem um esforço com objetivo de iniciar este tipo de ensaio que até então não faz parte do escopo do LACAT. Este método alternativo permitirá expandir a capacidade do laboratório em relação a este tipo de caracterização, criando uma nova competência.

Objetivo Geral

Expandir a capacidade da Divisão de Catálise e Processos Químicos do INT nas técnicas espectroscópicas e de análise termoprogramável, melhorando a compreensão das propriedades físico-químicas dos catalisadores e a capacitação técnica dos integrantes da divisão e de instituições parceiras.

Objetivo Específico 1: Desenvolvimento de metodologia de caracterização de catalisadores e mistura físicas de catalisadores por TPD, TPR e TPO.

Objetivo Específico 2: Desenvolvimento de metodologia de reações de vapor de etanol + gás oxigênio, etanol + gás inerte, etanol + vapor de água e combinações destes com catalisadores e mistura físicas de catalisadores por TPSR.

Objetivo Específico 3: Desenvolvimento de metodologia de caracterização de catalisadores e mistura físicas de catalisadores por análises espectroscópicas convencionais de IV, UV e Raman;

Objetivo Específico 4: Desenvolvimento de metodologia de reações de vapor de etanol + gás oxigênio, etanol + gás inerte, etanol + vapor de água e combinações destes com catalisadores e mistura físicas de catalisadores por DRIFTS.

Objetivo Específico 5: Desenvolvimento de metodologia de caracterização ácido-base de catalisadores e mistura físicas de catalisadores por Calorimetria;

Objetivo Específico 6: Produção de dados para a elaboração de textos para procedimentos técnicos e relatório de atividades e redação de comunicações científicas.

Modalidade de Bolsa

Formação Acadêmica / Titulação	Área de Experiência	Objetivo Específico	PCI categoria/nível	Meses	Quantidade
Técnico nível médio	Química	1,4,5	D-E	60	1

Atividades de Execução

As atividades de pesquisa serão realizadas no Instituto Nacional de Tecnologia (INT-RJ), sob a supervisão dos pesquisadores Andréa Maria Duarte de Farias, Alexandre Barros Gaspar e Sidnei Brum da Silveira Filho.

Atividade 1. Preparo de catalisadores e misturas físicas.

Atividade 2. Realização de análises de TPD, TPR e TPO.

Atividade 3. Interpretação dos dados e emissão de relatório descrevendo metodologia de análises de TPD, TPR e TPO.

Atividade 4. Realização de análises de TPSR.

Atividade 5. Interpretação dos dados e emissão de relatório descrevendo metodologia de análises de TPSR.

Atividade 6. Realização de análises IV, UV e Raman.

Atividade 7. Interpretação dos dados e emissão de relatório descrevendo metodologia de análises de IV, UV e Raman.

Atividade 8. Realização de análises de DRIFTS.

Atividade 9. Interpretação dos dados e emissão de relatório descrevendo metodologia de análises de DRIFTS.

Atividade 10. Levantamento teórico sobre métodos de calorimetria aplicados à Catálise, testes preliminares.

Atividade 11. Realização de análises de calorimetria.

Atividade 12. Interpretação dos dados e emissão de relatório descrevendo metodologia de análises de calorimetria.

Atividade 13. Elaboração de relatório técnico de atividades e redação de artigos científicos.

Atividades	Objetivo Específico	Indicadores	Metas				
			2019	2020	2021	2022	2023
Atividade 1	1-5	Catalisadores e misturas físicas preparados	5				
Atividade 2	1	Análises de TPR, TPO e TPD realizadas	35				
Atividade 3	1	Relatório de TPR, TPO e TPD	1				

Atividade 4	2	Análises de TPSR realizadas		15			
Atividade 5	2	Relatório de TPSR		1			
Atividade 6	3	Análises de IV, UV e RAMAN realizadas		30			
Atividade 7	3	Relatório de IV, UV e RAMAN		1			
Atividade 8	4	Análises de DRIFTS realizadas			15		
Atividade 9	4	Relatório de DRIFTS			1		
Atividade 10	5	Levantamento sobre calorimetria				1	
Atividade 11	5	Análises de calorimetria realizadas				30	
Atividade 12	5	Relatório de calorimetria				1	
Atividade 13	6	Textos técnicos, relatórios e publicações				1	1

Cronograma de Atividades

Atividades	Semestre									
	2019		2020		2021		2022		2023	
	1	2	1	2	1	2	1	2	1	2
Atividade 1	X	X								
Atividade 2	X	X								
Atividade 3	X	X								
Atividade 4			X	X						
Atividade 5			X	X						
Atividade 6			X	X						
Atividade 7			X	X						
Atividade 8					X	X				
Atividade 9					X	X				
Atividade 10							X	X		
Atividade 11							X	X		
Atividade 12							X	X		

Atividade 13					X	X			X	X
--------------	--	--	--	--	---	---	--	--	---	---

Produtos

Produto 1 – Catalisadores sintetizados.

Produto 2 - Metodologia e resultados de análises de TPR, TPO e TPD.

Produto 3 – Metodologia e resultados de análises de TPSR.

Produto 4 – Metodologia e resultados de análises de UV, IV e Raman.

Produto 5 – Metodologia e resultados de análises de DRIFTS.

Produto 6 – Metodologia e resultados de análises de Calorimetria.

Produto 7 – Textos técnicos, relatórios e comunicações científicas produzidos.

Produtos	Objetivo Específico	Indicadores	Metas				
			2019	2020	2021	2022	2023
Produto 1	1-5	Catalisadores e misturas físicas preparados	5				
Produto 2	1	Metodologia e resultados de análises de TPR, TPO e TPD	1				
Produto 3	2	Metodologia e resultados de análises de TPSR.		1			
Produto 4	3	Metodologia e resultados de análises de UV, IV e Raman.		1			
Produto 5	4	Metodologia e resultados de análises de DRIFTS.			1		
Produto 6	5	Metodologia e resultados de análises de Calorimetria				1	

Produto 7	6	Textos técnicos, relatórios e comunicações científicas produzidos			1		1
-----------	---	---	--	--	---	--	---

Resultados Esperados

Resultado 1 – Realização de análises para caracterização de catalisadores através de técnicas termoprogramáveis e Espectroscopia.

Resultado 2 - Recursos técnicos desenvolvidos em Espectroscopia (câmaras in situ do UV, RAMAN, DRIFTS e Calorimetria).

Resultado 3 – Capacitação de pessoal nas técnicas espectroscópicas, calorimétricas e termoprogramáveis;

Resultado 4 – Comunicações científicas e patentes.

Resultados	Objetivo Específico	Indicadores	Metas				
			2019	2020	2021	2022	2023
Resultado 1	1	Análises realizadas	35	45	15	30	
Resultado 2	2-4	Novos recursos disponíveis		2	1	1	
Resultado 4	5	Número de comunicações	1	2	2	2	1

Referências Bibliográficas

- [1] J.W. Niemantsverdriet, Spectroscopy in catalysis, VCH, Weinheim, 2007.
 [2] M. Boaro; M. Vicario; C. Leitenburg, G. Dolcetti, A. Trovarelli, Catalysis Today, 2003, Vol.77, 407-417.
 [3] J. Zarfl, D. Ferri, T. Schildhauer, J. Wambach, A. Wokaun, Applied Catalysis A, General, 5, 2015, Vol.495, 104-114.
 [4] L. Damjanovic e A. Auroux, *Handbook of Thermal Analysis and Calorimetry* Vol. 5: Recent Advances, Techniques and Applications, M.E. Brown and P.K. Gallagher, editors, 2008.

Projeto 6 - Tecnologia e Análise Ambiental

Introdução

Estudos voltados para o desenvolvimento de tecnologias de remediação e monitoramento ambiental tornam-se cada vez mais premente na busca de soluções sustentáveis e inovadoras para os recursos naturais, a fim de mitigar ações antropogênicas e mudanças climáticas.

Através do desenvolvimento de materiais e processos com soluções para descontaminação de água, efluentes, solo e ar, pretende-se alcançar tecnologias inovadoras para aplicação no meio ambiente. O desenvolvimento do trabalho engloba basicamente três etapas: preparação dos materiais lamelares, caracterizações e aplicação em estudos laboratoriais. Os materiais pesquisados destinados à aplicação no meio ambiente estão diretamente relacionados aos princípios da Química Verde, agindo com o propósito de minimizar efeitos ambientais adversos, como exemplos, a eutrofização, contaminação por metais e poluentes orgânicos persistentes. A funcionalização desses materiais surge como uma ferramenta para conferir diferentes propriedades e funções, buscando um desempenho adequado. Diversas caracterizações devem ser realizadas a fim de determinar, por exemplo, composição química e propriedades textuais, que são importantes para compreender os mecanismos de atuação no processo de remediação ambiental dos constituintes inorgânicos (Cd, Cu, Pb e fosfato) em águas doces/salobras e efluentes domésticos.

O monitoramento ambiental através da pesquisa e desenvolvimento de metodologias sensíveis, seletivas, robustas e de baixo custo é de suma importância para os estudos de corpos hídricos, efluentes, solos e ar a fim de atender legislações e na análise de elementos traço inorgânicos e orgânicos.

Um dos poluentes orgânicos persistentes, os hidrocarbonetos policíclicos aromáticos (HPA) são compostos orgânicos que possuem dois ou mais anéis benzênicos condensados, que podem ter origem tanto antropogênica como através de queima de material orgânico como incêndios florestais naturais. Sua solubilidade em água diminui com o aumento da massa molar, podendo ser produzidos, basicamente, por pirólise de matéria orgânica em altas temperaturas, diagênese de material orgânico sedimentar em temperaturas baixas ou moderadas, ou ainda por biosíntese direta por microorganismos ou plantas. Estes compostos podem se distribuir tanto no solo, quanto na água e no ar, sendo que consideráveis quantidades de HPAs lançados ao meio marinho são originárias de fontes antropogênicas, como lançamentos de esgoto, deposição atmosférica, entre outros. Uma vez que os HPAs estão associados com a ação carcinogênica e mutagênica constituindo uma ameaça à saúde, o seu monitoramento em matrizes ambientais é de extrema relevância sob o ponto de vista de saúde pública.

O Instituto Nacional de Tecnologia através da Divisão de Química Analítica tem um histórico de desenvolvimento científico e tecnológico na área do Projeto 1, podendo-se citar alguns projetos já desenvolvidos/em desenvolvimento: (i) Experimentos de remobilização de metais em sedimentos contaminados; (ii) Determinação de Metais Disponíveis em Sedimento Sujeitos a Dragagem: o Uso de Testemunhos e Extração Sequencial; (iii) Avaliação do Rompimento de uma Barragem de Rejeitos sobre as Concentrações de Metais na Água e no Sedimento; (iv) Remediação de nitrato pelo uso de partículas metálicas de Fe e Zn zero valente; (v) Estudo da degradação do 1,2- dicloroetano por peroximonosulfato catalisado por $\text{Cu}^+/\text{Cu}^{2+}$;

(vi) – Desenvolvimento de método de quantificação de HPA por CG em amostras de água; (vii) Desenvolvimento de argilominerais modificados com potencial aplicação como adsorventes de fosfato em ambientes aquáticos eutrofizados; (viii) – Redução catalítica nitrato e nitrito utilizando catalisadores bi metálicos; (ix) Contaminação por antivirais em matrizes aquosas do Rio de Janeiro: avaliação de risco ambiental e remoção por Processos Oxidativos Avançados; (x) Tecnologias Avançadas para o tratamento de águas contendo micropoluentes e estudo da remoção de contaminantes do Rio Guandu.

Objetivo Geral

Desenvolver tecnologias para remediação ambiental e validar metodologias analíticas para monitoramento de contaminantes inorgânicos e orgânicos em matrizes ambientais.

Objetivo Específico 1: Desenvolvimento de materiais lamelares modificados destinados à remediação ambiental de constituintes inorgânicos (Cd, Cu, Pb e fosfato) em águas doces/salobras e efluentes domésticos.

Modalidade de Bolsa

Formação Acadêmica / Titulação	Área de Experiência	Objetivo Específico	PCI categoria/nível	Meses	Quantidade
Mestrado	Química, Química Industrial, Engenharia Química	1	D-C	60	01

Atividades de Execução

Atividades	Objetivo Específico	Indicadores	Metas				
			2019	2020	2021	2022	2023
Revisão bibliográfica – Estado da arte	1	Relatório com a revisão bibliográfica	01	NA	NA	NA	NA
Planejamento das etapas experimentais	1	Planilha com o planejamento das etapas experimentais	01	NA	NA	NA	NA
Preparação dos materiais lamelares através do procedimento de modificação com a funcionalização	1	Conjunto de materiais modificados de acordo com o planejamento experimental	01	01	NA	NA	NA

Caracterização por Fluorescência de Raios X com dispersão de comprimento de onda (WD-XRF)	1	Caracterizações por WD-XRF realizadas de acordo com o planejamento experimental	NA	01	NA	NA	NA
Caracterização por Difração de Raios X (DRX)	1	Caracterizações por DRX realizadas de acordo com o planejamento experimental	NA	01	NA	NA	NA
Caracterização textural dos materiais através da determinação da área superficial e volume de poros por adsorção e dessorção de N ₂ .	1	Caracterizações realizadas de acordo com o planejamento experimental	NA	NA	01	NA	NA
Avaliação do processo de remoção dos contaminantes em amostras sintéticas (fortificadas) com Cd, Cu, Pb e fosfato	1	Avaliações realizadas nas amostras coletadas de acordo com o planejamento experimental	NA	01	01	NA	NA
Planejamento da coleta de água doce/salobra em lagoa	1	Planejamento da coleta	NA	NA	01	NA	NA
Coleta de amostras de água em lagoa para testes em laboratório	1	Coleta realizada de acordo com o procedimento experimental	NA	NA	NA	01	NA

Determinações dos principais parâmetros de qualidade nas amostras de água da lagoa	1	Determinações realizadas dos parâmetros químicos e físico-químicos de acordo com o procedimento experimental	NA	NA	NA	01	NA
Testes em laboratório utilizando os materiais mais promissores com a amostra de água natural da lagoa	1	Avaliações realizadas em amostra de água natural da lagoa de acordo com o planejamento experimental	NA	NA	NA	01	NA
Coleta de amostra de efluente para teste em laboratório	1	Coleta realizada de acordo com o procedimento experimental	NA	NA	NA	01	NA
Determinações dos principais parâmetros de qualidade na amostra de efluente	1	Determinações realizadas dos parâmetros químicos e físico-químicos de acordo com o procedimento experimental	NA	NA	NA	01	NA
Testes em laboratório utilizando os materiais mais promissores com a amostra de efluente	1	Avaliações realizadas em amostra de efluente de acordo com o planejamento experimental	NA	NA	NA	01	01
Elaboração de relatórios parciais (anual)	1	Relatórios elaborados	01	01	01	01	NA
Apresentação do projeto e dos resultados dentro da Divisão / Instituição	1	Apresentação oral	01	01	01	01	01

Elaboração de resumos/trabalhos completos para eventos científicos para eventos científicos	1	Trabalhos elaborados para eventos científicos	NA	01	01	01	01
Elaboração e submissão de artigos científicos	1	Artigo científico elaborado e submetido	NA	NA	01	NA	01
Elaboração do relatório final do projeto	1	Relatório final do projeto	NA	NA	NA	NA	01

NA- Não aplicável. * Não é possível estabelecer metas quantitativas para esta atividade

Cronograma de Atividades

Objetivo específico 1

Atividades	Semestre									
	2019		2020		2021		2022		2023	
	1	2	1	2	1	2	1	2	1	2
Revisão bibliográfica – Estado da arte	x	x								
Planejamento das etapas experimentais	x	x								
Preparação dos materiais lamelares através do procedimento de modificação com a funcionalização		x	x							
Caracterização por Fluorescência de Raios X com dispersão de comprimento de onda (WD-XRF)			x	x						

Caracterização por Difração de Raios X				X	X				
Caracterização textural dos materiais através da determinação da área superficial e volume de poros por adsorção e dessorção de N ₂ .				X	X				
Avaliação do processo de remoção dos contaminantes em amostras sintéticas (fortificadas) com Cd, Cu, Pb e fosfato					X	X			
Planejamento da coleta de água doce/salobra em lagoa						X			
Coleta de amostras de água em lagoa para testes em laboratório							X		
Determinações dos principais parâmetros de qualidade nas amostras de água da lagoa							X		
Testes em laboratório utilizando os materiais mais promissores com a amostra de água natural da lagoa							X		
Coleta de amostra de efluente para teste em laboratório								X	
Determinações dos principais parâmetros de qualidade na amostra de efluente								X	
Testes em laboratório utilizando os materiais mais promissores com a amostra de efluente								X	X
Elaboração de relatórios parciais (anual)		X		X		X		X	X
Apresentação do projeto e dos resultados dentro da Divisão / Instituição		X		X		X		X	X

Elaboração de resumos/trabalhos completos para eventos científicos para eventos científicos		x		x		x		x		x
Elaboração e submissão de artigos científicos					x				x	
Elaboração do relatório final do projeto										x

Produtos

Produtos	Objetivo Específico	Indicadores	Metas				
			2019	2020	2021	2022	2023
Artigo científico submetido para publicação	1	Nº de artigos científicos submetidos	-	-	01	-	01
Artigo científico publicado	1	Nº de artigos científicos publicados	-	-	01	-	01
Resumo/trabalho completo apresentados em evento científico na forma de pôster e apresentação oral (congresso, encontro, workshop, simpósio, dentre outros)	1	Nº de trabalhos apresentados em eventos científicos	01	01	01	01	01

Resultados Esperados

Resultados	Objetivo Específico	Indicadores	Metas				
			2019	2020	2021	2022	2023

Incremento da capacidade científica e tecnológica da instituição (DIQAN/INT)	1	Nº de artigos científicos publicados Nº de resumos/trabalhos completos apresentados em eventos científicos	-	01	03	01	03
Relevância para a sociedade e meio ambiente. Geração de valor ambiental e social: desenvolvimento de tecnologia para remediação ambiental de constituintes inorgânicos (Cd, Cu, Pb e fosfato) em águas doces/salobras e efluentes domésticos. *	1	-	-	-	-	-	-
Incremento da capacidade científica e tecnológica do bolsista	1	Nº de artigos científicos publicados Nº de resumos/trabalhos completos apresentados em eventos científicos	-	01	03	01	03

* Não é possível estabelecer meta quantitativa para esse resultado.

Referências Bibliográficas

Objetivo específico 1

- [1] B. Li, Y. Zhang, D. Ma, Z. Shi, e S. Ma, “Mercury nano-trap for effective and efficient removal of mercury(II) from aqueous solution”, *Nat. Commun.*, vol. 5, n° May, p. 1–7, 2014.
- [2] M. Maretto *et al.*, “Microporous and mesoporous materials for the treatment of wastewater produced by petrochemical activities”, *J. Clean. Prod.*, vol. 77, p. 22–34, 2014.
- [3] M. H. Dindar, M. R. Yafian, e S. Rostamnia, “Potential of functionalized SBA-15 mesoporous materials for decontamination of water solutions from Cr(VI), As(V) and Hg(II) ions”, *J. Environ. Chem. Eng.*, vol. 3, n° 2, p. 986–995, 2015.
- [4] A. Gonzalez-Perez e K. M. Persson, “Bioinspired materials for water purification”, *Materials (Basel)*, vol. 9, n° 6, 2016.
- [5] A. R. Kumari e K. Sobha, “Environmental Technology & Innovation Removal of lead by adsorption with the renewable biopolymer composite of feather (*Dromaius novaehollandiae*) and chitosan (*Agaricus bisporus*)”, *Environ. Technol. Innov.*, vol. 6, p. 11–26, 2016.
- [6] M. T. G. Vianna, M. Marques, e L. C. Bertolino, “Sun coral powder as adsorbent: Evaluation of phosphorus removal in synthetic and real wastewater”, *Ecol. Eng.*, vol. 97, p. 13–22, 2016.
- [7] R. Zhu, Q. Chen, Q. Zhou, Y. Xi, J. Zhu, e H. He, “Adsorbents based on montmorillonite for contaminant removal from water: A review”, *Appl. Clay Sci.*, vol. 123, p. 239–258, 2016.

Projeto 7 - Tecnologia Analítica para Produtos e Processos

Introdução

O desenvolvimento de metodologias analíticas para o acompanhamento e otimização de processos é de grande importância para os setores industriais. Podem-se realizar estudos de novas metodologias e tecnologias analíticas voltadas para a caracterização e quantificação de matérias primas, contaminantes, intermediários e produtos acabados. Para isso, buscam-se empregar técnicas instrumentais avançadas, tais como de cromatografia gasosa com diferentes detecções (DIC, DTC, EM), cromatografia líquida de alta eficiência com diferentes detecções (DAD, EM), por espectroscopia de infravermelho (FTIR), cromatografia iônica (detectores condutométrico, amperométrico e UV-Vis), técnicas de espectrometria de emissão e absorção atômica (ICP-OES e EAA), técnicas de fluorescência de raios X e microscopia, envolvendo ainda técnicas de preparo de amostras como extração por *Soxhlet*, em fase sólida (SPE e SPME) e *headspace* (HS). Todas as tecnologias analíticas desenvolvidas têm ampla aplicação em diversos segmentos industriais tais como, petróleo e petroquímica, medicamentos, cosméticos, materiais poliméricos e alimentos.

No que diz respeito à indústria alimentícia, sabe-se que esta produz, atualmente, uma enorme quantidade de passivos ambientais, os quais apresentam, ainda, grande valor de mercado, uma vez que são fontes de compostos antioxidantes como os compostos fenólicos, carotenoides e vitamina C, dentre outros. Este é o caso da agroindústria de processamento de juçara e umbu, duas frutas nativas de relevante potencial socioeconômico. Neste sentido, por meio de etapas de extração, separação e purificação, sempre acompanhadas por técnicas analíticas adequadas, é possível obter ingredientes de grande interesse industrial, uma vez que estes podem ser utilizados em formulações alimentícias como substituto integral ou parcial de conservadores, corantes e até mesmo antioxidantes sintéticos.

Assim, o reaproveitamento do resíduo da agroindústria se apresenta como uma alternativa promissora, pois atende a demanda de consumidores que buscam alternativas mais saudáveis para a sua alimentação, além da redução do impacto ambiental provocado pelo descarte inadequado do mesmo. Quanto aos estudos com infusões de plantas medicinais, as técnicas analíticas possibilitam a elucidação de seus compostos potencialmente funcionais, permitindo, assim, relacionar composição química e efeitos fisiológicos. Destaca-se que, além dos compostos tradicionalmente presentes nas infusões, como é o caso dos flavonoides, o óleo essencial, obtido por hidrodestilação, é um ingrediente complexo devido ao elevado número de compostos voláteis e, como no caso da pata de vaca, pouco explorado. Entretanto, estudos ressaltam a contribuição biológica destes compostos voláteis.

Especificamente a monitorização dos parâmetros de qualidade das águas naturais, efluentes industriais e etapas dos processos industriais apresentam uma necessidade de investigação crescente devido às exigências de proteção ambiental e introdução de novas tecnologias analíticas adaptáveis à indústria. As substâncias presentes em vários tipos de efluentes industriais podem ser classificadas como produtos químicos, físicos, biológicos e radiológicos.

Para o monitoramento dos metais Fe, Cu, Cr, Mn, Pb duas técnicas são tradicionalmente empregadas: a Espectrometria de Absorção Atômica com Chama (FAAS) e a Espectrometria de

Emissão Ótica com Plasma Indutivamente Acoplado (ICP-OES). No entanto, apresentam algumas desvantagens tais como elevados custo de análise, grande quantidade de amostra requerida e grande geração de passivos ambientais. A técnica analítica de Fluorescência de Raios-X por Reflexão Total (TXRF) utiliza uma pequena quantidade de amostra ($\leq 10\mu\text{L}$), que garante a formação de um filme fino e torna desnecessário métodos de correção por efeito de matriz. A alta sensibilidade alcançada ($\mu\text{g/L}$), baixo custo de manutenção, pequena quantidade de consumíveis, rapidez e a versatilidade, tornaram-na uma poderosa ferramenta para a análise química. Desta forma, com a simplicidade e eficiência da técnica TXRF a sua utilização pode ter grande empregabilidade em diversos setores industriais através de quantificação de metais por exemplo na análise de efluentes industriais e de alguma etapa do processo industrial.

Para a análise de ânions e cátions (F^- , Cl^- , NO_3^- , PO_4^{3-} , SO_4^{2-} , Na^+ , K^+ , NH_4^+ , Mg^{2+} , Ca^{2+}) métodos tradicionais empregam análises por titulação e colorimetria. Essas técnicas apresentam limitações com relação às interferências elementares, dificuldade de automatização e geração de passivos ambientais pelo grande uso de reagentes. Assim, a cromatografia de íons tornou-se uma alternativa para laboratórios que necessitam analisar um grande número de amostras. A técnica permite a quantificação de cátions e ânions simultaneamente. Existe a necessidade de desenvolvimento e validação de métodos analíticos que atendam aos órgãos de fiscalização ambiental e às indústrias explorando as possibilidades analíticas de preparação de amostras *inline* e avaliação das possibilidades das três formas de detecção (condutométrica, amperométrica e UV-visível).

Assim, o uso de técnicas analíticas de ponta, torna possível o acompanhamento de processos para obtenção de produtos cada vez mais específicos, por auxiliarem a avaliação dos efeitos das variáveis de processos no produto final. Além disso, permitem o monitoramento dos efluentes dos processos industriais. Como também podem contribuir para a prospecção de compostos antioxidantes em plantas nativas da biodiversidade brasileira.

O Instituto Nacional de Tecnologia através da Divisão de Química Analítica tem um histórico de desenvolvimento científico e tecnológico na área do Projeto 3, podendo-se citar algumas linhas de pesquisas já desenvolvidas/em desenvolvimento: (i) Otimização e implantação de novas metodologias de cromatografia, aplicados ao controle da oxidação de biodiesel (ii) - Avaliação da substituição parcial de farinha de trigo por farinha de resíduo de frutas e hortaliças em formulação em produto alimentício com avaliação de aspectos nutricionais; (iii) Caracterização química e avaliação do potencial da sálvia (*salvia officinalis*) e pata-de-vaca (*bauhinia forticata*) para o tratamento de diabetes tipo II; (iv) Microencapsulação de extrato hidroetanólico de resíduo de juçara; (v) Aproveitamento da casca de banana como fonte de antioxidantes; (vi) Desenvolvimento, otimização e validação da espectrometria de fluorescência de raios-X por reflexão total; (vii) Oligomerização do glicerol.

1.3 - Objetivo Geral

O objetivo deste projeto é desenvolver metodologias analíticas avançadas, caracterizar e acompanhar o processamento de resíduos agroindustriais, plantas medicinais e amostras ambientais, visando a obtenção de produtos acabados de maior valor agregado.

Objetivo Específico 2: Caracterização química e avaliação do potencial antioxidante de plantas medicinais, como *Bauhinia forficata* (pata-de-vaca) e *Salvia Officinalis* (sálvia), botanicamente identificadas, e suas amostras comerciais.

Objetivo Específico 4: Desenvolvimento e validação de metodologias analíticas destinadas à análise de constituintes inorgânicos (cátions e ânions: F^- , Cl^- , NO_3^- , PO_4^{3-} , SO_4^{2-} , Na^+ , K^+ , NH_4^+ , Mg^{2+} , Ca^{2+}) por cromatografia de íons voltadas para aplicação em amostras de efluentes industriais.

Modalidade de Bolsas

Formação Acadêmica / Titulação	Área de Experiência	Objetivo Específico	PCI categoria/nível	Meses	quantidade
Técnico nível médio	Técnico em Química, Técnico em Alimentos e Técnico em Farmácia.	2	D-E	60	1
Graduação	Química; Química Industrial; Engenharia Química	4	D-D	60	1

Atividades de Execução

Atividades	Objetivo Específico	Indicadores	Metas				
			2019	2020	2021	2022	2023
Revisão bibliográfica – Estado da arte	2	Relatório com a revisão bibliográfica	01	NA	NA	NA	NA
Planejamento das etapas experimentais	2	Planilha com o planejamento das etapas experimentais	01	NA	NA	NA	NA
Levantamento de insumos	2	Planilha de insumos levantados	01	NA	NA	NA	NA

Treinamento operacional nos equipamentos*	2	Relatório dos treinamentos realizados	NA	NA	NA	NA	NA
Captação das amostras de pata de vaca e sálvia botanicamente identificada e amostras comerciais	2	Obtenção das amostras de pata de vaca e sálvia	01	NA	NA	NA	NA
Caracterização química das amostras	2	Perfil de compostos fenólicos por HPLC-MS	01	01	NA	NA	NA
Avaliação do potencial antioxidante	2	Capacidade antioxidante por FRAP, DPPH e ABTS	01	01	NA	NA	NA
Preparo e caracterização das infusões	2	Perfil de compostos fenólicos por HPLC-MS e Capacidade antioxidante por FRAP, DPPH e ABTS	NA	01	01	NA	NA
Estudo dos componentes voláteis nas infusões	2	Perfil volátil por SPME-GC-MS	NA	NA	01	01	NA
Hidrodestilação das amostras	2	Obtenção das condições operacionais para a obtenção do óleo essencial	NA	NA	NA	01	NA
Caracterização química dos óleos essenciais	2	Perfil de compostos voláteis por CG-MS e Capacidade antioxidante por DPPH	NA	NA	NA	01	01

Elaboração de resumos/trabalhos completos para eventos científicos	2	Trabalhos elaborados para eventos científicos	NA	NA	01	01	01
Elaboração e submissão de artigos científicos	2	Artigo científico elaborado e submetido	NA	NA	NA	01	01
Elaboração de relatórios parciais (anual)	2	Relatórios elaborados	01	01	01	01	NA
Elaboração do relatório final do projeto	2	Relatório final do projeto	NA	NA	NA	NA	01
Planejamento das etapas experimentais	4	Planilha com o planejamento das etapas experimentais	01	NA	NA	NA	NA
Desenvolvimento e de metodologias analíticas para análise de cátions e ânions inorgânicos através da técnica de cromatografia de íons explorando a diálise (preparação de amostras <i>inline</i>) voltadas para análise de efluentes industriais	4	Metodologias desenvolvidas e implementadas	01	01	NA	NA	NA
Desenvolvimento e de metodologias analíticas através da técnica de cromatografia de íons explorando a detecção condutométrica para cátions e ânions inorgânicos	4	Metodologias desenvolvidas e implementadas	NA	01	NA	NA	NA

Desenvolvimento e de metodologias analíticas através da técnica de cromatografia de íons explorando a detecção amperométrica	4	Metodologias desenvolvidas e implementadas	NA	NA	01	NA	NA
Desenvolvimento e de metodologias analíticas através da técnica de cromatografia de íons explorando a detecção UV-Vis	4	Metodologias desenvolvidas e implementadas	NA	NA	01	NA	NA
Desenvolvimento e estabelecimento de metodologias experimentais através da técnica de cromatografia de íons com reação pós-coluna e detecção por UV-Vis	4	Metodologias desenvolvidas e implementadas	NA	NA	01	NA	NA
Validação das metodologias analíticas implementadas através da técnica de cromatografia de íons	4	Validação das metodologias analíticas realizadas	NA	NA	01	01	NA
Aplicação das metodologias validadas em amostras reais de efluentes industriais	4	Realização da aplicação em amostras de efluentes industriais	NA	NA	NA	01	01
Elaboração de relatórios parciais (anual)	4	Relatórios elaborados	01	01	01	01	NA
Elaboração de resumos/trabalhos completos para eventos científicos	4	Trabalhos elaborados para eventos científicos	NA	01	01	01	01

Elaboração e submissão de artigos científicos	4	Artigo científico elaborado e submetido	NA	NA	NA	01	NA
Elaboração do relatório final do projeto	4	Relatório final do projeto	NA	NA	NA	NA	01

NA – Não aplicável. * Não é possível estabelecer metas quantitativas para essas atividades.

Cronograma de Atividades

Objetivo específico 2

Atividades	Semestre									
	2019		2020		2021		2022		2023	
	1	2	1	2	1	2	1	2	1	2
Revisão bibliográfica – Estado da arte	x									
Planejamento das etapas experimentais	x									
Levantamento de insumos	x									
Treinamento operacional nos equipamentos	x	x								
Captação das amostras de pata de vaca e sálvia botanicamente identificada e amostras comerciais	x	x								
Caracterização química das amostras		x	x							
Avaliação do potencial antioxidante		x	x							
Preparo e caracterização das infusões				x	x					
Estudo dos componentes voláteis nas infusões						x	x			
Hidrodestilação das amostras							x	x		
Caracterização química dos óleos essenciais								x	x	

Elaboração de resumos/trabalhos completos para eventos científicos						X		X		X	
Elaboração e submissão de artigos científicos								X		X	
Elaboração de relatórios parciais (anual)		X		X		X			X		
Elaboração do relatório final do projeto										X	X

Objetivo específico 4

Atividades	Semestre										
	2019		2020		2021		2022		2023		
	1	2	1	2	1	2	1	2	1	2	
Revisão bibliográfica – Estado da arte	X	X									
Planejamento das etapas experimentais	X	X									
Desenvolvimento e de metodologias analíticas para análise de cátions e ânions inorgânicos através da técnica de cromatografia de íons explorando a diálise (<i>inline</i>) voltadas para análise de efluentes industriais		X	X								
Desenvolvimento e de metodologias analíticas através da técnica de cromatografia de íons explorando a detecção condutométrica para cátions e ânions inorgânicos				X							

Desenvolvimento e de metodologias analíticas através da técnica de cromatografia de íons explorando a detecção amperométrica					X				
Desenvolvimento e de metodologias analíticas através da técnica de cromatografia de íons explorando a detecção UV-Vis						X			
Desenvolvimento e estabelecimento de metodologias experimentais através da técnica de cromatografia de íons com reação pós-coluna e detecção por UV-Vis						X			
Validação das metodologias analíticas implementadas através da técnica de cromatografia de íons						X	X		
Aplicação das metodologias validadas em amostras reais de efluentes industriais								X	X
Elaboração de relatórios parciais (anual)		X		X		X		X	
Elaboração de resumos/trabalhos completos para eventos científicos		X		X		X		X	X
Elaboração e submissão de artigos científicos					X			X	
Elaboração do relatório final do projeto									X

Produtos

Produtos	Objetivo Específico	Indicadores	Metas				
			2019	2020	2021	2022	2023

Artigo científico submetido para publicação	2	Nº de artigos científicos submetidos	-	-	-	01	01
Artigo científico publicado	2	Nº de artigos científicos publicados	-	-	-	01	01
Resumo/trabalho completo apresentados em evento científico na forma de pôster e apresentação oral (congresso, encontro, workshop, simpósio, dentre outros)	2	Nº de trabalhos apresentados em eventos científicos	-	-	01	01	01
Artigo científico submetido para publicação	4	Nº de artigos científicos submetidos	-	-	01	-	01
Artigo científico publicado	4	Nº de artigos científicos publicados	-	-	01	-	01
Resumo/trabalho completo apresentados em evento científico na forma de pôster e apresentação oral (congresso, encontro, workshop, simpósio, dentre outros)	4	Nº de trabalhos apresentados em eventos científicos	01	01	01	01	01

Resultados Esperados

Resultados	Objetivo Específico	Indicadores	Metas				
			2019	2020	2021	2022	2023

Relevância para a sociedade: Caracterização de compostos potencialmente benéficos à saúde presentes nas frações de plantas medicinais (infusões e óleo essencial de cada espécie)*	2	-	-	-	-	-	-
Incremento da capacidade científica e tecnológica da instituição (DIQAN/INT)	2	Nº de artigos científicos publicados Nº de resumos/trabalhos completos apresentados em eventos científicos Nº de relatórios entregues para o orientador/supervisor do bolsista	01	01	02	03	03

Incremento da capacidade científica e tecnológica do bolsista	2	<p>Nº de artigos científicos publicados</p> <p>Nº de resumos/trabalhos completos apresentados em eventos científicos</p> <p>Nº de relatórios entregues para o orientador/supervisor do bolsista</p>	01	01	02	03	03
Incremento da capacidade científica e tecnológica da instituição (DIQAN/INT)	4	<p>Nº de artigos científicos publicados</p> <p>Nº de resumos/trabalhos completos apresentados em eventos científicos</p>	01	01	02	01	02

Relevância para empresas e sociedade e meio ambiente. Geração de valor econômico, ambiental e social: desenvolvimento de metodologias analíticas validadas para caracterização de produtos possibilitando ainda o acompanhamento da produção de efluentes industriais *	4	-	-	-	-	-	-
Incremento da capacidade científica e tecnológica do bolsista	4	Nº de artigos científicos publicados Nº de resumos/trabalhos completos apresentados em eventos científicos	01	01	02	01	02

*Não é possível estabelecer uma meta para este resultado.

Referências Bibliográficas

Objetivo específico 2

- [1] COSTA, N. M. B., ROSA, C. de O. B. Alimentos funcionais: componentes bioativos e efeitos fisiológicos. Editora Rubio, 2016.

- [2] HASENCLEVER, L., PARANHOS, J., COSTA, C. R., CUNHA, G., DIEGO VIEIRA. A indústria de fitoterápicos brasileira: desafios e oportunidades. **Ciência & Saúde Coletiva**, v. 22, n. 8, p.2559-2569, 2017.
- [3] VEIGA JUNIOR, V. F.; PINTO, A. C.; MACIEL, M. A. M. Plantas medicinais: cura segura? **Química Nova**, v.28, n.3, p.519-528, 2005.

Objetivo específico 4

- [1] Y. Xiong, Q. Wang, X. Li, S. Fang, e M. Duan, “Total Sulfur Dioxide Determination in Red Wine by Suppressed Ion Chromatography with In-Sample Oxidation and SPE”, *Chromatographia*, vol. 81, n° 7, p. 1003–1011, 2018.
- [2] R. Michalski, “Ion Chromatography Applications in Wastewater Analysis”, *Separations*, vol. 5, n° 1, p. 16, 2018.
- [3] Y. Bichsel e U. Von Gunten, “Determination of iodide and iodate by ion chromatography with postcolumn reaction and UV/visible detection”, *Anal. Chem.*, vol. 71, n° 1, p. 34–38, 1999.
- [4] A. F. Campos e R. J. Cassella, “Determination of acetate and formate in vegetable oils by ion chromatography after multivariate optimization of the extraction process using a Doehlert design”, *Food Chem.*, vol. 269, n° May, p. 252–257, 2018.

Projeto 8 - Tecnologias analíticas para tabaco e derivados.

Introdução

A OMS indica o tabaco com um fator de risco para seis das oito principais causas de morte no mundo, matando uma pessoa a cada seis segundos causando mais de cinco milhões de falecimentos, com previsão de mais de oito milhões em 2030 se nenhuma medida for tomada. Considerando os impactos gerados a saúde em decorrência da utilização de produtos derivados do tabaco; considerando que a análise dos conteúdos e emissões dos derivados do tabaco é uma ferramenta fundamental para a avaliação dos riscos associados a estes produtos; considerando a complexidade técnica exigida em análises desta natureza; considerando que muitos dos produtos derivados do tabaco demandam de análises criteriosas, principalmente do ponto de vista fiscal, há uma necessidade premissa de desenvolvimento de métodos analíticos e suas validações, seguindo normas de qualidade que garantirão a confiabilidade dos resultados das análises, tornando-os compatíveis com os padrões internacionais, de forma que possam gerar o conhecimento do produto e corroborar com ações de vigilância sanitária.

Nesse contexto, o Instituto Nacional de Tecnologia tem em sua estrutura o Laboratório de Tabaco e Derivados (LATAB) que tem trabalhado em projetos de pesquisa utilizando o tabaco como sua matriz principal.

1.3 - Objetivo Geral

O objetivo deste projeto é o desenvolvimento e validação de metodologias analíticas que serão utilizadas na determinação de diferentes constituintes em tabaco e produtos derivados, possibilitando à aplicação de metodologias alternativas às preconizadas e controle para novos parâmetros ainda não normatizados.

Objetivo Específico 3: Avaliação de açúcares e compostos nitrogenados de baixo peso molecular em tabaco e produtos derivados.

Modalidade de Bolsa

Formação Acadêmica / Titulação	Área de Experiência	Objetivo Específico	PCI categoria/nível	Meses	quantidade
Técnico com experiência ou Graduado	Química e áreas a fins	3	D-D	60	01

Atividades de Execução

Atividades	Objetivo Específico	Indicadores	Metas				
			2019	2020	2021	2022	2023

Revisão bibliográfica	3	Relatório com a revisão bibliográfica	01	01	01	01	01
Planejamento das etapas experimentais	3	Planilha com o planejamento das etapas experimentais	01	01	01	01	01
Levantamento de insumos	3	Planilha de insumos levantados	01	01	01	01	01
Treinamento operacional nos equipamentos*	3	Relatório dos treinamentos realizados	-	-	-	-	01
Desenvolvimento e validação de metodologias analíticas para avaliação de açúcares *	3	Métodos desenvolvidos e resultados da validação	-	-	-	-	-
Desenvolvimento e validação de metodologias analíticas para a avaliação de amônia, amônio e nitrogênio amoniacal*	3	Métodos desenvolvidos e resultados da validação	-	-	-	-	-
Desenvolvimento e validação de metodologias analíticas para a avaliação de nitritos e nitratos*	3	Métodos desenvolvidos e resultados da validação	-	-	-	-	-
Apresentação do projeto e dos resultados dentro da divisão/instituição	3	Apresentação oral	01	01	01	01	01
Aplicação das metodologias desenvolvidas em amostras*	3	Relatório dos resultados obtidos	-	-	-	-	-

Elaboração de relatórios parciais (semestral e anual)	3	Relatórios elaborados	02	02	02	02	01
Elaboração de resumos/trabalhos completos para eventos científicos	3	Trabalhos elaborados para eventos científicos	NA	01	01	01	01
Elaboração e submissão de artigos científicos	3	Artigo científico elaborado e submetido	NA	NA	01	NA	01
Elaboração do relatório final do projeto	3	Relatório final do projeto	NA	NA	NA	NA	01

* Não é possível estabelecer metas quantitativas para essas atividades.

NA – Não Aplicável

Cronograma de Atividades Objetivo Específico 3

Atividades	Semestre									
	2019		2020		2021		2022		2023	
	1	2	1	2	1	2	1	2	1	2
Revisão bibliográfica	x	x	x	x	x	x	x	x	x	
Planejamento das etapas experimentais	x		x		x		x		x	
Levantamento de insumos	x		x		x		x		x	
Treinamento operacional nos equipamentos	x	x								
Desenvolvimento e validação de metodologias analíticas para avaliação de açúcares		x	x	x						
Desenvolvimento e validação de metodologias analíticas para a avaliação de amônia, amônio e nitrogênio amoniacal				x	x	x				

Desenvolvimento e validação de metodologias analíticas para a avaliação de nitritos e nitratos					X	X	X			
Aplicação das metodologias desenvolvidas em amostras comerciais					X	X	X	X	X	
Elaboração de relatórios parciais (semestral e anual)	X	X	X	X	X	X	X	X	X	
Apresentação do projeto e dos resultados dentro da divisão/instituição (finalidade de divulgar os resultados obtidos, propiciar discussões técnicas e difusão do conhecimento)		X		X		X		X		X
Elaboração de resumos/trabalhos completos para eventos científicos para eventos científicos			X		X		X		X	
Elaboração e submissão de artigos científicos						X				X
Elaboração do relatório final do projeto										X

Produtos

Produtos	Objetivo Específico	Indicadores	Metas				
			2019	2020	2021	2022	2023
Relatórios	3	Nº de relatórios entregues para o orientador/supervisor do bolsista	02	02	02	02	02
Apresentações dentro da divisão/instituição	3	Nº de apresentações internas realizadas pelo bolsista	01	01	01	01	01

Resumo/trabalho completo apresentados em evento científico na forma de pôster e/ou apresentação oral (congresso, encontro, workshop, simpósio, dentre outros)	3	Nº de trabalhos apresentados em eventos científicos	00	01	01	01	01
Artigo científico submetido para publicação	3	Nº de artigos científicos submetidos	00	00	01	00	01
Artigo científico publicado	3	Nº de artigos científicos publicados	00	00	00	00	02

Resultados Esperados

Resultados	Objetivo Específico	Indicadores	Metas				
			2019	2020	2021	2022	2023
Relevância para a sociedade: desenvolvimento de tecnologia para avaliação dos constituintes de tabaco e produtos derivados para auxiliar a erradicação do tabagismo e minimizar sua iniciação	3	-	-	-	-	-	-

Incremento da capacidade científica e tecnológica da instituição (DIQAN/INT)	3	<p>Nº de artigos científicos publicados</p> <p>Nº de resumos/trabalhos completos apresentados em eventos científicos</p> <p>Nº de relatórios entregues para o orientador/supervisor do bolsista</p> <p>Nº de apresentações internas realizadas pelo bolsista</p>	03	04	04	04	06
Incremento da capacidade científica e tecnológica do bolsista	3	<p>Nº de artigos científicos publicados</p> <p>Nº de resumos/trabalhos completos apresentados em eventos científicos</p> <p>Nº de relatórios entregues para o orientador/supervisor do bolsista</p> <p>Nº de apresentações internas realizadas pelo bolsista</p>	03	04	04	04	06

* Não é possível estabelecer meta quantitativa para esse resultado.

Referências Bibliográficas

Objetivo específico 3

[1] JANSEN, E., et al. Simple Determination of Sugars in Cigarettes. Journal of Analytical & Bioanalytical Techniques, v. 5, n. 6, p. 1, 2014.

[2] VARGAS, S. T; PEREIRA, F. G.L; CARLETTO, J. P. M., CHIAPETTA, S. C., NETTO, A. D. Desenvolvimento de método para determinação de açúcares em cigarros por adição padrão

utilizando UPLC-ELSD. In. reunião anual da sociedade brasileira de química SBQ, 37^a, 2014. Natal. Anais... Natal: SBQ. 2014.

[3] PAUMGARTTEN, Francisco José Roma; GOMES-CARNEIRO, Maria Regina; OLIVEIRA, Ana Cecília Amado Xavier de. O impacto dos aditivos do tabaco na toxicidade da fumaça do cigarro: uma avaliação crítica dos estudos patrocinados pela indústria do fumo. Cad. Saúde Pública, Rio de Janeiro, v. 33, supl. 3, e00132415, 2017.

Projeto 9- Utilização de técnicas avançadas de manufatura e de caracterização para desenvolvimento de DMIs

Introdução

Entende-se por Dispositivos Médicos Implantáveis (DMIs) qualquer produto médico projetado para ser totalmente introduzido no corpo humano ou para substituir uma superfície epitelial ou ocular, por meio de intervenção cirúrgica, e destinado a permanecer no local após a intervenção. Também é considerado DMI, qualquer produto médico destinado a ser parcialmente introduzido no corpo humano através de intervenção cirúrgica e permanecer após esta intervenção por longo prazo. Os DMIs são utilizados por uma vasta parcela da sociedade, porém, a população idosa merece maior atenção nesse aspecto. A população brasileira de pessoas acima de 60 anos chegou a 13% e, em 2018, havendo uma expectativa que esse índice atinja 32% até 2060. Dados indicam que o principal motivo da utilização de DMIs pela população idosa é a deterioração da qualidade óssea. A revolução da impressão 3D na saúde baseia-se no conceito da medicina personalizada. Esta tecnologia é aderente aos segmentos industriais que produzem baixo volume de unidades e que necessitam de produtos individualizados/customizados de alta qualidade e complexidade. Desta forma, é possível que o processo de manufatura avançada possa substituir os métodos tradicionais de fabricação como a usinagem e a fundição na produção de DMIs utilizando como matéria-prima materiais biocompatíveis.

O presente projeto tem como finalidade o estudo da fabricação de DMIs com materiais metálicos biocompatíveis, levando em consideração o processo de manufatura e a composição química dos materiais utilizados na produção desses dispositivos. Além disso, este projeto abordará aspectos relacionados à degradação da qualidade óssea causada pelo processo de desmineralização óssea (osteoporose), fator que impacta o número de DMIs utilizadas pela sociedade e que pode afetar o projeto de novas próteses. Nesse sentido, serão utilizadas técnicas avançadas de caracterização de materiais (qBEI, MEV, MET, EBSD, DRX, microCT, etc), processamento digital de imagens, ensaios mecânicos, simulação numérica por elementos finitos. Em relação especificamente ao processo de fabricação de DMIs, este projeto irá abordar os seguintes aspectos do processo de manufatura avançada: Validação do processo; Caracterização e controle da matéria-prima; Etapas de processamento e pós processamento; Avaliação física, química e mecânica.

Este projeto é aderente às pesquisas atualmente desenvolvidas na Divisão de Ensaios em Materiais e Produtos (DIEMP) no Instituto Nacional de Tecnologia (INT) relacionadas à área de

saúde, mais especificamente aos temas de envelhecimento humano e desenvolvimento de próteses/órteses.

Objetivo Geral

O presente projeto tem como finalidade entender as eventuais diferenças de propriedades mecânicas, metalúrgicas, químicas e microestruturais de DMIs fabricadas com materiais biocompatíveis por manufatura tradicional e avançada. As propriedades mecânicas das DMIs serão relacionadas com às de tecidos ósseos desmineralizados com o intuito de aprimorar o projeto de novas próteses.

Objetivo Específico 1: Determinar a resistência à fratura e o módulo elástico do tecido ósseo antes e após o processo de desmineralização óssea com diferentes taxas de carregamento;

Objetivo Específico 2: Avaliar as propriedades mecânicas, metalúrgicas, químicas e microestruturais e a resistência à corrosão de DMIs fabricadas com materiais metálicos biocompatíveis por manufatura tradicional;

Objetivo Específico 3: Comparar a resistência mecânica e rigidez angular em órteses fabricadas pela técnica tradicional (termomoldagem em polipropileno - PP) e por manufatura avançada (Sinterização seletiva a laser - SLS em poliamida - PA);

Objetivo Específico 4: Avaliar as propriedades mecânicas, metalúrgicas, químicas e microestruturais de DMIs fabricadas com materiais metálicos biocompatíveis por manufatura avançada, caracterizando a matéria-prima, validando o processo como um todo.

Modalidade de Bolsas

Formação Acadêmica / Titulação	Área de Experiência	Objetivo Específico	PCI categoria/nível	Meses	Quantidade
Doutorado	Engenharia de Materiais ou química ou mecânica ou física	2	D-A	60	1
Doutorado	Engenharia de Materiais ou química ou mecânica ou física	4	D-A	60	1

Atividades de Execução

As atividades de pesquisa serão realizadas no Laboratório de Caracterização de Propriedades Mécânicas e Microestruturais (LACPM) da Divisão de Ensaio em Materiais e Produtos (DIEMP), do

Instituto Nacional de Tecnologia (INT), sob a supervisão dos pesquisadores Cássio Barbosa, Cláudio Teodoro dos Santos e Maurício de Jesus Monteiro. As atividades relacionadas aos objetivos específicos 2 e 4 são as seguintes:

Atividade 1 - Preparação metalográfica de amostras de DMIs.

Atividade 2- Ensaio mecânico em DMIs.

Atividade 3- Ensaio de corrosão em DMIs.

Atividade 4- Caracterização química e por microscopias óptica e eletrônicas de amostras de DMIs.

Atividade 5– Realização de cálculos termodinâmicos utilizando programa específico simulando possíveis materiais metálicos para DMIs.

Atividade 6- Caracterização da matéria-prima (pó metálico) por análises térmicas, Microscopias óptica e eletrônicas, análise química, EDS, BET, densidade real, e distribuição de tamanho de partícula.

Atividade 7- Impressão de corpos de prova segundo orientações e direções descritas em normas e literatura técnicas.

Atividade 8- Caracterização dimensional dos corpos de prova. Realização de ensaios mecânicos (tração, fadiga, dureza) e caracterização por microscopias óptica e eletrônica, difração de Raios-X, difração de elétrons retroespalhados (EBSD) e densidade aparente dos corpos de prova impressos.

Atividade 9- Realização dos tratamentos térmicos nos corpos de prova impressos nas condições ótimas de impressão definidas na etapa 16. Caracterização dimensional dos corpos de prova. Realização de ensaios mecânicos (tração, fadiga, dureza) e caracterização por microscopias óptica e eletrônica, difração de Raios-X, difração de elétrons retroespalhados (EBSD) e densidade aparente dos corpos de prova tratados termicamente.

Atividade 10- Impressão e tratamento térmico de DMIs com os parâmetros ótimos definidos na atividade 17. Caracterização dimensional, realização de ensaios mecânicos (fadiga e dureza) e caracterização por microscopias óptica e eletrônica, difração de Raios-X e difração de elétrons retroespalhados (EBSD) das DMIs.

Atividades	Objetivo Específico	Indicadores	Metas				
			2019	2020	2021	2022	2023
1	2	Número de amostras preparadas	120				
2	2	Relatório Emitido		1			
3	2	Números de cps ensaiados			60		
4	2	Relatório emitido				1	
5	2	Relatório emitido					1
6	4	Relatório emitido	1				
7	4	Número de cps impressos		80			
8	4	Relatório Emitido			1		
9	4	Relatório Emitido				1	
10	4	Relatório Emitido					1

Cronograma de Atividades

Atividades	Semestre									
	2019		2020		2021		2022		2023	
	1	2	1	2	1	2	1	2	1	2
1	X	X								
2			X	X						
3					X	X				
4							X	X		
5									X	X
6	X	X								
7			X	X						
8					X	X				
9							X	X		
10									X	X

Produtos

Produtos	Objetivo Específico	Indicadores	Metas				
			2019	2020	2021	2022	2023

Conhecimento sobre as propriedades mecânicas, química, microestruturais e metalúrgica e resistência à corrosão de DMIs	2	Número de artigos científicos submetidos			1	1	
Conhecimento sobre as propriedades mecânicas, metalúrgicas, químicas e microestruturais de DMIs fabricadas por manufatura avançada	4	Número de artigos científicos submetidos			1	1	1
Conhecimento sobre as diferenças de propriedades mecânicas, metalúrgicas, químicas e microestruturais de DMIs fabricadas por manufatura e de tecidos ósseos desmineralizados	1, 2, 4	Número de artigos científicos submetidos			1	1	1

Resultados Esperados

Resultados	Objetivo Específico	Indicadores	Metas				
			2019	2020	2021	2022	2023

Colaborações com outras instituições	1,2,3,4	Número de artigos publicados com autores de outras instituições		1	1	1	1
Formação de recursos humanos	1, 2, 3, 4	Número de bolsistas de iniciação científica ou tecnológica treinados	3	3	3	3	3
Formação de recursos humanos	1, 2, 3, 4	Número de coorientação em trabalho de conclusão de curso	4	2	2	2	2
Formação de recursos humanos	1, 2, 3, 4	Número de estagiários treinados	2	1	1	1	1
Conjunto de dados sobre as propriedades mecânicas, química, microestruturais e metalúrgica e resistência à corrosão de DMIs	2	Relatório emitido				1	
Conjunto de dados sobre as propriedades mecânicas, metalúrgicas, químicas e microestruturais de DMIs fabricadas por manufatura avançada	4	Relatório emitido					1

Conjunto de dados sobre as diferenças de propriedades mecânicas, metalúrgicas, químicas e microestruturais de DMIs fabricadas por manufatura e de tecidos ósseos desmineralizados	1,2,3,4	Relatório emitido					1
---	---------	-------------------	--	--	--	--	---

Projeto 10- Desenvolvimento de Metamateriais em impressão 3D para aplicação em Tecnologia Assistiva.

Introdução

Na área de desenvolvimento de produto, especialmente na área de design, conciliar as necessidades da forma com o atendimento das solicitações mecânicas frequentemente é um desafio, pois é preciso relacionar uma variedade de propriedades de diferentes materiais e mecanismos com necessidades dos usuários.

O grande número de relações e conexões entre os elementos em um produto aumenta o risco de falhas e quebras. Por isso, sempre que possível, é estratégico reduzir o número de componentes através da incorporação de propriedades, que inicialmente seriam adicionadas por componentes extras, no próprio material do produto.

Uma forma de atender esse conceito é através do design de Metamateriais mecânicos. Essa nova abordagem projetual se caracteriza por alterar o desempenho às solicitações físicas (neste caso mecânicas) de um objeto de mesma composição química e geometria externa, graças ao desenho de micro estruturas internas.

Outro conceito central do presente projeto é a Manufatura Aditiva (MA). Esta se caracteriza pela impressão 3D de peças finais através da deposição de material seguindo um modelo virtual previamente modelado. Como não exige a construção de moldes ou matrizes, esse modal torna exequível a fabricação de geometrias de maior complexidade do que outros meios produtivos e permite desenvolvimento de produtos personalizados a custo viável, em contraste com a fabricação convencional, que depende de larga produção em massa para obter custos razoáveis.

A combinação dessas duas novas tecnologias, metamateriais e produção via impressão 3D, abrem diversos campos de P&D no design. Um dos mais interessantes é a produção de equipamentos para Pessoas com Deficiência - PcD.

Esses equipamentos, também chamados de Tecnologia Assistiva¹, tipicamente precisam ser dimensionados sob medida, individualmente, uma vez que cada deficiência é única e as necessidades da PcD são muito específicas e particulares. Por exemplo, uma pessoa amputada ou com má formação precisa de próteses que se encaixem com perfeição no membro residual (coto), com sua dimensão, morfologia, sensibilidade, tônus muscular particulares.

Portanto, esse projeto pretende explorar as possibilidades de produção de metamateriais em processos de impressão 3D, estudando a interface entre os efeitos da microestrutura do material com a geometria da peça. Produtos desenvolvidos com esse tipo de tecnologia “embarcada” podem ser considerados como um uso avançado e otimizado da tecnologia de impressão 3D, que atende ao conceito da Industrialização 4.0 com redução de montagem, falhas e custos; eliminação de uniões desnecessárias; criação de sistemas mecânicos mais robustos e

¹ área do conhecimento que engloba produtos, recursos, estratégias, práticas e serviços que objetivam promover a funcionalidade, relacionada à atividade e participação de pessoas com deficiência, incapacidades ou mobilidade reduzida, visando sua autonomia, independência, qualidade de vida e inclusão social CAT (2006).

customizados através da redundância de elementos, além de produtos de densidades distintas mesmo que usando impressoras de um só material.

Dentro das facilidades disponibilizadas pelo LAMOT para a geração de geometrias e testes virtuais dos metamateriais, destaca-se o processo de Modelagem Virtual Paramétrica obtida por programas computacionais com o Solidworks e o Rhinoceros, além do Solidworks Simulation Premium 2017, que permite analisar estruturalmente os modelos gerados ainda em ambiente virtual. Por fim, a materialização de modelos se dará através de processos de Sinterização Seletiva à Laser (SLS) no equipamento EOS-Formiga P110, que produz peças em poliamida de excelentes resistência mecânica e detalhamento geométrico. A DIEMP (Divisão de Ensaio em Materiais e Produtos) e a DPCM (Divisão de Processamento e Caracterização de Materiais) contribuirão com a realização de ensaios mecânicos virtuais e físicos, validação do resultado das simulações e entendimento dos efeitos da microestrutura e comportamento mecânico do material de base nas propriedades finais das peças de metamateriais.

Objetivo Geral

Projetar próteses/órteses a serem impressas via manufatura aditiva, fazendo uso de metamateriais.

Objetivo Específico 1: Por meio da revisão bibliográfica e de patentes, fazer um mapeamento das tecnologias empregadas na geração de metamateriais mecânicos: *Softwares*: aplicativos para modelagem e análise de elementos finitos das geometrias; e *Hardwares*: técnicas/máquinas/impressoras 3D que viabilizem a produção desses materiais e máquinas de ensaios mecânicos para análise e validação; assim como, *Materiais*: mais utilizados ou com potencial para serem adaptados a esse tema;

Objetivo Específico 2: Localizar e contatar potenciais parceiros e atores: competências internas e externas que auxiliem o desenvolvimento do Instituto nos campos das tecnologias digitais, metamateriais e tecnologia assistiva;

Objetivo Específico 3: Realizar uma revisão bibliográfica sobre padrões geométricos, produtos e testes mecânicos realizados em metamateriais, em escala macro e/ou micro, com o intuito de gerar densidades variáveis ou mecanismos;

Objetivo Específico 4: Caracterização das propriedades do material da impressora 3D e de padrões geométricos selecionados e ajustados às tecnologias digitais.;

Objetivo Específico 5: Projeto de partes de próteses e/ou órteses inteiras que façam uso dos padrões geométricos compatíveis com as características da tecnologia; ensaios mecânicos virtuais e físicos necessários para avaliação/validação das propriedades mecânicas do metamaterial;

Objetivo Específico 6: Impressão 3D de protótipos de próteses/órteses finais selecionados; Ensaios mecânicos do produto; Condução de experimentos de laboratório, que contribuam para a validação dos conceitos;

Objetivo Específico 7: Memória de Pesquisa. Sugerir formas de melhorias à estrutura já existente no para o desenvolvimento de metamateriais; Elaboração de material escrito apresentando as conclusões, sugestões e propostas para subsidiar novas pesquisas sobre o assunto.

Modalidade de Bolsas

Preferencialmente, o profissional a ocupar a vaga deve ter formação em Engenharia mecânica / química / material. Designers de produto e Arquitetos que tenham especialização ou experiência prévia com análise estrutural de objetos, também serão qualificáveis.

Exigência:

- Domínio em softwares de Análise de Elementos Finitos (análise estrutural);
- Experiência em pesquisa e publicação de artigos;

Desejável:

- Habilidade para modelagem 3D (Rhinoceros e Solidworks);
- Experiência com hardware e softwares de impressão 3D;
- Experiência com o desenvolvimento/caracterização de materiais;

Formação Acadêmica / Titulação	Área de Experiência	Objetivo Específico	PCI catego/nível	Meses	quant
Engenheiro mecânico, ou de materiais ou químico, ou designer ou Arquiteto / Mestrado	Desenvolvimento e análise de estruturas geométricas	todos	D-C	60	1

Atividades de Execução

A presente proposta inclui a revisão do estado da arte sobre o assunto, caracterização do material padrão da impressora SLS e impressão de designs de metamateriais mecânicos. Serão realizadas simulações em elementos finitos dos metamateriais, ensaios mecânicos de caracterização e posterior comparação dos resultados.

Atividades	Objetivo Específico	Indicadores	Metas				
			2019	2020	2021	2022	2023
Mapeamento da tecnologia	1	artigos de revisão da tecnologia	1				
Mapeamento de parceiros e atores deste segmento	2	congressos, contatos de parceria		1			

Revisão Bibliográfica de produtos e padrões de metamateriais	3	artigos de revisão da tecnologia		1				
Caracterização do material de impressão 3D e de padrões geométricos	4	Relatório comparativo entre as amostras de materiais e metamateriais			1			
Projeto de Próteses/Órteses	5	Desenvolvimento e Testes dos modelos impressos 3D e Artigo				1		
Produção e testes dos protótipos selecionados	6	Artigos e materiais/produtos físicos impressos				2	2	
Memória de Pesquisa	7	Proteção Intelectual; Artigos de divulgação expertise						1

Cronograma de Atividades

Atividades	Semestre									
	19		20		21		22		23	
	1	2	1	2	1	2	1	2	1	2
Mapeamento da tecnologia	X	X					X	X		
Mapeamento de parceiros e atores deste segmento		X	X						X	X
Revisão de produtos e padrões de metamateriais		X	X							
Caracterização do material e de padrões geométricos adaptados às tecnologias disponíveis				X	X					
Projetos e testes						X	X			
Produção piloto e testes laboratoriais								X	X	
Memória de Pesquisa									X	X

41.6 – Produtos

Produtos	Objetivo Específico	Indicadores	Metas				
			19	20	21	22	23
Artigos de revisão da tecnologia	1	Aceite do artigo em revistas e congressos	1				
Artigo de revisão dos produtos e padrões de metamateriais	3	Aceite do artigo em revistas e congressos					

Artigo caracterização dos padrões de metamateriais desenvolvidos	4	Aceite do artigo em revistas e congressos			1		
Artigo sobre o projeto e testes	5	Aceite do artigo em revistas e congressos			1	1	
Produtos impressos com a tecnologia de metamateriais	5 e 6	Aceite de parceiros, premiações em concursos, patentes geradas e contratos de transferência tecnológica.			1	2	2
artigos de divulgação expertise	7	Aceite do artigo em revistas e congressos de relevância					1

Resultados Esperados

Resultados	Objetivo Específico	Indicadores	Metas				
			19	20	21	22	23
Cooperação transversal de áreas do INT	Todos	artigos com coautoria de profissionais de diferentes divisões		1			1
Cooperação externa ao INT	Todos	Intercâmbio entre pesquisadores, artigos e patentes com coautoria de diferentes empresas/instituições			1		1
Geração de novos desenhos aplicados	5	Solicitação de registro de Proteção Propriedade Industrial				2	2
Reconhecimento da expertise do INT sobre metamateriais	5 e 6	Convites para eventos e entrevistas					2

Referências

AUGUSTO MARINHO, J. **CALÇADO COM CONCEITO DE DESIGN E ENGENHARIA 3D, SOB MEDIDA, FEMININO, SALTO ALTO E CONFORTÁVEL.** [s.l.], [s.d.].

CHRISTENSEN, J. et al. **Vibrant times for mechanical metamaterials.** [s.l.], [s.d.]. DOI: 10.1557/mrc.2015.51.

SCHUMACHER, C. et al. **Microstructures to control elasticity in 3D printing.** In: *ACM Transactions on Graphics.* [s.l.]: [s.n.], 2015. Disponível em: <<http://dl.acm.org/citation.cfm?doid=2809654.2766926>>. Acesso em: 27/set./18. ISBN:

9781450333313, ISSN: 07300301, DOI: 10.1145/2766926.

YAN, Z. et al. **Controlled mechanical buckling for origami-inspired construction of 3D microstructures in advanced materials.** *Advanced functional materials*, [s.l.], v. 26, n° 16, p. 2629–2639, 2016. ISSN: 1616-301X, DOI: 10.1002/adfm.201504901.

Projeto 11- Biocompósitos de PBAT e resíduos agroflorestais

Introdução

O Brasil é um país favorável ao desenvolvimento de diversas culturas agrícolas e florestais, devido aos fatores relacionados ao clima e a qualidade de solo, além de dispor de grandes extensões de terra disponíveis as diversas culturas. Em se tratando dos produtos agrícolas típicos da região norte e dos estados vizinhos à região Amazônica, há diversas espécies que se destacam pela diversidade de utilização e pelas suas características apresentando um grande potencial na indústria de alimentos como também na indústria dos cosméticos. Os resíduos gerados em torno das atividades econômicas de espécies como o cupuaçu, açaí, castanha do pará, uccúba, bacuri entre outros concorrem para a contaminação ambiental, notadamente dos recursos hídricos e do solo. A sua utilização no preparo de biocompósitos é uma abordagem viável para redução do impacto ambiental.

Etapas anteriores do projeto obtiveram resultados satisfatórios para a utilização de resíduos do beneficiamento do cupuaçu, açaí, castanha do pará e casca de bacuri. Os resultados obtidos sinalizaram a melhoria das propriedades físico-mecânicas da matriz polimérica do poli(tereftalato-co-adipato de butileno) (PBAT - Ecoflex®), com aumento no módulo elástico e manutenção das propriedades térmicas e da estrutura cristalina dos biocompósitos, além de uma boa taxa de biodegradação em solo simulado.

Assim, a combinação de outras matrizes biodegradáveis como o amido e o poli(ácido láctico) PLA com fibras lignocelulósicas, advindas dos resíduos já estudados anteriormente e ainda a inserção de outros como a torta de ucuúba e da casca do ipê amarelo, é uma das alternativas para redução de impacto ambiental e geração de produtos de maior valor agregado. Neste contexto, a utilização destes resíduos agroflorestais amazônicos para o desenvolvimento de biocompósitos é uma possibilidade bastante interessante e objeto de estudo desse projeto, que se dedica a obter biocompósitos que combinem desempenho mecânico, durabilidade e biodegradabilidade, de modo que seja possível aplica-los à fabricação de embalagens em geral.

Cabe ressaltar ainda a disponibilidade de óleos vegetais amazônicos que podem ser incorporados aos biocompósitos, atuando como auxiliares de processamento, antioxidantes e corantes. Desta forma, estes também serão incorporados aos biocompósitos, particularmente os óleos de buriti e pracaxi.

Abaixo estão relacionadas as linhas de pesquisas em andamento no Laboratório de Tecnologia de Materiais Poliméricos da Divisão de Processamento e Caracterização de Materiais do Instituto Nacional de Tecnologia na área de materiais sustentáveis e reaproveitamento de resíduos:

- 1- Biocompósitos de PBAT e suas misturas com resíduos agroflorestais
- 2- Biocompósitos de amido com resíduos agroindustriais

Objetivo Geral

O presente projeto tem como objetivo desenvolver biocompósitos de matrizes biodegradáveis como o PBAT, PLA e amido com resíduos agroflorestais e agroindustriais, incorporando ainda óleos amazônicos como plastificantes e estabilizantes.

Objetivo Específico 1: Processamento de biocompósitos de PBAT, PLA e mistura PBAT/PLA com até 50% em massa de fibras lignocelulósicas advindas da torta da ucuúba e da casca do ipê amarelo, contendo até 1% de óleos amazônicos (buriti, pracaxi, açaí e babaçu)

Objetivo Específico 2: Processamento da base de amido com substituição do plastificante por óleos de buriti, pracaxi, açaí e babaçu.

Objetivo Específico 3: Processamento de biocompósitos de amido plastificados com óleos amazônicos contendo até 30% em massa de fibras lignocelulósicas advindas do beneficiamento do cupuaçu, açaí, castanha do pará, bacuri, e ucuúba, além de resíduos oriundos do beneficiamento do café, arroz e trigo.

Objetivo Específico 4: Caracterização da estabilidade térmica, propriedades mecânicas (tensão na ruptura, deformação máxima) antes e após UV, bem como morfologia e biodegradabilidade em solo simulado.

Modalidade de Bolsas

Formação Acadêmica / Titulação	Área de Experiência	Objetivo Específico	PCI categoria/nível	Meses	quantidade
Graduação	Engenharia Química ou Engenharia de Materiais	1 e 4	D-D	60	1

Atividades de Execução

Atividades	Objetivo Específico	Indicadores	Metas				
			2019	2020	2021	2022	2023
Pesquisa bibliográfica	1, 2, 3 e 4	Relatório parcial do levantamento bibliográfico	2				

Caracterização dos resíduos lignocelulósicos (agroflorestal e agroindustrial)	1 e 3	Relatório parcial da caracterização dos resíduos lignocelulósicos	1					
Caracterização dos óleos amazônicos	1, 2 e 3	Relatório parcial da caracterização dos óleos amazônicos	1					
Determinação das melhores condições de processamento dos biocompósitos de PBAT e PLA com resíduos agroflorestais	1	Relatório parcial dos parâmetros de processamento dos biocompósitos		1				
Determinação das melhores condições de processamento dos biocompósitos de PBAT e PLA com resíduos agroflorestais / óleos amazônicos	1	Relatório parcial dos parâmetros de processamento dos biocompósitos		1				
Caracterização dos biocompósitos de PBAT e PLA com resíduos agroflorestais e óleos amazônicos	4	Relatório parcial da caracterização dos biocompósitos			1			
Determinação das melhores condições de processamento do amido/óleo amazônico	2	Relatório parcial dos parâmetros de processamento do amido/óleo amazônico		1				
Determinação das melhores condições de processamento dos biocompósitos de amido/óleo amazônico com resíduos agroindustriais	3	Relatório parcial dos parâmetros de processamento dos biocompósitos de amido			1			
Caracterização dos biocompósitos de amido/óleo amazônico com resíduos agroindustriais	4	Relatório parcial da caracterização dos biocompósitos			1			
Participação e apresentação de trabalhos em congressos nacionais e/ou internacionais	1, 2, 3 e 4	Divulgação científica e tecnológica	2	2	2	2	2	2

Elaboração de artigos técnico-científicos e/ou pedidos de depósito de patentes	1, 2, 3 e 4	Divulgação científica e tecnológica			2	2	2
Registro, análise e discussão de resultados experimentais das pesquisas técnico-científicas	1, 2, 3 e 4	Relatório final de atividades					2

Cronograma de Atividades

Atividades	Semestre									
	2019		2020		2021		2022		2023	
	1	2	1	2	1	2	1	2	1	2
Pesquisa bibliográfica	X									
Caracterização dos resíduos lignocelulósicos (agroflorestal e agroindustrial)	X									
Caracterização dos óleos amazônicos		X								
Determinação das melhores condições de processamento dos biocompósitos de PBAT e PLA com resíduos agroflorestais			X							
Determinação das melhores condições de processamento dos biocompósitos de PBAT e PLA com resíduos agroflorestais/ óleos amazônicos				X						
Caracterização dos biocompósitos de PBAT e PLA com resíduos agroflorestais / óleos amazônicos					X					

Determinação das melhores condições de processamento do amido/óleo amazônico				X					
Determinação das melhores condições de processamento dos biocompósitos de amido/óleo amazônico com resíduos agroindustriais						X			
Caracterização dos biocompósitos de amido/óleo amazônico com resíduos agroindustriais						X			
Participação e apresentação de trabalhos em congressos nacionais e/ou internacionais		X		X		X		X	X
Elaboração de artigos técnico-científicos e/ou pedidos de depósito de patentes					X		X		X
Registro, análise e discussão de resultados experimentais das pesquisas técnico-científicas									X

Produtos

Produtos	Objetivo Específico	Indicadores	Metas				
			2019	2020	2021	2022	2023
Relatório parcial do levantamento bibliográfico	1, 2, 3 e 4	Nº de relatórios parciais	2				
Relatório parcial da caracterização dos resíduos lignocelulósicos (agroflorestal e agroindustrial)	1 e 3	Nº de relatórios parciais	1				

Relatório parcial da caracterização dos óleos amazônicos	1, 2 e 3	Nº de relatórios parciais	1				
Relatório parcial dos parâmetros de processamento dos biocompósitos de PBAT e PLA com resíduos agroflorestais	1	Nº de relatórios parciais		1			
Relatório parcial das melhores condições de processamento dos biocompósitos de PBAT e PLA com resíduos agroflorestais / óleos amazônicos	1	Nº de relatórios parciais		1			
Relatório parcial da caracterização dos biocompósitos de PBAT e PLA com resíduos agroflorestais/ óleos amazônicos	4	Nº de relatórios parciais			1		

Relatório parcial dos parâmetros de processamento do amido/óleo amazônico	2	Nº de relatórios parciais		1			
Relatório parcial das melhores condições de processamento dos biocompósitos de amido/ óleo amazônico com resíduos agroindustriais	3	Nº de relatórios parciais			1		
Relatório parcial da caracterização dos biocompósitos de amido/óleo amazônico com resíduos agroindustriais	4	Nº de relatórios parciais			1		
Divulgação científica e tecnológica	1, 2, 3 e 4	Nº de participações em eventos	2	2	2	2	2
Artigos técnico-científicos	1, 2, 3 e 4	Nº de artigos submetidos			2	2	2
Pedidos de depósito de patentes	1, 2, 3 e 4	Nº de pedidos de patentes submetidos				1	1
Relatório final de atividades	1, 2, 3 e 4	Nº de relatórios finais de atividades					2

Resultados Esperados

Resultados	Objetivo	Indicadores	Metas
------------	----------	-------------	-------

	Específico		2019	2020	2021	2022	2023
Seleção de resíduos lignocelulósicos (agroflorestal e agroindustrial) com volume adequado a produção industrial de biocompósitos	1, 2, 3 e 4	Relatórios parciais e final de atividades	1				
Seleção de óleos amazônicos com volume adequado a produção industrial de biocompósitos	1, 2, 3 e 4	Relatórios parciais e final de atividades	1				
Produção de biocompósitos aplicáveis ao setor de embalagens, automotivo e cosméticos	1, 2, 3 e 4	Relatórios parciais e final de atividades			2		
Depósito de patentes relativas a processos e produtos	1, 2, 3 e 4	Pedidos de patentes submetidos				1	1

Divulgação dos conhecimentos gerados por meio da participação em congressos nacionais e/ou internacionais especializados e publicações em periódicos indexados de impacto internacional	1, 2, 3 e 4	Participações em eventos e artigos submetidos	2	2	2	2	2
---	-------------	---	---	---	---	---	---

Referências Bibliográficas

OLIVEIRA, MARCELO F. L. ; BRAGA, FERNANDA C. F. ; LEITE, MÁRCIA C. A. M. ; OLIVEIRA, MARCIA G. . Evaluation of Thermal Properties of Nanocomposites Based on Ecobras Matrix and Vermiculite Modified with Alkylphosphonium Salt. *Macromolecular Symposia JCR*, v. 367, p. 42-48, 2016.

OLIVEIRA, MARCELO F.L. ; CHINA, ALINE L. ; OLIVEIRA, MARCIA G. ; LEITE, MARCIA C.A.M. . Biocomposites based on Ecobras matrix and vermiculite. *Materials Letters (General ed.) JCR*, v. 158, p. 25-28, 2015.

Oliveira, M. G.; Djanira M.R. Costa ; OLIVEIRA, R. B. ; BARROS, M. M. . Compósito de polímero biodegradável com mix de fibras. In: 13º Congresso Brasileiro de Polímeros, 2015, Natal. 13º Congresso Brasileiro de Polímeros. São Carlos: ABPOL, 2015. v. único. p. AMJJ-NA.

Projeto 12- Desenvolvimento de formulações farmacêuticas baseadas em HME

Introdução

A técnica Hot Melt Extrusion (HME) ou extrusão a quente de medicamentos se apresenta como o novo paradigma no desenvolvimento farmacêutico por permitir a viabilidade de diversos ingredientes farmacêuticos ativos com baixa solubilidade, ou seja, que possuem baixa biodisponibilidade.

Desde 2008, o INT vem atuando para desenvolver a técnica do processo HME no Brasil. Ao longo desta história de pesquisa, algumas questões foram observadas no que tange ao desenvolvimento de formulações de extrusados farmacêuticos, dentre as quais, podem ser citadas: análise reológica das misturas, estudos de fases amorfas e ordenação de segmentação das roscas da extrusora.

Portanto, pretende-se com este projeto otimizar o protocolo do estudo reológico até então desenvolvido para que ele fique mais preciso e rápido; além de sua validação em outros polímeros e sistemas de mistura diversos.

Serão estudadas otimizações nas formulações de Ritonavir, Praziquantel e Artesunato+Mefloquina, que atualmente se encontram em processo de desenvolvimento.

Além disso, se pretende criar um protocolo para a utilização da técnica de microscopia de força atômica (AFM), que tem sido reconhecida como uma técnica essencial para a caracterização de dispersões sólidas, para analisar os extrusados gerados.

Importância dos resultados para o Instituto de Pesquisa/Organização Social:

Esse projeto é de grande importância para o INT, pois lida com doenças de interesse do governo federal e de extrema importância para a população, inclusive crianças, que sofre com a falta de tratamento adequado ou com a oferta limitada de medicamentos devido ao grande custo que esses representam ao Estado.

Assim, esse projeto pode fazer do INT uma instituição de destaque também na área da saúde, o que atrai investimentos e, principalmente, o interesse de mão de obra qualificada, o que só contribui para o crescimento do instituto.

Relevância do projeto para Sociedade:

O projeto lida com doenças negligenciadas, ou seja, doenças que não despertam interesse nas grandes indústrias farmacêuticas pelo fato de não possuírem um grande retorno financeiro. Por isso, a população sofre com a ausência de tratamento adequado, inclusive crianças, que são as mais frágeis e que mais carecem de tratamento orientado.

Além disso, o projeto também lida com medicamentos estratégicos no tratamento do vírus HIV, o que pode ofertar para a população uma maior oferta de medicamentos de qualidade no futuro.

Objetivo Geral

O presente projeto tem como objetivo geral o desenvolver de medicamentos à base de formulações farmacêuticas utilizando a tecnologia HME para os fármacos Ritonavir, Praziquantel e associação Artesunato+Mefloquina respectivamente.

Objetivo Específico 1: Executar testes reológicos e teor para:

- Misturas físicas de Ritonavir com polímeros hidrossolúveis, plastificantes e excipientes.
- Misturas físicas de Praziquantel com polímeros hidrossolúveis, plastificantes e excipientes.
- Misturas físicas de Artesunato+Mefloquina com polímeros hidrossolúveis, plastificantes e excipientes.

Objetivo Específico 2: Executar a extrusão e caracterização física em DRX, MEV, DSC e AFM dos extrusados das seguintes misturas:

- Misturas físicas de Ritonavir com polímeros hidrossolúveis, plastificantes e excipientes.
- Misturas físicas de Praziquantel com polímeros hidrossolúveis, plastificantes e excipientes.
- Misturas físicas de Artesunato+Mefloquina com polímeros hidrossolúveis, plastificantes e excipientes.

Objetivo Específico 3: Executar moagem, misturas com excipientes, compressão e ensaios de perfil de dissolução e teor dos seguintes extrusados:

- Extrusado das misturas físicas de Ritonavir com polímeros hidrossolúveis, plastificantes e excipientes.
- Extrusado das misturas físicas de Praziquantel com polímeros hidrossolúveis, plastificantes e excipientes.
- Extrusado das misturas físicas de Artesunato+Mefloquina com polímeros hidrossolúveis, plastificantes e excipientes.

Objetivo Específico 4: Estudar a estabilidade e o estudo de produto de degradação das melhores formulações.

Objetivo Específico 5: Estudar o escalamento das melhores formulações.

Modalidade de Bolsas

Formação Acadêmica / Titulação	Área de Experiência	Objetivo Específico	PCI categoria/nível	Meses	quantidade
Graduado	Farmácia/eng. química	1	D-D	60	1

Atividades de Execução

Atividades	Objetivo Específico	Indicadores	Metas				
			2019	2020	2021	2022	2023
Pesquisa bibliográfica	1, 2, 3 e 4	Relatório parcial do	1	1	1	1	1

		levantamento bibliográfico					
Elaboração de protocolos experimentais em escala laboratorial	1, 2, 3 e 4	Relatório parcial dos protocolos experimentais	4	4	4	4	4
Execução de testes reológicos Extrusão das formulações propostas	1, 2 e 3	Relatório parcial da execução de testes reológicos e de extrusão das formulações	18	18	18	18	18
Estudo das formulações farmacêuticas propostas	3 e 4	Relatório parcial envolvendo o estudo das formulações farmacêuticas	9	9	9	9	6
Participação e apresentação de trabalhos em congressos nacionais e/ou internacionais	1, 2, 3 e 4	Divulgação científica e tecnológica	3	3	3	3	3
Elaboração de artigos técnico-científicos e/ou pedidos de depósito de patentes	1, 2, 3 e 4	Divulgação científica e tecnológica	1	1	1	1	1
Registro, análise e discussão de resultados experimentais das pesquisas técnico-científicas	4	Relatório final de atividades					3

Cronograma de Atividades

Atividade 1: Revisar a bibliográfica voltada ao processo de encapsulação de diferentes fármacos, bem como as melhores formas de caracterizar as nanopartículas geradas. A pesquisa bibliográfica é extremamente relevante para o projeto, pois se trata de um assunto ainda com muito potencial a ser explorado, como a obtenção de nanopartículas carregadas com fármaco.

Atividade 2: Elaboração de protocolos experimentais para estudo de extrusão e caracterização física e química de extrusado das seguintes misturas:

- Misturas físicas de Ritonavir com polímeros hidrossolúveis, plastificantes e excipientes.
- Misturas físicas de Praziquantel com polímeros hidrossolúveis, plastificantes e excipientes.

– Misturas físicas de Artesunato+Mefloquina com polímeros hidrossolúveis, plastificantes e excipientes.

Atividade 3: Executar a moagem, mistura com excipientes e compressão dos extrusados das seguintes misturas e suas caracterizações físicas e químicas:

- Misturas físicas de Ritonavir com polímeros hidrossolúveis, plastificantes e excipientes.
- Misturas físicas de Praziquantel com polímeros hidrossolúveis, plastificantes e excipientes.
- Misturas físicas de Artesunato+Mefloquina com polímeros hidrossolúveis, plastificantes e excipientes.

Atividade 4: Avaliar perfil de dissolução de extrusados vs comprimidos, teor de comprimidos, estabilidade e produto de degradação das melhores formulações determinadas.

Atividade 5: Estudar o escalamento de todo o processo de obtenção das melhores formulações dentre os fármacos estudados

Atividade 6: Dossiê de desenvolvimento de formulação

Atividades	Semestre									
	2019		2020		2021		2022		2023	
	1	2	1	2	1	2	1	2	1	2
1	X									
2		X	X							
3				X	X					
4						X	X	X		
5									X	
6										X

Produtos

Produtos	Objetivo Específico	Indicadores	Metas				
			2019	2020	2021	2022	2023
Relatório parcial do levantamento bibliográfico	1,2,3 e 4	Nº de relatórios parciais	1				
Relatório parcial dos protocolos experimentais	1,2,3 e 4	Nº de relatórios parciais	2	4	4	4	2
Relatório parcial dos testes	1	Nº de relatórios parciais	3	3	3	3	

reológicos e de extrusão							
Relatório parcial das formulações	3,4	Nº de relatórios parciais	1	1	1	1	1
Divulgação científica e tecnológica	1,2,3 e 4	Nº de participações em eventos	1	1	1	1	1
Artigos técnico-científicos	1,2,3 e 4	Nº de artigos submetidos	1	1	1	1	1
Pedidos de depósito de patentes	4	Nº de pedidos de patentes submetidos					3
Relatório final de atividades	1,2,3 e 4	Nº de relatórios finais de atividades					1

Resultados Esperados

- 1 – Formulação de comprimido de Ritonavir
- 2 – Formulação de comprimido de Praziquantel
- 3 – Formulação de comprimido da associação Artesunato+Mefloquina
- 4 – Metodologia de análise física de solução sólida amorfa por AFM.
- 5 – Documentação validada para início de produção do lote piloto para registro
- 6 – Patente dos produtos

Resultados	Objetivo Específico	Indicadores	Metas				
			2019	2020	2021	2022	2023
1	5	Relatórios acumulativo anuais	1	1	1	1	
2	5	Relatórios acumulativo anuais	1	1	1	1	
3	5	Relatórios acumulativo anuais	1	1	1	1	
4	1	Relatórios de metodologia validada			1		

5	5	Dossiê de desenvolvimento					1
6	5	Pedido de patente					1

Projeto 13- Desenvolvimento de betumes sintéticos, e outros produtos, a partir de termoplásticos e óleos industriais, pós-consumidos.

Introdução

O craqueamento catalítico do petróleo produz como produto final, uma borra extremamente viscosa denominada betume. Esta borra é destinada à indústria da construção civil, que a utiliza principalmente como elemento aglutinante de sólidos minerais na preparação do cimento asfáltico de pavimentação (CAP). As características do petróleo do qual o betume é oriundo, fornece a esse material, características e propriedades únicas, principalmente no que se refere ao seu comportamento diante da variação de temperatura ambiente. A diversidade de comportamento, porém, resulta em dificuldade de sua utilização em virtude unicidade desses betumes.

Na tentativa de contornar os problemas adversos apresentados pelos betumes, vem sendo desenvolvido em laboratórios, um material aglutinante, os chamados binders ou betumes sintéticos, para a finalidade descrita, com características e propriedades semelhantes aos dos betumes. Esses materiais apresentam como vantagem a possibilidade de controle das propriedades desejadas, obtidas pelo uso matérias-primas com características escolhidas, que tendem a fornecer um produto final com as características requeridas pelo uso. Além disso, é possível produzi-los a partir de matérias-primas oriundas do resíduo sólido pós-consumido, urbano ou industrial, descartado muitas vezes inadequadamente no meio ambiente. Igualmente, é possível minimizar pelo menos dois problemas, através do desenvolvimento não só de binders sintéticos, mas de todo um espectro de produtos originado dessas misturas.

Objetivo Geral

Desenvolver e caracterizar novos materiais (binders e graxas sintéticas entre outros produtos) a partir da mistura de termoplásticos, óleos industriais e ligantes poliméricos, pós-consumidos.

Objetivo específico 1- Desenvolver binders, graxas sintéticas entre outros produtos, a partir de misturas de polímeros termoplásticos tais como, polietileno, polipropileno, poliestireno e outros, com óleos industriais tais como os automotivos, acrescidos ou não de um terceiro componente polimérico.

Objetivo específico 2- Caracterizar química, física e fisioquimicamente os produtos desenvolvidos.

Objetivo específico 3- Avaliar térmica e termoreologicamente as propriedades dos produtos desenvolvidos.

Modalidade de Bolsas

Formação	Área de	Objetivo	PCI	Meses	Quantidade
----------	---------	----------	-----	-------	------------

Acadêmica / Titulação	Experiência	Específico	categoria/nível		
Química ou Engenharia Química / Recém-formado	Química e/ou Polímeros	1, 2 e 3	D-D	60	1
Química ou Engenharia Química / Mestre	Química e/ou Polímeros	1, 2 e 3	D-C	60	1

Atividades de Execução

Atividades	Objetivo Específico	Indicadores	Metas				
			2019	2020	2021	2022	2023
Pesquisa bibliográfica – Levantamento do Estado da arte sobre betumes e binders; das metodologias para caracterização química e físico-química dos termoplásticos e óleos industriais, e metodologias de obtenção dos binders.	1, 2 e 3	Journal de Dados (JD)	4	4	4	4	4

Aquisição dos termoplásticos e óleos industriais a serem usados nas preparações dos binders. Caracterizações químicas e físico-químicas baseadas nas metodologias obtidas na literatura.	1, 2 e 3	JD e Relatório Atividades Técnicas Intermediárias (RAT-I)	-	5	-	-	-
Elaboração de procedimentos experimentais para obtenção dos binders.	1	JD e RAT-I	-	5	3	-	-
Produção dos binders seguindo os procedimentos experimentais elaborados. Obtenção dos resultados das reações de preparação.	1	JD e RAT-I	-	-	10	10	-
Discussão de resultados parciais obtidos nas caracterizações dos termoplásticos, óleos industriais e nas reações de produção dos binders.	1	Redação do RAT Parcial (RAT-P)	-	-	1	-	-
Caracterização química, física e físico-química dos binders obtidos nas reações.	2	JD e RAT-I	-	-	-	50	-

Caracterização térmica e termorreológica dos binders obtidos nas reações.	3	JD, RAT-I e Redação de Material Científico para publicação e apresentações em congressos	-	-	-	10	-
Discussão de resultados totais. Correlação entre resultados parciais e finais.	1, 2 e 3	Redação do RAT Final (RAT-F)	-	-	-	-	1
Participação em eventos científicos	2 e 3	Redação de Material Científico para publicação e apresentações em congressos	2	2	2	2	2

Cronograma de Atividades

Atividades	Semestre									
	2019		2020		2021		2022		2023	
	1	2	1	2	1	2	1	2	1	2
Pesquisa bibliográfica – Levantamento do Estado da arte sobre betumes e binders; das metodologias para caracterização química e físico-química dos termoplásticos e óleos industriais, e metodologias de obtenção dos binders.	x	x	-	-	-	-	-	-	-	-

Aquisição dos termoplásticos e óleos industriais a serem usados nas preparações dos binders. Caracterizações químicas e físico-químicas baseadas nas metodologias obtidas na literatura.	-	X	X	-	-	-	-	-	-	-
Elaboração de procedimentos experimentais para obtenção dos binders.	-	-	-	X	X	-	-	-	-	-
Produção dos binders seguindo os procedimentos experimentais elaborados. Obtenção dos resultados das reações de preparação.	-	-	-	-	-	X	X	-	-	-
Discussão de resultados parciais obtidos nas caracterizações dos termoplásticos, óleos industriais e nas reações de produção dos binders.	-	-	-	-	-	X	X	-	-	-
Caracterização química, física e físico-química dos binders obtidos nas reações.	-	-	-	-	-	-	X	X	-	-
Caracterização térmica e termorreológica dos binders obtidos nas reações.	-	-	-	-	-	-	-	X	X	-
Discussão de resultados totais. Correlação entre resultados parciais e finais.	-	-	-	-	-	-	-	-	X	X
Participação em eventos científicos	-	-	-	-	-	-	X	X	X	X

Produtos

Produtos	Objetivo Específico	Indicadores	Metas				
			2019	2020	2021	2022	2023
JD	1, 2 e 3	Nº de JD	4	4	4	4	4
RAT	1, 2 e 3	Nº de RAT (I; P e F)	4 I	4I	4 I + 1 P	4 I	4 I + 1 F
Artigos Científicos	1, 2 e 3	Nº de Artigos	-	2	-	2	1
Resumos para Congressos	1, 2 e 3	Nº de Resumos	-	2	2	2	2

Resultados Esperados

Resultados	Objetivo Específico	Indicadores	Metas				
			2019	2020	2021	2022	2023
Atualização da literatura sobre o assunto, através da pesquisa bibliográfica	1, 2 e 3	JD	4	4	4	4	4
Seleção das melhores matérias primas para cada produto desenvolvido	1	JD e RAT-I	x	3	x	x	-
Metodologias desenvolvidas e validadas para cada produto desenvolvido	1	JD, RAT-I e publicação de artigos científicos e aceite de resumos em congressos	x	2	1	x	x

Divulgação de resultados	1, 2 e 3	Publicação de artigos científicos, aceite de resumos em congressos, participação em eventos científicos, pedidos de concessões	2	2	2	2	2
Aprimoramento profissional dos bolsistas	1, 2 e 3	Apresentações orais em JD e congressos, aprimoramento da escrita através da redação de resumos, artigos e patentes	2	2	2	2	2

Referências Bibliográficas

[1] Souza, R. S., Visconte, L. L. Y., Silva, A. L. N. and Costa, V. G.; Thermal and Rheological Formulation and Evaluation of Synthetic Bitumen from Reprocessed Polypropylene and Oil. International Journal of Polymer Science 2018, <https://doi.org/10.1155/2018/7940857>

[2] Souza, R. S., Visconte, L. L. Y. and Costa, V. G.; Avaliação térmica de Betumes sintéticos formulados a partir de Polipropileno e óleo parafínicos pós-consumidos. Anais do XI Congresso Brasileiro de Análise Térmica e Calorimetria, Rio de Janeiro, abr 2018.

[3] Souza, R. S., Visconte, L. L. Y. and Costa, V. G.; Avaliação Reológica Binders Poliméricos Formulados A Partir De Óleo E Polipropileno Pós-Consumidos. Anais do iV Congresso Brasileiro de Reologia, Rio de Janeiro, abr 2017.