

2020



9º ENICTI

**ENCONTRO DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA,
TECNOLÓGICA E ÀS INOVAÇÕES DO INT**

CADERNO DE RESUMOS

PRESIDÊNCIA DA REPÚBLICA

Jair Messias Bolsonaro Presidente

MINISTÉRIO DA CIÊNCIA, TECNOLOGIA E INOVAÇÕES

Marcos Cesar Pontes

Ministro de Estado

Julio Francisco Semeghini Neto

Secretário-Executivo

Gerson Nogueira Machado de Oliveira

Subsecretário de Unidades Vinculadas

INSTITUTO NACIONAL DE TECNOLOGIA – INT

Fernando Cosme Rizzo Assunção

Diretor

Carlos Alberto Marques Teixeira

Coordenador-Geral Regional – CGER

**Valeria Said de Barros Pimentel - Coordenadora de Gestão
Tecnológica – COGET**

**Ieda Maria Vieira Caminha - Coordenadora de Negócios –
CONEG**

**Maria Marta Gomes de Sousa - Coordenadora de Gestão
Administrativa – COADM**

**Marcia Gomes de Oliveira - Coordenadora de Desenvolvimento
Tecnológico – CODTE**

**Marco André Fraga - Coordenador de Tecnologias Aplicadas –
COTAP**

**Ricardo Ferreira Vieira de Castro - Coordenador de Logística e
Infraestrutura – COLIN**

**PROGRAMAS DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA, TECNOLÓGICA E
INOVAÇÃO - INT**

Valéria Gonçalves Costa

Tecnologista

Coordenadora dos Programas PIBIC e PIBITI

Andrea Regina Nunes de Carvalho

Tecnologista

Eliane Przytyk Jung

Tecnologista

Marcia Gomes de Oliveira

Tecnologista

Simone Carvalho Chiapetta

Tecnologista

Comissão Organizadora do 9º ENICTI

PROGRAMA DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA - PIBIC

Valéria Gonçalves Costa

Tecnologista

Coordenadora dos Programas PIBIC e PIBITI

Dra Kátia Gomes de Lima Araújo

Professora Titular - Faculdade de Farmácia – UFF

Dra Márcia Cristina da Cunha Veloso

Professora Titular - Instituto de Química – UFF

Dr Vinicius Rangel Campos

Professor Adjunto- Instituto de Química - UFF

Comissão Avaliadora Externa PIBIC - 9º ENICTI

PROGRAMAS DE INICIAÇÃO TECNOLÓGICA E INOVAÇÃO - PIBITI

Valéria Gonçalves Costa

Tecnologista

Coordenadora dos Programas PIBIC e PIBITI

Dra Kátia Gomes de Lima Araújo

Professora Titular - Faculdade de Farmácia – UFF

Dra Márcia Cristina da Cunha Veloso

Professora Titular - Instituto de Química – UFF

Dr Vinicius Rangel Campos

Professor Adjunto- Instituto de Química - UFF

Comissão Avaliadora Externa PIBITI - 9º ENICTI

Horários Dias	14/07	15/07	16/07	17/07
Tarde 15 - 17h30	<p>Abertura</p> <p>Dr. Aldo J. G. Zarbin</p> <p>Professor Titular</p> <p>Departamento de Química da UFPR</p> <p>Líder do Grupo de Química de Materiais DQ/UFPR</p>	<p>Apresentações PIBIC/PIBITI</p>	<p>Apresentações PIBIC/PIBITI</p>	<p>Divulgação dos Resultados</p>
		<p>Sulamita S. Elias - PIBITI</p> <p>Bruna G. Araújo - PIBIC</p> <p>Beatriz S. S. Mello - PIBIC</p> <p>Julia P. Carvalho - PIBIC</p> <p>Igor Machado - PIBIC</p> <p>Lucas C. Barbosa - PIBIC</p> <p>Anderson Wang - PIBITI</p> <p>Breno A. Brito - PIBIC</p> <p>Joyce V. Silva - PIBIC</p> <p>Agape C. M. F. da Silva - PIBITI</p>	<p>Renan B. Ferreira -PIBIC</p> <p>Ana Beatriz F. Rusenhack - PIBIC</p> <p>Mayara S. de Almeida – PIBITI</p> <p>Davi M. C. da Silva – PIBIC</p> <p>Felipe Rafael L. do Amaral - PIBITI</p> <p>Debora C. S. Santos - PIBIC</p> <p>Alannah M. Calazans - PIBITI</p> <p>Carlos Alberto B. Soares Jr - PIBITI</p> <p>Douglas Machado - PIBITI</p> <p>Samuel D. C. dos Santos - PIBIC</p> <p>Pedro Cezar R. Dias - PIBITI</p>	

PIBIC

RESUMOS

Produção biológica de hidrogênio usando preparado enzimático sólido residual da produção de biodiesel como matéria-prima

Ana Beatriz F. Rusenhack ¹Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia do Rio de Janeiro ²Instituto Nacional de Tecnologia (IC)*, Mariana O. Faber ²Instituto Nacional de Tecnologia ³Programa de pós-graduação em Bioquímica (PG), Stella B. dos Santos ²Instituto Nacional de Tecnologia ³Programa de pós-graduação em Bioquímica (PG), Viridiana S. Ferreira-Leitão ²Instituto Nacional de Tecnologia (PQ)

¹R. Lúcio Tavares, 1045 - Centro, Nilópolis - RJ, 26530-060

²Av. Venezuela, 82 - Saúde, Rio de Janeiro - RJ, 20081-312

³Av. Pedro Calmon, 550 - Cidade Universitária da Universidade Federal do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro - RJ, 21941- 901

*ana.rusenhack@int.gov.br

Palavras Chave: *Resíduo da produção de biodiesel, Hidrogênio biológico, Fermentação.*

Resumo

A busca por alternativas para a substituição de catalisadores alcalinos na produção de biodiesel e a conscientização da necessidade de uma maior sustentabilidade neste processo contribuíram para realização de estudos voltados para a utilização de resíduos agroindustriais na produção deste biocombustível. A fermentação em estado sólido das fibras da palma com o fungo *Rhizomucor miehei* gera um biocatalizador com atividade lipásica denominado Preparado Enzimático Sólido (PES), o qual catalisa a reação entre o resíduo da purificação do óleo de palma - o destilado de desodorização do óleo de palma (DDOP) - e o etanol, resultando na produção enzimática de biodiesel. Entretanto, nesta reação são gerados 350 g de Preparado Enzimático Sólido Residual (PESR) para cada litro de biodiesel produzido. Como o PESR é constituído majoritariamente por matéria orgânica, este trabalho teve como objetivo aproveitá-lo para produção de hidrogênio via fermentação. O hidrogênio possui valor na fabricação de amônia, na refinaria de petróleo, como matéria-prima para produção de vitaminas e cosméticos e em diversos setores industriais. Este estudo da produção de hidrogênio através da fermentação do PESR utilizou o lodo anaeróbio de uma estação de tratamento de esgoto como inóculo. A produção de H₂ foi de 175 mL_{H₂}/L, o que equivale ao rendimento de 5,7 mL/g_{PESR}, mostrando que o PESR é uma matéria prima potencial para o processo de fermentação.

Conclusões

O PESR sendo aproveitado como matéria-prima para a produção de H₂ via fermentação é relevante quanto ao reaproveitamento de resíduos. Deste modo, a geração desse vetor energético associado às indústrias de óleo de palma e de biodiesel destaca-se por uma maior sustentabilidade e pela utilização de uma energia renovável.

Agradecimentos

CNPQ, CAPES, FAPERJ, LABIM-UFRJ, LABIC-INT, IFRJ

Evolução microestrutural e propriedades físicas de uma liga do sistema Co-Cr-Mo processada por sinterização direta de metais a laser (DMLS)

**Beatriz Silva Santos Mello, ¹Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro (IC)
Alex Matos da Silva Costa*, ²DIEMP-INT (PQ) Maurício de Jesus Monteiro, ²DIEMP-INT (PQ)**

*e-mail do autor responsável – alex.matos@int.gov.br

¹Rua Marquês de São Vicente, 225 - Gávea, Rio de Janeiro - RJ, CEP 22451-900

²Avenida Venezuela 82 sala 620 - Saúde, Rio de Janeiro – RJ, CEP 20081-312

Palavras Chave: *evolução microestrutural, sinterização direta de metal por laser, ligas de Co*

Resumo

As ligas à base de Co são conhecidas principalmente pela elevada resistência ao desgaste e pela manutenção da resistência mecânica em temperatura elevada [1]. Atualmente estas ligas têm sido aplicadas na fabricação de implantes ortodônticos e ortopédicos através de diversas técnicas de manufatura aditiva, principalmente aquelas que envolvem laser como fonte de energia e aquecimento [2]. Esta proposta de pesquisa envolveria o estudo dos efeitos da evolução microestrutural nas propriedades físicas de uma liga do sistema Co-Cr-Mo processada por sinterização direta de metal por laser (DMLS) utilizando diversas técnicas de caracterização microestrutural como microscopia ótica (MO), eletrônica de varredura (SEM) e de transmissão (MET). As propriedades físicas serão avaliadas mediante ensaios de nanodureza, testes de tribológicos de desgaste e ensaios em meios corrosivos. Entretanto devido à pandemia de COVID-19 e a necessidade do afastamento social iniciado em Março de 2020, todas as atividades laborais e experimentais no INT foram suspensas. O projeto foi resubmetido ao Programa PIBIC & PIBITI 2020-2021 que agora será realizado em etapa única e espera-se que seja executado assim que as atividades laborais sejam liberadas no INT.

Conclusões

A presente proposta de pesquisa envolveria estudos a respeito dos efeitos da evolução microestrutural nas propriedades físicas de uma liga do sistema Co-Cr-Mo processada por sinterização direta de metal por laser (DMLS). Devido à pandemia de COVID-19 e a necessidade do afastamento social iniciado em março de 2020, todas as atividades laborais e experimentais no INT foram suspensas. No entanto, algumas atividades foram conduzidas: 1-Revisão bibliográfica referente as propriedades de corrosão de ligas Co-Cr-Mo processadas a laser, 2-Usinagem de corpos de prova para ensaios mecânicos, 3-Discussões para colaboração interna para realização de simulações de tratamentos térmicos utilizando o programa COMSOL, 4-Revisão e redação da proposta de pesquisa submetida ao Programa PIBIC & PIBITI 2020-2021.

Agradecimentos

- Ao Programa PIBIC & PIBITI pelo financiamento e concessão da bolsa.
- À Divisão de Ensaios em Materiais e Produtos (DIEMP).
- Instituto Nacional de Tecnologia (INT/MCTI).

1. ANTONY, K. C. Wear-Resistant Cobalt-Base Alloys. The Journal of The Minerals, Metals & Materials Society (TMS), v. 35, p. 52-60, 1983.
2. POM Group. Disponível em: <http://www.pomgroup.com/>. Acesso em: 19 de fev. 2016.

Avaliação das propriedades dos óleos residuais para a produção de compostos de maior valor agregado

Breno A. Brito^{1*}(IC), Camila C. Lopes¹ (PQ), Simone C. Chiapetta² (PQ)

*Email: breno.brito@int.gov.br

1- Instituto Nacional de Tecnologia/INT, Divisão de Energia, Av. Venezuela, 82/716, Praça Mauá, Rio de Janeiro, RJ, 20.081-312.

2- Instituto Nacional de Tecnologia/INT, Divisão de Química Analítica, Av. Venezuela, 82/716, Praça Mauá, Rio de Janeiro, RJ, 20.081-312.

Palavras Chave: Biocombustível, Doehlert, Óleo Residual.

Resumo

Os óleos residuais são líquidos viscosos degradados que apresentam propriedades físicas que favorecem seu aproveitamento para obtenção de produtos com maior valor agregado. No presente estudo, foi aplicado um planejamento experimental da matriz Doehlert nas reações de transesterificação para otimização do rendimento do produto final, variando os níveis de acordo com as variáveis experimentais escolhidas (tempo, temperatura e massa de catalisador). Foram preparados 15 ensaios experimentais com a triplicata no ponto central do estudo. A ANOVA indicou alto grau de significância entre as variáveis escolhidas. De acordo com a superfície de resposta gerada, a condição ótima da reação apresentou as seguintes condições: temperatura de 43 °C, massa de catalisador de 1,16% em relação à massa de óleo e duração de 90 minutos; o rendimento obtido nestas condições foi de 93,5% (n=3) indicando que os mesmos foram otimizados. Os parâmetros físico-químicos, analisados no produto gerado a partir da reação no ponto ótimo, se mostraram de acordo com a legislação vigente. O teor de água foi o único parâmetro que ficou superior ao limite. O planejamento experimental revelou-se uma ferramenta imprescindível para otimização de variáveis afim de reduzir o número de experimentos necessários para otimização de um determinado processo. Para as próximas etapas serão realizados planejamentos experimentais para síntese de biolubrificantes.

Conclusões

O planejamento experimental de Doehlert verificou-se eficiente na otimização das variáveis experimentais escolhidas a fim de aumentar o rendimento das reações de transesterificação amplamente estudadas na literatura, visto que existem poucos trabalhos de planejamento experimental na literatura com aderência ao objetivo desse projeto.

O biocombustível sintetizado foi obtido com rendimento de 93,5% (n=3), com a otimização das variáveis: massa de catalisador, temperatura e tempo. Os parâmetros físico-químicos do biocombustível mostraram-se de acordo com a legislação vigente, com exceção do teor de água que se destacou acima do permitido.

O tratamento estatístico escolhido foi de grande importância para identificar conformidade do planejamento escolhido. A ANOVA apontou-se como uma ferramenta adjunta, avaliando a significância entre as variáveis experimentais adotadas.

Para próxima etapa do projeto, daremos início ao planejamento experimental para síntese de biolubrificantes aplicando as reações de transesterificação e/ou epoxidação com álcoois de cadeia maior. Para tal planejamento, serão avaliadas quatro variáveis experimentais: (massa de catalisador, temperatura, tempo e razão molar).

Agradecimentos

Ao CNPq pelo auxílio financeiro, aos colegas e amigos do LACOL, ao Victor Hugo pela parceria frente às problemáticas do projeto e às orientadoras por contribuírem de forma tão significativa nesse projeto.

1 - BEZERRA, M.A. Quimiometria: planejamento e otimização experimental. Caderno de aulas práticas. Niterói. 2006, p.49.

2 - DOEHLERT, D. H..J. R. Statist. Soc. C, 19. 1970, 231-239.

ASSOCIAÇÃO DO PRÉ-TRATAMENTO BIOLÓGICO COM O TRATAMENTO HIDROTÉRMICO DA PALHA DA CANA-DE-AÇÚCAR

Davi M. M. C. da Silva ¹Instituto Federal do Rio de Janeiro (IC), Bruno C. S. Coelho ²Universidade Federal do Rio de Janeiro (PG), Ayla S. da Silva ²Instituto Nacional de Tecnologia (PQ)

*davi.marconi@int.gov.br

ayla.santana@int.gov.br

Palavras Chaves: pré-tratamento; hidrotérmico; biológico

Resumo

O Brasil é o maior produtor de cana-de-açúcar do mundo, com uma produção de 642 milhões de toneladas em sua última safra. Essa larga produção resulta em um acúmulo de resíduos, como o bagaço e palha, que representam 70% do peso seco da cana-de-açúcar. Contudo, esses resíduos apresentam um grande potencial para a geração de energia e bioprodutos, uma vez que são compostos por celulose, hemicelulose e lignina. Muitos estudos avaliados a conversão do conteúdo de celulose desses materiais em glicose, uma molécula-plataforma utilizada em diversos processos industriais. No entanto, devido à grande recalcitrância da biomassa ao ataque químico e enzimático, diversos estudos avaliam uma etapa de pré-tratamento que visa o aumento da exposição da celulose, através da remoção seletiva de hemicelulose e lignina. O pré-tratamento biológico (PTB) vem ganhando notoriedade, pois resulta na remoção da lignina e causa poucos impactos ambientais. Porém, por esse pré-tratamento ser brando, é necessário associá-lo a outro método com efeito mais expressivo, como o pré-tratamento hidrotérmico (PTH), que é capaz de remover mais de 90% da hemicelulose. Entretanto, o PTH requer elevadas temperaturas, gerando produtos de degradação dos açúcares. Logo, a associação do PTB e PTH poderia ter um efeito sinérgico, possibilitando a utilização de condições de PTH mais brandas, após associação com o PTB. Sendo assim, este trabalho teve como objetivo avaliar o PTB e o PTH e sua associação para o pré-tratamento da palha da cana-de-açúcar, a fim de aumentar a conversão da celulose em glicose na etapa de hidrólise enzimática e reduzir a severidade do PTH. O PTB foi realizado com os fungos *Phanerochaete chrysosporium*, *Pleurotus ostreatus* e *Gloeophyllum trabeum* e a palha pré-tratada por PTB e PTH foram submetidas à análises de composição química e ensaios de liberação de glicose durante a hidrólise enzimática. O PTB realizado na palha da cana-de-açúcar com o fungo *P. ostreatus* apresentou a maior eficiência na remoção da lignina, se comparado ao *P. chrysosporium* e *G. trabeum*, que resultaram em remoção da celulose de 28,4% e 27,6%, respectivamente. No vigésimo dia de incubação do fungo *P. ostreatus* resultou na remoção de 20,2% da lignina, enquanto 4,8% e 17,6% de celulose e hemicelulose foram removidos, respectivamente. Logo, o PTB realizado pelo *P. ostreatus* indicou resultados promissores, já que com essa remoção foi possível aumentar o rendimento de conversão de celulose em glicose de 19,1% (*in natura*), para 28,3%. Para o PTH, foi avaliado o tamanho do material poderia provocar interferência na eficiência do tratamento, através da comparação da palha cortada (~ 2cm) e da palha moída (850-180 µm). Os resultados da composição química e da hidrólise enzimática foram estatisticamente iguais ($p>0,05$) para a palha moída e cortada, indicando que a granulometria do material não influencia na eficiência do PTH, uma vez que a palha possui nano-poros que possibilitando uma grande área superficial para o contato com a água. Os resultados do PTH foram compatíveis com os reportados na literatura, uma vez que foi capaz de reduzir o teor da hemicelulose da biomassa para 8,0%. Além disso, o PTH realizado na palha possibilitou uma conversão de celulose em glicose de 68,3% na etapa da hidrólise enzimática. Assim, a associação do PTH ao PTB pode apresentar resultados promissores; entretanto, uma busca por micro-organismos mais eficientes é interessante, pois acredita-se que é possível atingir resultados mais expressivos no PTB.

Conclusões

O fungo *P. ostreatus* se mostrou promissor na remoção da lignina durante o PTB, aumentando a disponibilidade da celulose. Por outro lado, as condições de PTH avaliadas possibilitaram a remoção efetiva da lignina. Desse modo, acreditasse que a associação do PTB com PTH aumentará a eficiência do processo, resultando em um maior rendimento de conversão da celulose em glicose. No entanto, a etapa de associação não pode ser realizada no presente estudo, devido à paralização das atividades experimentais.

Agradecimentos

Agradecimentos à CNPq, FAPERJ e a parceria com a Universidad de La Frontera.

9º ENICTI - Encontro de Iniciação Científica, Tecnológica e à Inovação do INT

Produção de ácido láctico a partir de açúcares de segunda geração utilizando catalisadores ácido- básicos

Debora C. S. Santos^{1*} (IC), Elise M. Albuquerque² (PG), Marco A. Fraga² (PQ)

¹Faculdade de Filosofia, Ciências e Letras Souza Marques. Av. Ernane Cardoso-335-21310-310, Cascadura RJ, Brasil.

²Instituto Nacional de Tecnologia/MCTIC, Laboratório de Catalise, Av. Venezuela 82/518, Saúde, 20081-312, Rio de Janeiro/RJ, Brasil.

*debora.a.t.r.s@gmail.com, debora.cristina@int.gov.br

Palavras Chave: xilose, glicose, Y_2O_3

Resumo

O Brasil é o maior produtor de cana-de-açúcar do mundo, com uma produção de 642 milhões de toneladas em sua última safra. Essa larga produção resulta em um acúmulo de resíduos, como o bagaço e palha, que representam 70% do peso seco da cana-de-açúcar. Contudo, esses resíduos apresentam um grande potencial para a geração de energia e bioprodutos, uma vez que são compostos por celulose, hemicelulose e lignina. Muitos estudos avaliados a conversão do conteúdo de celulose desses materiais em glicose, uma molécula-plataforma utilizada em diversos processos industriais. No entanto, devido à grande recalcitrância da biomassa ao ataque químico e enzimático, diversos estudos avaliam uma etapa de pré-tratamento que visa o aumento da exposição da celulose, através da remoção seletiva de hemicelulose e lignina. O pré-tratamento biológico (PTB) vem ganhando notoriedade, pois resulta na remoção da lignina e causa poucos impactos ambientais. Porém, por esse pré-tratamento ser brando, é necessário associá-lo a outro método com efeito mais expressivo, como o pré-tratamento hidrotérmico (PTH), que é capaz de remover mais de 90% da hemicelulose. Entretanto, o PTH requer elevadas temperaturas, gerando produtos de degradação dos açúcares. Logo, a associação do PTB e PTH poderia ter um efeito sinérgico, possibilitando a utilização de condições de PTH mais brandas, após associação com o PTB. Sendo assim, este trabalho teve como objetivo avaliar o PTB e o PTH e sua associação para o pré-tratamento da palha da cana-de-açúcar, a fim de aumentar a conversão da celulose em glicose na etapa de hidrólise enzimática e reduzir a severidade do PTH. O PTB foi realizado com os fungos *Phanerochaete chrysosporium*, *Pleurotus ostreatus* e *Gloeophyllum trabeum* e a palha pré-tratada por PTB e PTH foram submetidos à análises de composição química e ensaios de liberação de glicose durante a hidrólise enzimática. O PTB realizado na palha da cana-de-açúcar com o fungo *P. ostreatus* apresentou a maior eficiência na remoção da lignina, se comparado ao *P. chrysosporium* e *G. trabeum*, que resultaram em remoção da celulose de 28,4% e 27,6%, respectivamente. No vigésimo dia de incubação do fungo *P. ostreatus* resultou na remoção de 20,2% da lignina, enquanto 4,8% e 17,6% de celulose e hemicelulose foram removidos, respectivamente. Logo, o PTB realizado pelo *P. ostreatus* indicou resultados promissores, já que com essa remoção foi possível aumentar o rendimento de conversão de celulose em glicose de 19,1% (*in natura*), para 28,3%. Para o PTH, foi avaliado o tamanho do material poderia provocar interferência na eficiência do tratamento, através da comparação da palha cortada (~ 2cm) e da palha moída (850-180 μ m). Os resultados da composição química e da hidrólise enzimática foram estatisticamente iguais ($p>0,05$) para a palha moída e cortada, indicando que a granulometria do material não influencia na eficiência do PTH, uma vez que a palha possui nano-poros que possibilitando uma grande área superficial para o contato com a água. Os resultados do PTH foram compatíveis com os reportados na literatura, uma vez que foi capaz de reduzir o teor da hemicelulose da biomassa para 8,0%. Além disso, o PTH realizado na palha possibilitou uma conversão de celulose em glicose de 68,3% na etapa da hidrólise enzimática. Assim, a associação do PTH ao PTB pode apresentar resultados promissores; entretanto, uma busca por micro-organismos mais eficientes é interessante, pois acredita-se que é possível atingir resultados mais expressivos no PTB.

Conclusões

Os testes realizados com Y_2O_3 com diferentes morfologias mostraram uma boa conversão de xilose, no entanto, foi observado que o catalisador foi dissolvido no meio reacional devido a formação do ácido láctico. A ZrO_2 apresentou uma conversão menor que a ítria, porém é muito mais estável. Modificar a ZrO_2 com Y_2O_3 não levou a melhorias na conversão. Da mesma forma, suportar Y_2O_3 na SBA-15, não teve qualquer efeito sobre a estabilidade química da Y_2O_3 .

Agradecimentos

Ao CNPq pelo financiamento de bolsas PIBIC.

¹ CHHEDA, J. N.; HUBER, G. W.; DUMESIC, J. A. *Angew Chem*, **2007**, 7164 – 7183.

² PAULINO, P. N.; REIS, O. C.; LICEA, Y. E.; ALBUQUERQUE, E. M.; FRAGA, M. *Catal. Sci. Technol.*, **2018**, 4945-4956.

Estudo da evolução microestrutural e cálculos termodinâmicos das fases da liga biomédica Co-28Cr-6Mo (UNS R31537) antes e após tratamentos térmicos

Igor Machado¹ (IC), Cássio Barbosa² (PQ), Claudio T. dos Santos^{2*} (PQ), Edwin S. Leva² (PQ)
[*claudio.santos@int.gov.br](mailto:claudio.santos@int.gov.br)

¹Universidade Federal Fluminense, ²Instituto Nacional de Tecnologia.

Palavras Chave: Liga de cobalto. Microestrutura. Cálculo termodinâmico.

Resumo

Atualmente, diversos pesquisadores trabalham no desenvolvimento de novos biomateriais metálicos para aplicação em implantes médicos, que sejam capazes de suportar o carregamento mecânico severo e o ambiente agressivo por mais tempo do que os biomateriais tradicionais. Entretanto, ainda há a possibilidade de melhorar as propriedades dos biomateriais tradicionais, melhorando o entendimento das condições de processamento que afetam a sua microestrutura. No presente trabalho, pretendia-se realizar a caracterização microestrutural e medidas de dureza de amostras de barras de Co-28Cr-6Mo utilizadas na fabricação de implantes ortopédicos. As amostras seriam analisadas antes e após tratamentos térmicos (em temperaturas similares às de fabricação dos implantes) e, as fases formadas seriam comparadas com as fases previstas por meio do cálculo termodinâmico computacional utilizando o software Thermo-Calc. Porém, devido a suspensão das atividades do INT desde março deste ano, decorrente da necessidade de redução do impacto da pandemia do Covid-19, não foi possível realizar a etapa dos tratamentos térmicos, considerada fundamental para a conclusão deste projeto. Tendo sido realizada apenas parte da caracterização microestrutural da amostra de controle, que seria utilizada para comparação com as amostras termicamente tratadas.

Conclusões

Por meio da revisão da literatura sobre a liga Co-28Cr-6Mo constatou-se que ela é muito utilizada em implantes ortopédicos em duas condições principais de processamento: *fundida* (ASTM F75) e *trabalhada termomecanicamente* (ASTM F1537 e F799). A liga trabalhada apresenta propriedades mecânicas superiores devido à sua microestrutura mais refinada e homogênea e devido ao seu endurecimento por deformação. Como as amostras deste trabalho são provenientes de barras laminadas à quente, verificou-se que elas atendem a norma ASTM F1537. Isto foi comprovado pela análise da microestrutura da amostra de controle (sem tratamento térmico) no microscópio óptico durante a primeira etapa deste trabalho. A consulta aos artigos científicos disponíveis na literatura contribuiu ainda para o planejamento dos tratamentos térmicos necessários para a formação das fases de interesse. Primeiramente, foram definidos tempo e temperatura de solubilização da liga e, em seguida, os tempos e temperaturas necessários para a formação das fases de interesse, ou seja, principalmente as fases previstas no cálculo termodinâmico computacional, realizado no trabalho do ciclo anterior do PIBIC. Já a parte experimental deste trabalho contribuiu principalmente para o aprendizado das técnicas de preparação metalográfica, microscopia óptica e conceitos de microscopia eletrônica por meio do acompanhamento de análises no MEV. Para a continuidade deste trabalho em um novo ciclo PIBIC, pretende-se realizar os tratamentos térmicos planejados e a caracterização microestrutural das amostras tratadas. Com isso, pretende-se verificar o efeito das fases formadas na dureza da liga. Ao final, o objetivo é correlacionar os resultados obtidos com aquele da amostra de controle e com os dados da literatura, visando obter uma descrição mais detalhada da evolução microestrutural da liga Co-28Cr-6Mo quando esta é submetida à condições similares aquelas encontradas no processo de fabricação do implante.

Agradecimentos

Ao CNPq pela bolsa PIBIC, ao INT e aos Professores Doutores Sérgio S. Tavares e Juan M. Pardal da UFF.

ASTM. ASTM F1537: ASTM International, 2011, 1.
Patel, B. et al. Mater. Sci. Eng. C. 2012, 32, 1222-1229.
Giacchi, J. V. et al. Mater. Charact. 2011, 62, 53.
Niinomi, M.; Narushima, T.; Nakai, M. (Ed.) Springer. 2015, 3, 157.
Narayan, R. J. (Ed.). ASM Handbook, ASM International. 2012, 23.

Recuperação de Antioxidantes da Casca de Banana e Avaliação da Estabilidade Química do Extrato

Joyce V. Silva^{1,2}(IC), Eliane P. Jung²(PQ)* e Leilson de O. Ribeiro²(PQ) Simone C. Chiapetta²(PQ)

¹Universidade Federal Fluminense – UFF

²Instituto Nacional de Tecnologia – INT

* eliane.jung@int.gov.br

Palavras Chave: Casca de banana, capacidade antioxidante, compostos fenólicos.

Resumo

Alternativas no aproveitamento de resíduos de frutas, sobretudo das cascas, vêm sendo estudadas para diminuir a poluição gerada no meio ambiente e agregar valor à cadeia agroindustrial dessas frutas. A banana é uma fruta consumida em escala mundial, gerando a casca como resíduo¹. A casca da banana possui uma série de compostos, dentre os quais destacam-se os compostos bioativos, como os compostos fenólicos, que possuem uma importante capacidade antioxidante². Essa característica tem uma grande importância para seu uso em diversas aplicações, desde as mais simples como àquelas mais nobres como para obtenção de revestimentos e filmes carregados com moléculas antioxidantes³. O objetivo desse projeto foi otimizar a recuperação dos compostos antioxidantes presentes na casca de banana por meio de uma extração sólido-líquido e avaliar a estabilidade química do extrato otimizado submetido à diferentes condições de armazenamento. Para realização deste estudo foram utilizadas cascas de bananas da variedade nanica (*Musa cavendishii*), popularmente conhecida como banana d'água, doadas por uma empresa produtora de doce de banana localizada no Estado do Rio de Janeiro. As cascas foram transportadas até o Instituto Nacional de Tecnologia sob refrigeração. Após o recebimento, as cascas foram secas a 50 °C por 48 h para elaboração de uma farinha a partir de seu tritamento em um *mixer* portátil. A extração dos compostos antioxidantes da farinha da casca de banana foi realizada a 60 °C sob agitação magnética (500 rpm), variando a concentração de etanol na solução extratora (1 a 99%) e a razão sólido-líquido (1:10 a 1:33 m/v), por meio de um planejamento experimental. Os extratos obtidos foram avaliados quanto à capacidade antioxidante pelos métodos ABTS, DPPH e FRAP. O estudo da estabilidade foi realizado a 7° e 30 °C por um período de 60 dias. A cada 10 dias de armazenamento, alíquotas foram tomadas para avaliação do teor de compostos fenólicos totais e capacidade antioxidante pelos métodos mencionados acima. Verificou-se que a concentração de etanol que possibilitou maior recuperação de compostos antioxidantes foi entre 30 e 60%, enquanto a razão sólido-líquido não apresentou grande influência no processo, visto que foram observados bons resultados em toda a faixa que compreendeu a concentração ideal de etanol. Ao analisar os resultados estatisticamente, pela função desejabilidade, a melhor condição para extração ocorreu quando uma solução extratora contendo 53% de etanol em água e uma razão sólido-líquido de 1:33 (m/v) foram utilizadas. O extrato otimizado foi submetido ao estudo da estabilidade. A capacidade antioxidante pelo método FRAP mostrou que 96% da capacidade antioxidante do extrato a temperatura ambiente foi retida, enquanto no armazenamento sob refrigeração (7 °C) a retenção foi de 116%. Vale ressaltar que erros associados ao método de análise podem resultar em percentuais acima de 100%. Pelo método ABTS, foi possível observar que houve maior degradação dos compostos antioxidantes quando o extrato foi armazenado sob temperatura ambiente (30 °C). Após 60 dias de armazenamento sob essa temperatura, a retenção foi igual a 79%. Já sob refrigeração, a retenção da capacidade antioxidante foi igual a 95%, mostrando que os compostos antioxidantes interagem diferentemente com os radicais livres, o que corrobora o uso de diferentes métodos para realizar a avaliação da capacidade antioxidante. Pela determinação da capacidade antioxidante do extrato pelo método DPPH, não houve perda deste potencial ao longo do armazenamento e, em relação à retenção dos compostos antioxidantes presentes no extrato, os valores observados foram 105% e 102% referentes ao armazenamento a 7 °C e 30 °C, respectivamente. A análise do teor dos compostos fenólicos mostrou que a temperatura e o tempo de armazenamento tiveram pouca influência sobre esses compostos. A retenção do teor de compostos fenólicos totais foi superior a 90% em ambas as temperaturas de armazenamento após 60 dias. Uma vez que o produto de degradação dos compostos fenólicos, principalmente flavonoides, são ácidos fenólicos, a diferença entre as temperaturas de armazenamento foi pouco pronunciada. Entretanto, pelos ensaios de capacidade antioxidante é corroborado que o armazenamento do extrato pode ser realizado em ambas temperaturas, pois pouca diferença foi observada, exceto para o método ABTS.

Conclusões

Por meio dos resultados obtidos para a capacidade antioxidante, usando diferentes métodos, foi possível otimizar a extração dos compostos antioxidantes da farinha da casca de banana, sendo definida como a melhor condição operacional o emprego de uma solução extratora contendo 53% de etanol em água e razão sólido-líquido de 1:33 (m/v). A partir dos resultados da estabilidade química do extrato otimizado, é possível concluir que ambas as formas de armazenamento (7° e 30° C) possibilitaram a retenção dos compostos antioxidantes, porém para a capacidade antioxidante mensurada pelo método ABTS, o armazenamento sob refrigeração é mais indicado. Desta forma, conclui-se que a casca de banana pode ser uma fonte barata de compostos com capacidade antioxidante e a sua utilização contribui para reduzir os impactos ambientais causado pelo seu descarte inadequado.

Agradecimentos

Os autores agradecem ao Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq) e ao Instituto Nacional de Tecnologia (INT).

¹Ahmad, T. e Danish, M. *J. Environ. Management.* **2018**, 206, 330.

²Pereira, A. e Maraschin, M. *J. Ethnopharmacol.* **2015**, 160, 149.

³Mohapatra, D.; Mishra, S. e Sutar, N. *J. Sci. Ind. Res.* **2010**, 69, 323.

MODELAGEM E IDENTIFICAÇÃO DE PARÂMETROS CONSTITUTIVOS EM PLASTICIDADE E VISCO PLASTICIDADE

Julia Pitanga Carvalho¹, Joan O'Connor², Cristiane E. R. da Silva², Claudio T. dos Santos², Maurício J. Monteiro^{2*}

¹Universidade Federal do Rio de Janeiro, UFRJ (IC) ²Instituto Nacional de Tecnologia, INT (PQ)

email: mauricio.monteiro@int.gov.br

Palavras Chave: *Elementos Finitos, Plasticidade, Inferência Bayesiana.*

Resumo

A simulação e a implementação de modelos computacionais com a capacidade de reproduzir o comportamento de materiais durante testes experimentais são desafiadoras. Este fato se deve, majoritariamente, à complexidade dos mecanismos físicos envolvidos e às deformações irreversíveis exibidas pelos materiais quando o limite elástico é ultrapassado, como resultado do comportamento plástico, hiperelástico, viscoelástico, viscoplástico etc. Desta forma, o presente projeto de pesquisa para Iniciação Científica (IC) teve como objetivo geral o estudo do comportamento mecânico de materiais (i.e. resposta constitutiva dentro do contexto da mecânica do contínuo¹) através da simulação computacional de testes experimentais de tensão uniaxial usando o Método de Elementos Finitos (MEF). Para esse fim, foi usado o software COMSOL Multiphysics² e foram utilizados modelos constitutivos baseados em formulações elasto-plásticas e viscoplásticas³⁻⁶. O material estudado foi a Poliamida 12 (PA12) e foram confeccionados corpos de prova para testes de tensão uniaxial usando a técnica de Manufatura Aditiva, chamada de Sinterização Seletiva à Laser (SLS)., conduzidos pela Divisão de Ensaios em Materiais e Produtos (DI EMP) do INT em trabalhos anteriores⁷. Finalmente, foram implementados no COMSOL Multiphysics modelos elastoplásticos com encruamento isotrópico linear e não linear de Hockett-Sherby (H-S), gerando gráficos de tensão vs deformação, de forma a ajustar os parâmetros dos modelos computacionais implementados ao comportamento da PA12 obtido experimentalmente⁷.

Conclusões

Os modelos, tanto de encruamento linear e não linear de H-S, subestimam o comportamento da PA12, uma vez que é possível representá-lo até o limite de escoamento, mas não até o limite de ruptura. Porém, o trabalho continuará visando o estudo e implementação de modelos constitutivos hiperelásticos e viscoplásticos, bem como o ajuste de parâmetros ao comportamento experimental da PA12 usando métodos inversos. Além disso, conseguiu-se diminuir o tempo de cômputo de 2 horas de trabalhos anteriores⁷ para 50 segundos (incluindo recurso de “varredura paramétrica” ou *parametric sweep*), usando condições de contorno de simetria e modelo 2D representativo do problema real 3D, o que contribui a diminuir o custo computacional das análises de estimativa de parâmetros usando métodos inversos, especificamente Inferência Bayesiana^{8,9}.

Agradecimentos

Agradecimentos ao CNPq pela concessão da bolsa e à Divisão de Ensaios em Materiais e Produtos (DIEMP), por prover a infraestrutura necessária.

Gurtin, M. E.; Fried, E.; Anand, L. **2010**. The mechanics and thermodynamics of continua. Cambridge University Press, ISBN: 9781139482158. Comsol Multiphysics Software Reference Manual V 4.4. **2013**.

Lemaitre, J., & Chaboche, J. **1990**. Mechanics of solid materials. Cambridge: Cambridge University Press. doi:10.1017/cbo 9781139167970

Neto, E. A. D. S., Perić, D., & Owen, D. R. J. **2008**. Computational methods for plasticity: Theory and applications. Chichester, West Sussex, UK, Wiley.

Arruda, E. M. And Boyce, M. C., **1993**, A Three-dimensional Model for the Large Stretch Behavior of Rubber elastic materials, *J. Mech. Phys. Solids*, 41(2), Pp. 389–412. Bergstrom, J.S. Mechanics Of Solid Polymers: Theory And Computational Modeling. Plastics Design Library. Elsevier Science, **2015**. ISBN:9780323322966.

Gonçalves, B. L.; Silva, C. E. R.; Duda, F. P.; Graca, G. R. A.; Santos, C. T.; Monteiro, M. J.; O'Connor, J. O.; Borges, L. M. S. A. O impacto da geometria complexa do tecido cortical ósseo bovino no ensaio de tração:

Uso de Inteligência Artificial na Correlação de Resultados de Ensaio Mecânico e Ultrassom do Tecido Ósseo

Lucas C. Barbosa^{1*}(IC), Claudio T. dos Santos(PQ)¹, Cristiane E.R. Silva(PQ)¹

*lucas.barbosa@int.gov.br

¹Instituto Nacional de Tecnologia - INT; Divisão DIEMP; Laboratório LaCPM Av. Venezuela 82, sala 620, Saúde, Rio de Janeiro - RJ, 20081-312

Palavras Chave: Osteoporose. Inteligência Artificial. Machine Learning. Propriedades Mecânicas. Ultrassom RF.

Resumo

A osteoporose, doença osteometabólica caracterizada pela desmineralização óssea, está associada ao aumento do risco de fratura. O ultrassom quantitativo (QUS) vem sendo estudado como uma técnica de diagnóstico desta doença por ser não invasivo, além de usar energia não ionizante, tem capacidade para avaliar a qualidade óssea e seria um importante indicativo de risco de fratura. Desta forma, o objetivo deste trabalho foi tentar fazer a associação de ensaios mecânicos (INT), QUS (INMETRO) e inteligência artificial, mas especificamente machine learning (ML) e rede neural, para detectar correlações e padrões entre dados e previsões de comportamentos com o intuito de prever a qualidade do tecido ósseo. Foram utilizados os resultados de QUS obtidos antes e após a desmineralização induzida quimicamente (tempos 1,2 e 4 horas) de 3 amostras da média diáfise de osso cortical bovino, usando os modelos de Classificação Binária (Regressão Logística), os algoritmos supervisionados de Classificação Binária (Regressão Logística), K Vizinhos Mais Próximos (KNN), Máquina de Vetores de Suporte (SVM), algoritmo não supervisionado K-Means e Deep Learning: Redes Neurais (RN). Os dados de ensaio mecânico não foram utilizados pois não foi possível serem realizados, uma vez que o processo para confecção dos corpos de prova de acordo com a norma ASTM D 638, foram comprometidos devido a quarentena iniciada em março.

Conclusões

Para a regressão logística pura, tivemos uma precisão de 48%. Para o KNN, primeiramente foram testados diversos valores de K (de 1 a 40) para identificar aqueles cujo o erro era menor, no caso foi detectado o valor $K=9$. Então foi utilizado o algoritmo para $K=1$, chegando a uma precisão média de 46%. Já o SVM teve uma precisão de 63%. Para o K-Means, não conseguimos realizar de maneira efetiva o algoritmo. A rede neural teve uma precisão de 77%. Depois de realizados todos os procedimentos, chegamos a resultados com uma precisão relativamente baixa. No entanto, foi possível observar a tendência de classificação quanto se foram desmineralizados ou não e agrupar pelos respectivos tempos de desmineralização.

Os resultados não foram conclusivos, pois a precisão ainda foi considerada baixa. Acreditamos que isso se deve ao fato dos ensaios terem sido realizados por diferentes operadores e em diferentes datas. Os ensaios estavam sendo refeitos, porém ainda não foram concluídos por causa da quarentena iniciada em março.

Agradecimentos

Agradeço ao Cnpq e ao INT pela bolsa concedida, aos meus orientadores Cristiane Evelise e Cláudio Santos, e ao André Alvarenga por todo o suporte a este trabalho.

ALPAYDIN, E. **Introduction to Machine Learning**. [S.l.]: MIT Press, 2009.

COWIN, S. C., Editor: TELEGA, J. J., Reviewer. *Bone Mechanics Handbook*, 2nd Edition. -. **Applied Mechanics Reviews**, v. 56, n. 4, p. B61-B63, 1 jul. 2003.

D'ASTOUS, F. T.; FOSTER, F. S. Frequency dependence of ultrasound attenuation and backscatter in breast tissue. **Ultrasound in medicine & biology**, v. 12, n. 10, p. 795-808, out. 1986.

Keras | TensorFlow Core. Disponível em: <<https://www.tensorflow.org/guide/keras>>. Acesso em: 23 nov. 2019.

LAUGIER, P.; HAIAT, G. Introduction to the Physics of Ultrasound. **Bone Quantitative Ultrasound**. [S.l.]: Springer, Dordrecht, 2011. p. 29-45. . Acesso em: 18 nov. 2019.

P&D de tecnologias baseadas em métodos quantitativos para apoiar a tomada de decisão na indústria num contexto de incertezas

Renan B. Ferreira¹ (IC), Andréa R. N. Carvalho² (PQ)*

¹Universidade Estácio de Sá

²Instituto Nacional de Tecnologia

* andrea.carvalho@int.gov.br

Palavras Chave: Apoio a tomada de decisão, Análise não supervisionada, Engenharia de Produção

Resumo

O *Business Analytics* tem ganhado a atenção de organizações interessadas em usar dados para melhorar seus processos decisórios e criar valor em seus negócios. Essa prática tem se tornado cada vez mais frequente em organizações que estão enfrentando mudanças contínuas e rápidas, tendo que lidar com um conhecimento massivo e diversificado. Dentro desse contexto, o ferramental estatístico tem se tornado fundamental para a realização de análises descritivas e preditivas a partir de dados. Para problemas ditos de análise supervisionada, modelos podem ser criados para se prever ou inferir uma variável de resposta baseada em uma ou mais variáveis de entrada. Por outro lado, há situações onde se tem disponível um conjunto de variáveis de entrada, mas não há uma variável de saída conhecida. Problemas como esse são classificados como de análise não supervisionada, cujo objetivo é identificar padrões nos registros de dados com características semelhantes, comparando valores de seus atributos.

Posto isso, o atual plano de trabalho teve como foco técnicas estatísticas para problemas de análise não supervisionada. O objetivo é desenvolver no bolsista a capacidade de aplicação dessas técnicas para apoiar o processo decisório em áreas-chave da Engenharia de Produção. Nesse sentido, foi realizado o estudo das referidas técnicas, através de livros baseados em *Statistical Learning*. Em paralelo, a linguagem de programação R, própria para construção de modelos estatísticos, foi praticada através da resolução de exercícios. Além disso, dois estudos de caso reais interdisciplinares, um na área da química e outro de biomecânica, foram desenvolvidos. Para tanto, entrevistas semiestruturadas com as representantes de cada divisão foram conduzidas para a obtenção de informações sobre os problemas analisados, etapa fundamental para definição das técnicas a serem empregadas. Em seguida, planilhas foram preparadas para armazenar e pré-processar os dados dos problemas, técnicas estatísticas (i.e., Análise de Componentes Principais e *K-means*) foram aplicadas a esses dados através do software R e os resultados foram então analisados e validados pelas entrevistadas. Paralelamente, foram também realizados levantamentos na literatura sobre aplicações das técnicas empregadas em problemas semelhantes aos dos estudos de caso.

Como resultados, foram elaboradas duas notas técnicas e um relatório final relativos à teoria e à aplicação prática do conteúdo estudado. Vale ressaltar que as contribuições dessa pesquisa foram apresentadas em eventos internos do Instituto (Jornais de dados e 9º Encontro de Iniciação Científica, Tecnológica e à Inovação do INT). No caso específico do trabalho realizado na área de biomecânica, a pesquisa está se desdobrando em outras atividades, incluindo a disseminação dos resultados através de artigos científicos e apresentações na Semana Nacional da Ciência e Tecnologia. E ainda, num projeto recém aprovado da FAPERJ, que tem como foco o contexto industrial, pretende-se aplicar os métodos estatísticos estudados no âmbito desse trabalho de pesquisa para modelar as incertezas típicas de um problema de planejamento da produção.

Conclusões

O foco desse trabalho se deu no estudo e aplicação de técnicas estatísticas relativas a análise não supervisionada. Métodos de redução de dimensionalidade e de agrupamento foram aplicados através de estudos de casos baseados em dados reais. As principais lições aprendidas a partir desse trabalho são as seguintes:

- Há um conjunto vasto de ferramentas disponíveis para se analisar dados. A escolha pela técnica mais adequada vai depender do contexto e do objetivo do problema. Para cada tipo de problema há um conjunto de técnicas possíveis de serem aplicadas. Para tanto, é necessário um senso crítico por parte do analista no momento de decidir por qual técnica aplicar.

- Lidar com problemas inseridos no contexto da análise não supervisionada tende a ser desafiador, pois não há um objetivo simples e pré-definido para a análise. Além do mais, não há como validar o trabalho realizado, dado que não se conhece a 'resposta verdadeira'. Todavia, existem diferentes técnicas que podem ser utilizadas para lidar com problemas desse gênero. Dentre elas, estão a Análise de Componentes Principais (*Principal Components Analysis*, PCA) e a técnica de agrupamento *K-means*, que têm sido amplamente utilizadas nos dias de hoje por profissionais de diversas áreas do conhecimento.
- Através da aplicação do PCA, é possível transformar (i.e., reduzir) um conjunto original de variáveis num conjunto significativamente menor de componentes principais. A partir dessa redução de dimensionalidade é viável identificar diferenças entre grandes conjuntos de dados. A técnica de agrupamento *K-means*, por sua vez, possibilita a identificação de padrões nos dados e viabiliza a divisão do conjunto de dados em subgrupos de acordo com suas características em comum.
- A combinação dessas duas técnicas pode ser adotada para se resolver um dado problema como o do caso na área de biomecânica, em que objetivo é a identificação de talentos no basquete através da análise de variáveis antropométricas e biomecânicas de jogadoras de base e profissionais. Nesse caso, fez-se uso do PCA para reduzir a dimensionalidade dos dados originais e identificar as diferenças entre as observações (i.e., no caso, as jogadoras de basquete). O *K-means* foi aplicado com a finalidade de dividir esse conjunto de dados em subgrupos (i.e., categorias), a partir de suas características em comum. Os resultados obtidos a partir desse estudo caso servem de base para auxiliar os interessados (i.e., técnicos, profissionais do esporte) na tomada de decisões durante o treinamento dessas atletas.

Agradecimentos

Em primeiro lugar, eu gostaria de agradecer ao CNPq pela oportunidade de aprendizado gerada a partir da disponibilidade da bolsa; aos meus orientadores por todo o suporte dado e conhecimento compartilhado; e por fim, gostaria de agradecer ao INT por toda a infraestrutura disponibilizada.

Estudo de Prospecção – Tratamento de efluentes para o uso em cultivo de microalgas.

Samuel D.C. Santos (IC), Lídia M.S.S Mendes (PQ), Cláudia M.L.L Teixeira* (PQ). Instituto Nacional de Tecnologia
[*claudia.teixeira@int.gov.br](mailto:claudia.teixeira@int.gov.br)

¹Av. Venezuela, 82 – Praça Mauá – Rio de Janeiro – RJ, CEP: 20081-312.

Palavras-Chave: *microalga, tratamento de efluentes, nitrogênio amoniacal*

Resumo

O tratamento de efluentes representa um dos grandes problemas socioeconômicos da sociedade moderna. Altas concentrações de nitrogênio amoniacal em corpos hídricos estimulam o crescimento de plantas e algas no meio, fazendo com que haja uma queda na concentração de oxigênio dissolvido, e, conseqüentemente a eutrofização do mesmo. No Brasil, a resolução CONAMA 430 de 2011 estabelece 20mg.L⁻¹ como a concentração máxima de nitrogênio amoniacal em um efluente descartado em corpo hídrico^{1,2}. Para alcançar tal exigência, uma alternativa bastante promissora é o cultivo de microalgas em efluentes, já que estas possuem grande capacidade de fixação do nitrogênio amoniacal. Entretanto, altas concentrações de nitrogênio amoniacal também podem ser tóxicas às microalgas e por isso torna-se necessário o desenvolvimento de um estudo de prospecção para encontrar alternativas e tecnologias para a adequação dos efluentes ao cultivo de microalgas^{1,3}. Foi usada a metodologia de prospecção de tecnologia de Watts e Porter⁴ (1997) para avaliar o desenvolvimento das tecnologias usadas para remoção de nitrogênio amoniacal, com busca em bases de dados, como a Web of Science (Clarivate Analytics) e Science Direct (Elsevier); foi levantada a pesquisa aplicada que vem sendo realizada, em bases de dados de engenharia como a Compendex (Elsevier); e a pesquisa de desenvolvimento, realizada nas bases de dados de patentes como a do Escritório Europeu de Patentes, a Espacenet, e a do Escritório Brasileiro de Patentes, a base do INPI. Aliado a isso, foi realizado um breve levantamento bibliográfico buscando encontrar as condições ideais relatadas na literatura para o cultivo de microalgas em efluentes ricos em amônio/amônia. Os resultados obtidos na fase inicial permitiram: determinar os quatro principais tipos de processos empregados para remoção de nitrogênio amoniacal, sendo eles: biológicos, químicos, físicos e físico-químicos. Também foi possível mapear o crescimento dessas tecnologias ao longo dos anos, relacionar esse crescimento com os países que as desenvolveram, estado atual da distribuição da tecnologia pelo mundo e quais os tipos de processos empregados. Foi ainda possível reunir as principais metodologias químicas usadas para quantificar nitrogênio amoniacal em efluentes, descrevendo as principais bases teóricas dos métodos espectrofotométricos e potenciométrico.

Conclusões

O trabalho pode reunir muitos aspectos teóricos importantes, possibilitando avaliações e embasamentos para trabalhos futuros. Além disso, foi possível mapear o estado de evolução das tecnologias envolvidas na remoção da amônia.

Agradecimentos

Agradecemos ao CNPq pela bolsa PIBIC, assim como ao INT/MCTIC pelos demais recursos que foram necessários ao desenvolvimento deste trabalho.

¹ Koutra, E., Grammatikopoulos, G., Kornaros. *Bioresource Technology*, **2017**, 224, 473.

² Razzak, S. A., Ali, S. A. M., Hossain, M. M., & Delasa, H. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, **2017**, 76, 379.

³ Udaiyappan, A. F. M., Hasan, H. A., Takriff, M. S., & Abdullah, S. R. S. *Journal of Water Process Engineering*, **2017**, 20, 8.

⁴ Watts, R.; Porter, A. *Innovation Forecasting. Technological Forecasting and Social Change*, **1997**, 56, 25.

PIBITI

RESUMOS

Ocorrência e remoção de fármacos antivirais e seus produtos de degradação em matrizes aquosas do Rio de Janeiro – Alternativas de remoção utilizando Processos Oxidativos Avançados

Agape de C. M. F. da Silva¹ (IC), Ludmila C. de Almeida² (PQ), Natalia G. Figueiredo¹ (PQ)
[*agape.silva@int.gov.br](mailto:agape.silva@int.gov.br)

¹ Divisão de Química Analítica, Instituto Nacional de Tecnologia, INT- MCTIC; ² Programa de Pós Graduação em Engenharia Sanitária, Universidade Estadual do Rio de Janeiro, UERJ.

Av. Venezuela, 82 - Saúde, Rio de Janeiro - RJ, 20081-312

Palavras Chave: antivirais, cromatografia, POA.

Resumo

Antivirais são fármacos utilizados especificamente no tratamento de infecções virais. Dentre eles, podem-se destacar os antirretrovirais que são usados para o tratamento de infecções por retrovírus, principalmente o HIV. Alguns antivirais são altamente bioativos, podendo afetar negativamente organismos não-alvo e persistir em ambientes aquáticos acelerando o estabelecimento de resistência antiviral e limitando sua utilidade clínica em humanos e animais¹. Esses compostos representam uma classe farmacológica pouco conhecida do ponto de vista ambiental, com poucos estudos que determinam concentrações desses fármacos em águas superficiais e efluentes de Estações de Tratamento, sendo que, no Brasil, não há ainda estudos publicados. Nesse sentido, esse trabalho descreve o desenvolvimento de metodologia capaz de determinar a presença do antiviral aciclovir (ACV) e dos antirretrovirais lamivudina (3TC), zidovudina (AZT) e efavirenz (EFZ), em amostras de água e a realização de ensaios para determinar a toxicidade dessas substâncias em uma espécie de alga (*Raphidocelis subcapitata*) e duas espécies de crustáceos de água doce (*Ceriodaphnia dubia* e *Daphnia similis*). Os experimentos foram realizados em sistema de cromatografia a líquido de alta eficiência (CLAE) com detector de arranjo diodo (DAD) nos comprimentos de onda máximos de absorção de cada um dos analitos: ACV ($\lambda_{254\text{nm}}$), LMV ($\lambda_{266\text{nm}}$), AZT ($\lambda_{270\text{nm}}$) e EFZ ($\lambda_{245\text{nm}}$). Melhores resultados foram obtidos com gradiente binário de eluição composto de acetonitrila e acetato de amônio (5 mM, v/v) em coluna Zorbax SQ-aq 2,1 x 150 mm; 3,5mm(Agilent) a 35°C e vazão de 0,2 mL.min⁻¹. O volume de injeção foi de 5 μL e o tempo de análise foi de 15 minutos. Curvas analíticas foram preparadas na faixa de 8 a 150 mg.L⁻¹ para cada um dos fármacos diluídos em MeOH e CH₃COONH₄(5mM). Todas as análises foram realizadas em triplicata resultando em DPR <2% e coeficientes de correlação (R^2) > 0,999. Os ensaios de toxicidade foram realizados com os fármacos diluídos no meio de cultivo dos organismos avaliados². *Raphidocelis subcapitata* e *Ceriodaphnia dubia* foram utilizados em ensaios de toxicidade crônica, no qual foi avaliada a resposta reprodutiva ou morte desses organismos quando expostos a concentrações de 0,01 a 20 mg.L⁻¹ dos fármacos. *Daphnia similis* foi utilizada em ensaio de embriotoxicidade no qual foi observada a presença de má formação em neonatos quando seus ovos foram expostos a concentrações de 0,02 a 5 mg.L⁻¹ de cada um dos fármacos.

Conclusões

As concentrações de efeito observado (CEO) em todos os ensaios foram menores que 4,16 mg.L⁻¹(ACV); 1,25mg.L⁻¹ (LMV); 2,5mg.L⁻¹ (AZT) e 0,03mg.L⁻¹ (EFZ). Nossos resultados apontam para necessidade de estudos de remoção destes compostos em ambientes aquáticos, no Brasil, visto que as concentrações tóxicas encontradas são menores do que a dose administrada durante os tratamentos. A alternativa de remoção proposta é o uso de Processos Oxidativos Avançados (UV/H₂O₂) em ETA e ETE. O método analítico otimizado associado a adequado processo de limpeza e concentração de amostras mostra-se adequado a determinação dos antivirais selecionados em amostras de água.

Agradecimentos

FAPERJ e CNPQ

1Nannou, C.et al., Science of the Total Environment, 2020, 699, 134322
2ABNT NBR 12648; 13373; 12713

9º ENICTI - Encontro de Iniciação Científica, Tecnológica e à Inovação do INT

Conversão de pentoses a álcool furfurílico sobre catalisadores zeolíticos em um processo contínuo

Alannah M. Calazans^{1,2} (IC), Elise M. Albuquerque² (PG), Tiago L. Coelho² (PG), Marco A. Fraga² (PQ)

¹Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia do Rio de Janeiro, R. Lúcio Tavares, 1045 - Centro, Nilópolis - RJ, 26530-060. ²Instituto Nacional de Tecnologia/MCTI, Laboratório de Catálise, Av. Venezuela 82/518, Saúde, 20081-312, Rio de Janeiro/RJ, Brasil.
alannah.montenegro@int.gov.br

Palavras Chave: Xilose, zeólita beta, álcool furfurílico

Ao longo dos anos, em virtude do desenvolvimento tecnológico e aumento da densidade populacional, a demanda por energia tem aumentado consideravelmente. Com isso, a preocupação com o meio ambiente tem aumentado, especialmente, no que concerne o uso intenso de matérias primas de origem fóssil. Neste cenário, começam a surgir práticas para evitar impactos causados pelo desenvolvimento industrial, como a química verde, que busca desenvolver processos que diminuam ou eliminem o uso de substâncias nocivas ao meio ambiente. A biomassa lignocelulósica se destaca nesse contexto, por ser uma matéria prima abundante, renovável e de baixo custo¹. Estudos^{1,2} sugerem que a biomassa lignocelulósica apresenta potencial para suprir, ao menos em parte, a dependência do petróleo. Essa biomassa é composta principalmente por celulose e hemicelulose (polissacarídeos) e lignina. Dentre os possíveis produtos, de elevado valor agregado, que podem ser obtidos da fração hemicelulósica, por exemplo, destaca-se o álcool furfurílico e o ácido levulínico, que apresentam interesse na indústria para produção de vitamina c e síntese de solventes, respectivamente. Contudo, a transformação de açúcares nesses produtos requer o uso de catalisadores com propriedades específicas. Esta pesquisa usou zeólita como catalisador capaz de promover a síntese da reação tandem de álcool furfurílico a partir da xilose que foi usada como molécula modelo representativa da hemicelulose. Além disso, outros testes catalíticos foram conduzidos utilizando diferentes isômeros da xilose (arabinose, ribose, lioxose), com o intuito de entender a influência da conformação da molécula na formação dos produtos de interesse. Destaca-se ainda, que os testes catalíticos foram realizados em uma única etapa, sem adição de hidrogênio molecular, o que representa algumas vantagens frente ao processo industrial, que geralmente é utilizado para obter álcool furfurílico ou ácido levulínico.

Conclusões

Os resultados deste trabalho indicam que a posição do grupo hidroxila no substrato, afeta significativamente a conversão dos açúcares bem como a distribuição de produtos obtidos. A maior conversão foi obtida utilizando a xilose como substrato, onde o álcool furfurílico foi o produto de maior concentração. Apesar de menor conversão, os testes catalíticos realizados com arabinose ou ribose não devem ser desprezados, pois mostrou a presença de ácido levulínico como produto de reação. Vale ressaltar que o ácido levulínico não foi observado nos testes conduzidos com xilose ou lioxose.

Agradecimentos

Ao CNPq pelo financiamento e bolsas PCI e PIBITI

¹ PAULINO, P. N.; PEREZ, R. F.; FIGUEIREDO, N. G.; FRAGA, M. A. Green Chemistry. 2017, 3759, 3763.

² CHHEDA, J. N.; HUBER, G. W.; DUMESIC, J. A. Angew Chem. 2007, 7164, 7183.

Análise numérica e experimental de estruturas com arquitetura interna de poros obtidas por manufatura aditiva

Anderson Wang (IC)¹, Edwin Sallica Leva (PQ)^{1,*}, Claudio Teodoro dos Santos (PQ)¹

*e-mail do autor responsável: edwin.sallica@int.gov.br

¹Instituto Nacional de Tecnologia – INT; Divisão DIEMP; Laboratório LaCPM
Av. Venezuela 82, sala 620, Saúde, Rio de Janeiro – RJ, 20081-312

Palavras Chave: *Polímeros, sinterização seletiva a laser, propriedades mecânicas.*

Resumo

As estruturas porosas vêm sendo intensamente estudadas devido a suas interessantes propriedades e potenciais aplicações em diversas áreas [1]. A inserção de poros nos implantes ortopédicos permite diminuir a sua rigidez efetiva; e, em consequência, diminui-se a reabsorção óssea [2]. Além disso, um arranjo de poros interconectados permite o crescimento de tecido ósseo através dos poros, favorecendo o processo de osseointegração [3]. A manufatura aditiva é baseada na construção camada por camada, tornando possível a obtenção de peças com geometria complexa [4], tal como estruturas com arquitetura interna de poros. Neste trabalho foram fabricadas estruturas porosas com diferentes porcentagens de porosidade (25,9, 45,2 e 59,6 % de porosidade projetada), que seguem a sequência de formação da esponja de Menger, obtidas pela técnica de sinterização seletiva a laser (SLS). Foram usados como material de partida pós de náilon do tipo PA12, nas condições virgem, reutilizado e mistura dos mesmos (50/50). A caracterização das peças impressas considera a avaliação da sua superfície, porcentagem de porosidade, dimensão dos poros projetados, microestrutura e propriedades mecânicas. Para melhor entendimento do comportamento mecânico dessas estruturas, foram realizadas simulações computacionais baseadas em elementos finitos. Além disso, foram caracterizados os pós de partida e as temperaturas envolvidas no processo SLS. A informação obtida da análise dessas estruturas porosas ajudará no desenvolvimento e otimização de arcabouços e implantes porosos.

Conclusões

Foram obtidas peças porosas com 25,9 e 59,6 % de porosidade projetada por SLS a partir da mistura de pós (50/50). As dimensões dos poros projetados nas peças impressas diferem às do desenho CAD. As peças impressas apresentaram partículas aderidas e ondulações na sua superfície, além de poros no interior das suas paredes, com valor próximo de 8 %. O aumento na porosidade projetada causou uma diminuição na resistência mecânica e rigidez efetiva das peças impressas. Os valores de limite de escoamento e módulo de elasticidade efetivo obtidos experimentalmente diferem dos respectivos valores calculados pelas equações do modelo de Gibson e Ashby. As simulações numéricas auxiliaram no entendimento do ensaio de compressão das peças porosas, fornecendo informação das regiões onde se concentraram as maiores tensões e deformações. A caracterização mecânica das peças porosas obtidas a partir de pó virgem, a impressão das peças a partir de pó reutilizado e as peças complementares (45,2 % de porosidade) a partir de mistura de pós foram adiadas devido à pandemia de COVID-19.

Agradecimentos

Ao Cnpq pela bolsa PIBIT concedida, ao INT pelo suporte, à DIEMP pela oportunidade de aprendizado, à Valéria Costa pela parceria e ao Marcos Garamvölgyi pela ajuda.

¹ Gibson, L.J.; Ashby, M.F. Cellular Solids: Structure and Properties, Cambridge University Press, United Kingdom, 1997;

² Shi, J., Liang, H., Jiang, J., Tang, W., Yang, J. Design and Performance Evaluation of Porous Titanium Alloy Structures for Bone Implantation. Math. Probl. Eng. 2019.

³ Warnke, P.H.; Douglas, T.; Wollny, P.; Sherry, E.; Steiner, M.; Galonska, S.; Becker, S.T.; Springer, I.N.; Wiltfang, J.; Sivananthan, S. Rapid Prototyping: Porous Titanium Alloy Scaffolds Produced by Selective Laser Melting for Bone Tissue Engineering, Tissue Eng. Part C Methods 15 (2008) 115-124.

⁴ Pinkerton, A.J. Lasers in additive manufacturing, Opt. Laser Technol. 78 (2016) 25–32.

Estudo de catalisadores Pt/TiO₂ para a HDO de moléculas modelo representativas do bio-óleo.

Carlos A. B. Soares Jr^{1,2} (IC), Raimundo C. Rabelo Neto¹ (PQ), Fábio B. Noronha¹ (PQ)
**juniorcabsj@gmail.com*

¹Instituto Nacional de Tecnologia, Av. Venezuela 82, Rio de Janeiro, 20081-310, Brasil.

²Instituto Federal do Rio de Janeiro, R. Cel. Delio Menezes Porto, 1045 - Centro, Nilópolis - RJ, 26530-060, Brasil.

Palavras Chave: HDO / Bio-óleo / Energia / Titânia

Resumo

A produção de bio-óleo a partir do processo de pirolise da biomassa têm se destacado como uma promissora tecnologia sustentável para produção de combustíveis renováveis. Entretanto, o bio-óleo apresenta um alto teor de compostos oxigenados. Esta característica contribui em várias propriedades indesejadas, como alta corrosividade, baixa densidade energética e alta instabilidade térmica e química, o que inibe sua utilização direta como combustível. Assim, o upgrade do bio-óleo utilizando o processo de hidrodessoxigenação catalítica (HDO) apresenta-se como uma tecnologia potencial para redução do teor de compostos oxigenados. O aumento da eficiência do processo e conseqüente redução dos custos representam uma barreira para a inserção desta tecnologia no mercado. Diversos estudos sugerem que a reação de HDO envolve um mecanismo bifuncional, sendo necessário um sítio metálico com um sítio ácido ou oxofílico. O entendimento da interação e da contribuição de cada tipo de sítio bem como do mecanismo da reação é fundamental para o desenvolvimento de um catalisador apropriado para a reação. O objetivo deste trabalho é compreender o papel da interface metal-suporte metal na reação HDO em fase gasosa de moléculas modelo do bio-óleo. Foram preparados catalisadores de platina suportados em sílica (não oxofílico) e TiO₂ (oxofílico). Os catalisadores suportados em titânia se mostraram mais seletivos para a produção de compostos desoxigenados (benzeno e ciclohexano), enquanto o catalisador suportado em sílica foi altamente seletivo a compostos a oxigenados não aromaticos. Também foi verificada a influência da temperatura nas reações (200-300°). foram realizados em diferentes temperaturas de reação (220-300 °C). Verificou-se que a redução da temperatura reação favoreceu a maior formação de compostos oxigenados não aromáticos (ciclohexanona e ciclohexanol). Entretanto, foi possível aumentar o rendimento para compostos desoxigenados (ciclohexeno e ciclohexano) por meio da desidratação do ciclohexanol utilizando um óxido ácido. Os resultados mostraram que na temperatura de 220°C a presença de niobia junto com o catalisador Pt/TiO₂ possibilitou a desidratação boa parte do ciclohexanol a ciclohexano, diminuindo assim a quantidade de compostos oxigenados.

Conclusões

Os catalisadores suportados em titânia apresentaram melhores rendimentos a compostos desoxigenados em função da melhor interação metal-suporte e a presença de sítios altamente oxofílicos. Estes efeitos promovem a reação de desoxigenação. Também foi possível promover a produção de ciclohexano a baixa temperatura e pressão a partir da associação do catalisador de Pt/TiO₂ com um óxido ácido.

Agradecimentos

Os autores agradecem ao CNPQ pelas bolsas e ao INT (DICAP CENANO) pela infraestrutura.

- Liu, C., Wang, H., Karim, A.M., Sun, J., Wang, Y., Chem. Soc. Rev., 2014, 43, 7594-7623

- Wang, H.; Male, J.; Wang, Y., ACS Catalysis, 2013, 3, 1047-1070.

- Teles, C.A., Rabelo-Neto, R.C., De Lima, J.R., Mattos, L.V., Resasco, D.E., Noronha, F.B., Catal. Lett. 2016, 146 1848-1857.

-De Souza, P.M., Rabelo-Neto, R.C., Borges, L.E.P., Jacobs, G., Davis, B.H., Resasco, D.E., Noronha, F.B., ACS Catal. 2017, 7, 2058-2073.

Avaliação de catalisadores Ir, Pt, Rh e Ru suportados em CeO₂/MgAlO₄ quanto a inibição de formação de coque na reforma seca do metano

Douglas Silva Machado^{1,2} (IC), Raimundo Crisóstomo Rabelo Neto¹ (PQ), Fábio Bellot Noronha¹ (PQ)
*douglas.machado@int.gov.br

¹Instituto Nacional de Tecnologia, Av. Venezuela 82, Rio de Janeiro, 20081-310, Brasil.

²Instituto Federal do Rio de Janeiro, R. Cel. Delio Menezes Porto, 1045 - Centro, Nilópolis - RJ, 26530-060, Brasil.

Palavras chave: Gaseificação de biomassa, alcatrão, coque, energia, reforma catalítica

Resumo

A gaseificação da biomassa é uma tecnologia promissora para geração de energia renovável utilizando resíduos agroindustriais e urbanos. O principal produto da gaseificação é uma mistura rica de hidrogênio e do monóxido de carbono, conhecido como gás de síntese. Este gás de síntese pode ser utilizado como combustível em turbinas para produção de energia elétrica. Também convertido em combustíveis líquidos pelo processo da síntese de Fischer-Tropsch. Além do gás de síntese, metano e outros hidrocarbonetos leves, dióxido de carbono e uma mistura de hidrocarbonetos aromáticos como tolueno, pireno, antraceno e naftaleno, conhecida como alcatrão. Entretanto, a tecnologia de gaseificação da biomassa apresenta como uma das principais barreiras a contaminação do gás de síntese com alcatrão, o qual pode condensar-se e provocar o entupimento de tubulações, filtros, turbinas e outros equipamentos. Uma das alternativas mais atrativas e eficientes para remoção do alcatrão é a reforma catalítica, a qual utiliza catalisadores capazes de decompor esses compostos de alto peso molecular em H₂, CO e CO₂. No entanto, esses catalisadores sofrem desativação, principalmente devido à formação de coque. Portanto, o desenvolvimento de catalisadores eficientes e resistentes a desativação ainda é um desafio a reforma catalítica do alcatrão. Este trabalho teve como objetivo preparar catalisadores contendo diferentes metais nobres suportados em aluminato de magnésio recoberto com óxido de cério (Ir/CeO₂/MgAl₂O₄, Pt/CeO₂/MgAl₂O₄, Rh/CeO₂/MgAl₂O₄ e Ru/CeO₂/MgAl₂O₄). e avaliar o desempenho deste para a produção de gás de síntese a partir da reforma catalítica de moléculas modelo do alcatrão. Como a deposição de coque é a principal causa da desativação dos catalisadores, nesta etapa do projeto, a reação de reforma seca do metano foi utilizada como uma reação modelo para avaliar a capacidade de inibição a formação de coque destes catalisadores. As técnicas de oxidação a temperatura programada (TPO), espectroscopia Raman e microscopia eletrônica de varredura (MEV) foram utilizadas para quantificar e avaliar o tipo de coque formado. Os resultados mostram que o recobrimento do aluminato de magnésio com óxido de cério reduziu a formação de coque devido a mobilidade de oxigênio e a formação de vacâncias de oxigênio na camada de CeO₂. O catalisadores de Rh, Ru e Ir foram altamente estáveis na reação de reforma a seco do metano ao longo de 24 horas, no entanto, o catalisador de Pt desativou. As análises de pós-reação mostraram uma maior taxa de deposição de coque. para o catalisador de Pt, o que pode explicar a desativação. Com exceção do catalisador de Rh, todos os catalisadores mostraram a deposição de carbono filamental ou nanotubos de carbono. Também foi possível verificar a formação de diferentes tipos de carbono nos catalisadores testados,

Conclusões

Os catalisadores de Rh, Ru e Ir se mostraram o que explica a maior estabilidade e uma melhor interação com céria. Assim, pode-se esperar que estes catalisadores sejam promissores e mais adequados para a reação de reforma catalítica do alcatrão.

Agradecimentos

Os autores agradecem ao CNPQ pelas bolsas e ao INT (DICAP e CENANO) pela infraestrutura.

¹ Castro, T.P., Silveira, E.B., Rabelo-Neto, R.C., Borges, L.E.P., Noronha, F.B., Catalysis Today, 2018, 299, 251-262.

² Silveira, E. B.; Rabelo-Neto, R. C.; Noronha, F. B., Catalysis Today, 2017, 289, 289-301.

³ Łamacz, Agata et al., Catalysis Letters, 2009, 128, 40-48.

⁴ R.O. da Fonseca, R.C. Rabelo-Neto, R.C.C. Simões, L.V. Mattos, F.B. Noronha, International Journal of Hydrogen Energy, 2020, 45, 5182-5191.

Síntese enzimática de ésteres

Mayara A. Silva ¹Universidade Federal do Rio de Janeiro (IC), Ronaldo R. de Sousa ²Universidade de São Paulo (PQ), Ayla S. da Silva ³Universidade Federal do Rio de Janeiro (PQ), Viridiana S. Ferreira-Leitão* ⁴Universidade Federal do Rio de Janeiro (PQ).

viridiana.leitao@int.gov.br

Palavras Chave: Ésteres, açúcares, lipases.

Resumo

Ésteres são substâncias de conhecida importância industrial. Sua obtenção por via química não é capaz de atender de forma trivial elevados requisitos de qualidade e desempenho ambiental para aplicações cosméticas, alimentícias e farmacêuticas. Por outro lado, a biocatálise traz um conjunto de vantagens nessa direção, ainda que pese a necessidade de desenvolvimentos tecnológicos e otimizações para seu amplo uso neste caso¹. No período, octil-ésteres (caprilato, caprato e laurato de octila) foram obtidos por via enzimática em conversões superiores a 90% em meio sem solvente e temperatura moderada (50 °C), com lipases comerciais e não-comerciais. Esses resultados foram analisados à luz da ferramenta matemática proposta pelo grupo (SER) para prever o comportamento das esterificações e os resultados indicam sua aplicabilidade para diferentes moléculas e diferentes lipases. Os resultados obtidos estão sendo consolidados e discutidos com vistas a elaboração de um artigo científico.

No contexto do teletrabalho instaurado em março de 2020 por ocasião da COVID-19, o projeto visou, a partir de uma prospecção bibliográfica, abrir novas perspectivas para a síntese biocatalítica de ésteres mais complexos, como os ésteres graxos de açúcares. O interesse por estas moléculas deve-se a sua particular aplicação como surfactantes prontamente compatíveis com formulações de alimentos (já que são oriundos de substratos naturais)² e pelas recentes pesquisas do LABIC na obtenção de manose a partir da semente de açaí. O levantamento bibliográfico apontou que ésteres de manose são pouco descritos na literatura, mas que a síntese deste tipo de éster por biocatálise possui diversos desafios tecnológicos a serem superados – cinética reacional desfavorável, acarretando longos tempo de reação (superior a 24 h) ou a adoção de cargas enzimáticas elevadas, e a incompatibilidade de fases e a frequente necessidade de solventes (eventualmente mais de 1) devido as polaridades opostas dos ácidos graxos e dos açúcares. A partir dos resultados mais promissores obtidos na literatura para síntese de ésteres de graxos de açúcares como glicose, frutose, sucrose, entre outros, foi descrito um conjunto de possíveis condições reacionais – razão molar, temperatura, carga enzimática, enzima a ser usada, solvente e respectiva quantidade - a serem testadas para a síntese de ésteres a partir de ácidos graxos de 16 a 18 carbonos e manose. Também foi explorada a possibilidade futura de obter esses ésteres partindo de matérias-primas residuais atualmente em estudo no LABIC/INT – o DDOP (destilado de desodorização do óleo de palma), um material ceroso rico em ácidos graxos livres de 16 a 18 carbonos e o extrato aquoso da semente de açaí, com concentrações elevadas de manose. Neste caso, a pesquisa bibliográfica tem indicado a necessidade de se conduzir as reações em meios emulsionados, que podem envolver a necessidade de um tensoativo no meio reacional

Conclusões

Notáveis avanços na síntese de ésteres de cadeia média e longa por biocatálise foram alcançados no referido projeto – obtenção de altos rendimentos com cargas enzimáticas reduzidas em meio sem solvente, viabilidade de uso de enzimas não-comerciais e a avaliação de uma ferramenta matemática (SER) simples e aparentemente eficaz para prever o comportamento das reações de esterificação mediadas por lipases. Os resultados até então obtidos tem permitido a redação de artigos científicos e o incremento dos conhecimentos do grupo na síntese de ésteres. Neste sentido, a prospecção científica realizada no período aportou informações relevantes em ésteres graxos de açúcares, que são importantes surfactantes para a indústria alimentícia, apontando o caráter inovador da obtenção de ésteres de manose, integrando este trabalho com o de outras linhas de pesquisa do LABIC/INT, e apresentando os desafios tecnológicos deste tipo de síntese.

Agradecimentos

CNPq, LABIM/UFRJ.

¹ Khan, N. R.; Rathod, V. K. *Process. Biochem.*, **2015**, 1793, 1806.

² Neta, N.S; Teixeira, J.A; Rodrigues, L.R. *Food and Sci. Nutr.*, **2014**, 55, 595.

Mecânica fina na construção de tecnologia assistiva para escola inclusiva

Sulamita S. Elias – UNESA¹(IC), Saul E. Mizrahi – INT² (PQ), Homero M. Pires - INT² (PQ)

sulamita.elias@hotmail.com; saul.mizrahi@int.gov.br; homero.modesto@gmail.com

UNESA¹ - Universidade Estácio de Sá

INT/DIEAP² - Av. Venezuela 82, sala 701 – Saúde, Rio de Janeiro – RJ, Brasi, CEP: 20081-312

Palavras Chave: Atuadores, Mecânica, Tecnologia Assistiva, ligas com memória de forma.

Este estudo apresenta o resultado de uma investigação, em que as próteses manuais desenvolvidas com atuadores à base de motores elétricos servo-controlados ou de passo, pneumáticos, mecânicos e elementos hidráulicos que apresentam limitações operacionais, significativas devido ao peso, ruído, atrito e complexidade do manuseio e configuração no, desenvolvimento do membro superior. No intuito de substituir a ação muscular da mão criando próteses para pessoas que, sofreram a perda desses membros, mostraram-se relevantes resultados nas últimas décadas. Sendo assim, o objetivo é de desenvolver uma prótese com atuador de molas de nitinol e fornece uma visão geral sobre projeto. Foram utilizadas, tecnologias de automação e robótica, inteligência artificial, automatizada capaz de, gerar, o uso de ligas com memória de forma (LMF), que é, uma combinação de níquel e titânio, (NiTi ou nitinol), uma descoberta por William Beuheler nos laboratórios da Marinha dos Estados Unidos.

Visto que, com ligas de memória de forma, é enfatizado no uso de molas de nitinol, para a desenvolvimento da prótese por sua excelente capacidade de memória de forma, por sua boa relação força-peso e facilidade de ativação do matéria, por indução através dele uma corrente elétrica. Para a recuperação de tensão, caracterizada por recuperar uma forma predefinida quando aquecido acima da temperatura de transformação, essas temperaturas são M_s e M_f ; A_s e A_f (início da Martensita e final do Martensita; início da Austenita e final do Austenita). Busca se também aprimorar e fornece uma visão geral sobre design do atuador.

Portanto, a intenção é inserir os fios de Nitinol em uma prótese e trabalhar como pequenos músculos, que podem puxar dedos individuais para abrir e fechar, sendo ele movimentado por atuador, com mola helicoidal de nitinol.

Conclusões

Esse trabalho serviu para melhor compreensão, do comportamento do atuador, molas e fios de nitinol, como também permitiu estabelecer as condições necessárias preparação necessária para ativação do fio LMF, com uma corrente elétrica, que gera uma deflexão, fazendo com que ela se contraia como um músculo. Quando a corrente é desligada, o fio volta à sua forma original enquanto esfria, ou seja, possível coletar dados em diferentes tensões elétricas e esforços mecânicos aplicadas nas molas de NiTi com base na experimentação anterior, o sistema de refrigeração do Nitinol deve ser aperfeiçoado. A fim de obter uma refrigeração mais rápida e consequentemente, as transições entre as mudanças de forma.

O protótipo é uma cópia a estrutura dos músculos do corpo humano, agrupando os fios finos para simular as fibras musculares. Esse agrupamento de fios apresenta uma área de superfície maior através da qual o calor pode ser dissipado, o que significa que eles podem sofrer contrações e extensões rápidas, bem como os músculos humanos reais.

Recomenda-se no futuro modificar o design da estrutura de base do protótipo para colocar mais molas em paralelo para aumentar a força em cada mão articular e usar sensores musculares mioelétricos que permitirão movimentos voluntários das mãos, controlado pelo usuário sem a necessidade de usar dispositivos externos.

Agradecimentos

Estou imensamente agradecido pela oportunidade que me foi dada pelo Instituto Nacional de Tecnologia (INT), e ao Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq) pelo fomento da pesquisa, onde pude aprimorar os conhecimentos já obtidos na universidade e adquirir novos conhecimentos nas áreas de pesquisa, materiais e no desenvolvimento de projetos utilizando prototipagem e automação. Gostaria de agradecer primeiramente a Deus, aos meus orientadores Saul Mizrahi e Homero Pires. Por todo acompanhamento, dedicação e paciência durante este período e a toda o equipe.

¹ PESSANHA, Everton Maick Rangel. **Análise de estrutura e propriedades de liga TiNi com efeito de memória de forma sujeita a tratamentos térmicos e deformação**. Campos dos Goytacazes: Universidade Estadual do Norte Fluminense - UENF, 2012.

² GODOI, Renan Pereira de. **Estudo e Caracterização da Liga Nitinol**. Londrina: Universidade Tecnológica Federal do Paraná, 2015.

Obtenção de ficocianina de *Arthrospira platensis* com vistas à produção de produtos de interesse comercial

Pedro C. R. Dias¹ (IC), *Cláudia M. L. L. Teixeira¹ (PQ).
¹ Instituto Nacional de Tecnologia
*claudia.teixeira@int.gov.br

¹Av. Venezuela, 82 – Praça Mauá – Rio de Janeiro – RJ, CEP: 20081-312.

Palavras Chave: *Spirulina*, ficocianina, meio alternativo

Resumo

A grande demanda por compostos naturais para a substituição dos aditivos químicos utilizados na indústria alimentícia, farmacêutica e de cosméticos, tem sido de primordial importância para a intensificação das pesquisas na área de biotecnologia com vistas à obtenção de produtos naturais com economicidade. As várias vantagens das microalgas em comparação aos vegetais superiores as colocam em posição de destaque e de grande aplicação nestas pesquisas. O cultivo comercial de microalgas está bem estabelecido em países como Estados Unidos, Austrália, Israel, China e Chile¹, e a biomassa produzida vem sendo comercializada principalmente na forma *in natura* para uso como suplemento alimentar para humanos, e em menor escala para extração de compostos de alto valor comercial. As principais microalgas cultivadas comercialmente são espécies dos gêneros *Chlorella*, *Arthrospira* (*Spirulina*), *Dunaliella* e *Haematococcus*. *Arthrospira platensis*, microalga escolhida neste estudo, apresenta alto teor em ficocianina e em uma gama imensa de produtos, como vitamina B12, ácidos graxos essenciais, carotenoides. A ficocianina, basicamente, vem sendo utilizada como corante, mas devido às diversas propriedades farmacológicas, vem crescendo o interesse no seu uso como nutracêuticos e cosméticos. Para alcançar economicidade para determinadas aplicações é de vital importância a diminuição do custo da produção da biomassa, sendo uma das formas para alcançar esta condição o uso de insumos de mais baixo custo na produção do meio de cultivo; entretanto, esta troca de nutrientes do meio não deve impactar negativamente na produção dos bioativos de interesse, neste caso, a ficocianina. Assim, foram investigados neste trabalho, para a produção de biomassa e de ficocianina, quatro meios de cultivo com modificações nas concentrações em bicarbonato, carbonato e em nitrato, assim como foram substituídas as fontes de fósforo e de nitrogênio utilizando-se os fertilizantes superfosfato e salitre do Chile, respectivamente, além de NPK. O meio produzido à base de superfosfato e salitre do Chile, e com as concentrações dos demais componentes idênticas ao do meio controle (Zarrouk modificado por George³), apresentou resultado de produtividade em biomassa similar à do controle e teor em ficocianina levemente superior. O meio produzido com os mesmos fertilizantes, mas com diminuição na concentração de bicarbonato e sem a adição de carbonato gerou produtividade em biomassa similar àquela do meio controle; porém, quanto à comparação com relação ao teor em ficocianina, não foi possível determinar este valor por conta do afastamento do trabalho presencial.

Conclusões

Como meio de cultivo de mais baixo custo e de boa performance para a produção de biomassa de *Spirulina* e ficocianina é indicado o meio produzido a partir dos fertilizantes superfosfato e salitre do Chile.

Agradecimentos

Agradecemos ao CNPq pela bolsa PIBITI, assim como ao INT pelos demais recursos que foram necessários ao desenvolvimento deste trabalho.

¹ Ben-Amotz a., Polle J. E.W. and Rao D. V. S. The Alga *Dunaliella*: Biodiversity, Physiology, Genomics and Biotechnology. Science Publishers. **2009**, 45-147

² Richmond, A. Handbook of Microalgal Culture: Biotechnology and Applied Phycology. Oxford: Blackwell Science Ltd. 577 p. **2004**

³ George, E.A. *Culture Centre of Algae and Protozoa: list of strains 1976*, 3rd edition. Inst. Terr. Ecol., Nat. Environment Res. Council., Cambridge, 120 p.

Quantificação e extração enzimática de procianidinas das sementes de açaí (*Euterpe oleracea* Martius)

Felipe R. L. do Amaral ¹Instituto Federal do Rio de Janeiro (IC), Gabriel R. Martins ²Instituto Nacional de Tecnologia (PQ), Ayla S. da Silva ²Instituto Nacional de Tecnologia (PQ).

ayla.santana@int.gov.br

Palavras Chave: Semente de açaí; extração enzimática; quantificação; procianidinas

Resumo

O açaizeiro (*Euterpe oleracea* Martius) é uma palmeira típica da região amazônica. O seu fruto (açaí) é de grande interesse da indústria alimentícia, devido à comercialização e crescente consumo da polpa. A semente do açaí corresponde a 85% (m/m) do fruto, sendo considerada um resíduo da produção. Assim, a produção atual do fruto gera cerca de 1,2 milhões de toneladas de semente por ano que se acumulam, acarretando problemas ambiental e urbano graves. Nosso grupo de pesquisa caracterizou o extrato da semente e encontrou taninos condensados com alto grau de polimerização, também chamados de procianidinas (PAs), como os metabólitos majoritários. Essas substâncias possuem potencial biológico, como ações anticarcinogênica e antiinflamatória, além de combater o estresse oxidativo. Por isso, alinhado a uma ausência de metodologias específicas para análise de PAs, este trabalho teve o enfoque na quantificação desses metabólitos. Uma adaptação do método de quantificação de teor de polifenóis totais (método de Folin-Ciocalteu) foi avaliada para quantificação específica das PAs do extrato de semente de açaí, baseando-se na possível especificidade da precipitação destes com uma proteína padrão, a caseína, em relação à outros metabólitos contidos no extrato, tendo em vista a capacidade das PAs de se complexarem com proteínas. Para isso, foi medida a diferença do teor de polifenóis totais do extrato pelo método espectrofotométrico de Folin-Ciocalteu (FC) e do sobrenadante após precipitação com diferentes concentrações de caseína (1, 2, 4, 6, 8 e 10% m/v). Em paralelo, os ensaios foram acompanhados por cromatografia líquida de alta eficiência com detector de arranjo de diodos (CLAE-DAD) para verificar a seletividade das PAs poliméricas pela caseína. Contudo, os cromatogramas obtidos apontaram a precipitação de outros polifenóis de menor peso molecular presentes no extrato, como a catequina. Os resultados indicaram que o teor de catequina foi reduzido com eficiência semelhante à precipitação das PAs poliméricas. O teor de polifenóis totais por FC demonstrou que ao utilizar 10% (m/v) de caseína, 92,1% dos polifenóis do extrato foram precipitados. Já os dados de CLAE-DAD indicaram que a caseína complexou 95,8% das PAs poliméricas e 82% da catequina presente no extrato da semente de açaí. Em uma outra vertente do trabalho, considerando a hipótese de esterificação dos polifenóis aos açúcares da semente e outros polímeros da parede celular, foram analisadas metodologias de extração de polifenóis assistida por enzimas. Neste estudo, lipases foram selecionadas para auxiliar no processo de extração de polifenóis. A ação de lipases comerciais (Novozym 435-CALB, Novozym 735-CALA), do pool enzimático não comercial (NS40116 - LABIM/UFRJ) e de uma mananase (BGM AMANO 10) foram avaliadas. A carga enzimática foi definida em 200 U/g de semente com a comparação de rendimentos das extrações em 30 e 60 min. A perda mássica das sementes de açaí e o teor de polifenóis totais foram monitorados como resposta. Apesar de indícios na literatura sobre a efetividade da extração de polifenóis assistida por enzimas para outras matrizes vegetais, os ensaios de extração enzimática apontaram resultados inferiores aos da extração convencional, sugerindo que as PAs podem estar se ligando às enzimas e precipitando ou, simplesmente, inativando as enzimas durante o processo de extração. Para avaliar essa hipótese, futuros estudos serão realizados medindo a quantificação de fenóis em duas etapas, primeiro após extração com solvente e uma segunda extração assistida com enzimas, para investigar se a enzima auxilia na liberação de polifenóis retidos na matriz celular.

Conclusões

Desenvolver metodologias específicas para a análise de PAs é uma atividade árdua, contudo, se faz necessários uma vez que esses metabólitos possuem um potencial terapêutico significativo no combate de diversas doenças. O método de FC adaptado indicou que os polifenóis presentes no extrato da semente de açaí se complexam com a caseína com baixa seletividade para as PAs poliméricas. A extração desses polifenóis apresentam um baixo rendimento (8,8%) e, por isso, um aumento de rendimento pelo uso de enzimas pode se tornar um processo vantajoso que necessita ser estudado em mais detalhes.

Agradecimentos

CNPq, LABIM/UFRJ e Instituto Serrapilheira.

INT

Valéria Gonçalves Costa
Katharina Rodrigues Malafaia Macedo
Editoração da Publicação

Nelson Peres
Logomarca dos Programas e do ENICTI