



# Resumos de Projetos do SEMIC 2019

Ciências Exatas e da Terra

**Título do Projeto:** Determinação de elementos metálicos em saliva humana por técnicas espectrométricas de análise.

**Autores:** RAFAEL ARROMBA DE SOUSA (Orientador), MAURÍCIO DE SOUZA COSTA JUNIOR, CAROLINE DOS SANTOS BARBARA (Bolsista), FELIPE DIAS DOS REIS (Colaborador)

**Resumo:** O uso da saliva para diagnosticar doenças tem sido objeto de muitos estudos, pois trata-se de um fluido de fácil coleta, não invasiva e de fácil armazenamento. Nesse projeto foi desenvolvido um método para determinar elementos metálicos em saliva por espectrometria de absorção e de emissão atômica. O método foi aplicado no monitoramento dos teores de Na, K, Ca e Mg em mais de 100 amostras, obtidas em uma parceria com o Lemos Laboratório, além de amostras coletadas dentro da comunidade acadêmica. As amostras foram submetidas à análise direta, digestão ácida assistida por radiação micro-ondas e digestão ácida em chapa de aquecimento. Os resultados mostraram que a diluição em ácido diluído já era adequado. Comparando os resultados com os prontuários fornecidos pelos doadores não se observaram correlações entre os teores desses metais e a ocorrência de doenças como hipertensão, diabetes ou insuficiência renal. No geral, os teores das espécies variaram bastante e sugerem que a saliva não seria uma boa fonte para monitoração desses elementos.

**Título do Projeto:** Uma abordagem heurística para o DARP com Veículos Elétricos

**Autores:** LUCIANA BRUGIOLO GONCALVES (Orientador), DIEGO PAIVA E SILVA (Bolsista), STÊNIO SÃ ROSÁRIO FURTADO SOARES, LORENZA LEAO OLIVEIRA MORENO (Colaborador)

**Resumo:** Ao redor do mundo, algumas empresas realizam o transporte de pessoas com deficiências e necessidades especiais através de frotas de veículos adaptadas. Devido ao grande número de passageiros e à alta demanda, é necessário estipular um cronograma que atenda a todas as requisições dos usuários para um determinado horizonte de tempo. No DARP clássico, considera-se a frota sendo composta por veículos movidos à combustíveis fósseis, um tipo de combustível que contribui de maneira significativa com a emissão de gases poluentes. Com a crescente preocupação com aspectos ambientais e o crescente aumento da inclusão de veículos elétricos no mercado, torna-se viável projetar uma frota composta inteiramente por este novo tipo de veículo. Veículos elétricos fornecem uma redução significativa no impacto ambiental. Ao mesmo tempo em que veículos elétricos representam uma diminuição no índice de emissão de gases poluentes, eles trazem uma nova restrição relacionada a autonomia deste tipo de veículo, por isso é necessário que, durante as viagens, sejam realizadas paradas em estações para que a bateria seja recarregada e a viagem possa prosseguir. Como alternativa a recarga da bateria, há a possibilidade de se realizar a troca da bateria por uma nova completamente carregada, considerando um aumento menor no tempo de parada. Essa estratégia representa um ganho de produtividade e também reduz os custos de recarregamento. O DARP com veículos elétricos (DARP-EV) é &nbsp; - um problema NP-difícil, sendo considerado uma combinação do DARP clássico com o problema de roteamento de veículos elétricos (E-VRP). Dadas as características do DARP-EV, solucioná-lo através de métodos exatos pode ser extremamente custoso. O emprego de metaheurísticas tende a ser uma abordagem que fornece uma boa solução para o contexto do problema. Neste trabalho foi implementada a metaheurística GRASP em conjunto com o algoritmo de inserção mais barata e a metaheurística RVND, o que gerou resultados promissores à luz da comparação com resultados da literatura.

**Título do Projeto:** Uma ferramenta de apoio à engenharia de sistemas críticos

**Autores:** ANDRE LUIZ DE OLIVEIRA (Orientador), LUIS FELIPE DE ALMEIDA NASCIMENTO, CLÁUDIO NAZARETH LOPES, ANDRÉ DIAS NUNES (Bolsista)

**Resumo:** Sistemas críticos são sistemas onde falhas podem resultar em perdas econômicas, danos físicos ou ameaça a vida humana. No entanto, sistemas críticos devem atender aos requisitos de availability (disponibilidade), reliability (confiabilidade), safety (segurança) e security (proteção), esses requisitos podem ser demonstrados como atendidos utilizando técnicas e atividades de engenharia de segurança. A engenharia de segurança contém um conjunto de atividades que devem ser realizadas paralelamente às atividades de desenvolvimento, por exemplo, identificação de perigos, avaliação de riscos, alocação de requisitos de segurança. Padrões de segurança estabelecem propriedades de um sistema crítico que devem ser analisadas e demonstradas em diferentes níveis de abstração, tais propriedades podem ser demonstradas utilizando a engenharia de segurança. Entretanto, muitos desses padrões estão recomendando ou exigindo a especificação de um assurance case para obterem sua certificação. Um assurance case/safety case deve comunicar um claro, compreensível e defensível argumento de que o sistema é aceitavelmente seguro para operar em um determinado contexto. Para especificar um assurance case existem diversos tipos de notação, dentre elas as gráficas como Goal Structuring Notation (GSN) e Structured Assurance Case Metamodel (SACM). Devido à falta de ferramentas na plataforma Eclipse que suportam a especificação de assurance case de acordo com a SACM versão 2.1, neste trabalho é apresentado o desenvolvimento de um editor que fornece apoio aos engenheiros de segurança na especificação de assurance case nessa notação. A ferramenta desenvolvida tem o potencial de apoiar os engenheiros de segurança reduzindo o esforço, número de erros e o custo de especificação de assurance case.

**Título do Projeto:** Sistemas de Gamificação para diminuir a evasão em cursos de graduação

**Autores:** RODRIGO LUIS DE SOUZA DA SILVA (Orientador), THALES CASTRO MENDES (Bolsista)

**Resumo:** O uso de gamificação vem sendo explorado no contexto da educação a fim de aumentar o engajamento dos alunos e apoiar o processo de ensino e aprendizagem. Na maioria dos casos, a gamificação é aplicada a contextos menores, como o de tarefas ou disciplinas específicas. Um dos problemas dos cursos de graduação na área de Ciência Exatas é a alta taxa de evasão devido a diversos fatores distintos, o que torna sua caracterização mais complexa. No entanto, acredita-se que um dos fatores com grande impacto é a falta de motivação do aluno no curso. Dessa forma, este trabalho de iniciação científica se propõe a estudar e analisar o impacto do uso de gamificação na diminuição da evasão nos cursos de Ciências Exatas. Para isso, foi proposto um estudo com o curso de Ciência da Computação, onde os alunos utilizaram um sistema que exibe, de maneira gamificada, suas informações sobre o curso como um todo. Uma avaliação de caráter qualitativo foi proposta. Nesta avaliação calouros e veteranos utilizaram o sistema e avaliaram seu potencial no aumento do engajamento no curso. As avaliações foram positivas e a maioria dos alunos concordou que o sistema teria potencial para aumentar o engajamento entre os alunos e também concordou que recomendaria o uso aos demais colegas do curso.

**Título do Projeto:** Estudo do efeito da hidrólise da lactose e da homogeneização do leite nas características do doce de leite pastoso

**Autores:** RODRIGO STEPHANI (Orientador), CAROLINE BARROSO DOS ANJOS PINTO (Bolsista), ÍTALO TULER PERRONE, LUIZ FERNANDO CAPPAL DE OLIVEIRA, ISIS RODRIGUES TOLEDO RENHE, CAROLINA CARVALHO RAMOS VIANA (Colaborador)

**Resumo:** Produtos lácteos zero lactose têm se tornado cada vez mais recorrentes no mercado devido ao aumento nos casos de pessoas intolerantes à lactose ou para aqueles que optam por uma dieta funcional sem este açúcar. Na produção de doce de leite, a hidrólise da lactose promove algumas modificações no produto, destacando-se a intensificação da Reação de Maillard e o aumento ligeiro da viscosidade e do dulçor. Diante disso, o presente trabalho objetivou a formulação de doce de leite pastoso zero lactose para avaliar a influência da hidrólise desse açúcar e também da homogeneização do leite sobre os atributos físico-químicos, de cor, textura e sobre as características reológicas do doce. O leite fluido utilizado foi dividido em duas porções sendo em uma delas realizada a hidrólise enzimática da lactose. A homogeneização do leite foi realizada a 200 bar de pressão também em porções específicas. Assim, foram estudados 4 diferentes tratamentos realizados em triplicata, totalizando 12 produções usando o evaporador multi-monitorado. Com os resultados, conclui-se que a hidrólise da lactose influencia na textura e na cor dos produtos e que a homogeneização do leite não surte efeito considerável sobre a reologia do doce nas condições em que foi imposta. O fato dos produtos hidrolisados se caracterizarem com uma textura mais firme tem influência também da atividade de água pois a hidrólise da lactose libera mais moléculas para o meio e foi observado que os doces hidrolisados obtiveram valores de atividade de água menor. Com isso, estes produtos tinham mais moléculas e menos água disponível, conferindo a eles um aspecto mais "borrachoso". Foi observado também, pela análise do teor de açúcares, concentrações de glicose acima do esperado nos produtos hidrolisados, o que leva à conclusão de que este açúcar advém de outra fonte, além da hidrólise da lactose. Espera-se, portanto, contribuir para o entendimento da hidrólise da lactose no doce de leite com informações que podem auxiliar os laticínios no desenvolvimento deste produto com qualidade semelhante ao produto tradicional.

**Título do Projeto:** Estudo do efeito da hidrólise da lactose e da homogeneização do leite nas características do doce de leite pastoso

**Autores:** RODRIGO STEPHANI (Orientador), MAURÍCIO (Bolsista), ÍTALO TULER PERRONE, LUIZ FERNANDO CAPPA DE OLIVEIRA, ISIS RODRIGUES TOLEDO RENHE, CAROLINA CARVALHO RAMOS VIANA (Colaborador)

**Resumo:** Produtos lácteos zero lactose têm se tornado cada vez mais recorrentes no mercado devido ao aumento nos casos de pessoas intolerantes à lactose ou para aqueles que optam por uma dieta funcional sem este açúcar. Na produção de doce de leite, a hidrólise da lactose promove algumas modificações no produto, destacando-se a intensificação da Reação de Maillard e o aumento ligeiro da viscosidade e do dulçor. Diante disso, o presente trabalho objetivou a formulação de doce de leite pastoso zero lactose para avaliar a influência da hidrólise desse açúcar e também da homogeneização do leite sobre os atributos físico-químicos, de cor, textura e sobre as características reológicas do doce. O leite fluido utilizado foi dividido em duas porções sendo em uma delas realizada a hidrólise enzimática da lactose. A homogeneização do leite foi realizada a 200 bar de pressão também em porções específicas. Assim, foram estudados 4 diferentes tratamentos realizados em triplicata, totalizando 12 produções usando o evaporador multi-monitorado. Com os resultados, conclui-se que a hidrólise da lactose influencia na textura e na cor dos produtos e que a homogeneização do leite não surte efeito considerável sobre a reologia do doce nas condições em que foi imposta. O fato dos produtos hidrolisados se caracterizarem com uma textura mais firme tem influência também da atividade de água pois a hidrólise da lactose libera mais moléculas para o meio e foi observado que os doces hidrolisados obtiveram valores de atividade de água menor. Com isso, estes produtos tinham mais moléculas e menos água disponível, conferindo a eles um aspecto mais "borrachoso". Foi observado também, pela análise do teor de açúcares, concentrações de glicose acima do esperado nos produtos hidrolisados, o que leva a conclusão de que este açúcar advém de outra fonte, além da hidrólise da lactose. Espera-se, portanto, contribuir para o entendimento da hidrólise da lactose no doce de leite com informações que podem auxiliar os laticínios no desenvolvimento deste produto com qualidade semelhante ao produto tradicional.

**Título do Projeto:** Análise de Algoritmos de Otimização

**Autores:** SANDRO RODRIGUES MAZORCHE (Orientador), FELIPE TOLEDO FERREIRA, BRUNO MOREIRA FERNANDES (Bolsista)

**Resumo:** Análise de Algoritmos de Otimização, é focado na análise de técnicas e funcionalidades que diferenciem cada qual algoritmo, a fim de podermos entender seu funcionamento, e aplicá-los em modelos que mais se adequam às suas estruturas e, possivelmente, planejarmos adaptações a estes algoritmos. Atualmente, estamos estudando o Algoritmo de Ponto Interior e Direções Viáveis (FDIPA), proposto por José Herskovits. O FDIPA é um algoritmo de pontos interiores que usa uma direção de busca com a propriedade de ser uma direção de descida para a função potencial, e direção viável para o conjunto de pontos viáveis do problema. O método se baseia em uma iteração de Newton no sistema de Karush-Kuhn-Tucker (KKT) de primeira ordem, porém realiza a busca linear somente na variável primal do problema. Uma característica marcante deste algoritmo é a matriz  $B$ , a qual podemos atribuir substituições de forma a facilitar a parte manual dos problemas, qual seria a programação, e melhorar o desempenho do algoritmo computacionalmente. Ao testarmos estas hipóteses, nosso intuito é ganharmos uma base para aplicações mais complexas e computacionalmente custosas adiante.



**Título do Projeto:** Desenvolvimento de substratos condutores, transparentes e flexíveis em OLEDs

**Autores:** CRISTIANO LEGNANI (Orientador), PAULA GOMES PEREIRA (Bolsista), THALES ALVES FARACO (Colaborador)

**Resumo:** Um diodo orgânico emissor de luz (OLED) possui diversas camadas que o compõem, dentre elas há uma específica com a função de injetar portadores e ainda ser transparente para que a luz possa ser emitida. Nesse estudo, foi utilizado um filme de óxido de índio dopado com estanho, que possui características de um condutor e ainda apresentar alta transmitância ótica no visível. Neste trabalho estudamos a influencia dos parâmetros de deposição nas características elétricas e óticas dos filmes, a fim de obter os melhores parâmetros para o seu uso em OLEDs, e observar uma possível relação entre todas as propriedades e como isso influencia no desempenho do material. Para a deposição dos filmes de ITO, foi utilizado o processo de deposição por sputtering (bombardeamento catódico) para a produção de uma fina e transparente camada depositada sobre um substrato. Esse processo é o mais indicado nesses casos, pois possibilita uma deposição uniforme, além de não ter um grande índice de desperdício do alvo de ITO comparado aos demais métodos existentes. Após a deposição, é feita a coleta dos dados em um sistema de caracterização elétrica. Desta forma, podemos obter as propriedades elétricas, tais como resistência, resistividade, concentração de carga e mobilidade dos portadores. Com os dados obtidos, é observável que a concentração de carga aumenta à medida que se torna mais espessa a camada do filme, e a resistividade e a resistência de folha diminuem. Para o intuito de aplicação em OLEDs, deve-se produzir filmes com a menor resistividade, pois assim eles serão melhores condutores.

**Título do Projeto:** Inferência em modelos lineares generalizados semiparamétricos

**Autores:** CLECIO DA SILVA FERREIRA (Orientador), HIGOR DA CRUZ NEVES (Bolsista)

**Resumo:** Modelos lineares parciais ou modelos semi-paramétricos (PLM) tem recebido especial atenção nos últimos anos, em áreas como modelagem econômica e dados biométricos, sendo considerados uma generalização dos modelos lineares por incluir uma componente não-paramétrica ao modelo linear. Atualmente, a maioria dos dados apresentam tanto variáveis explicativas que se comportam de forma linear e não linear com a variável resposta, o que demonstra a importância de se trabalhar com modelos semiparamétricos. Os modelos lineares generalizados (MLG) ampliam as opções de distribuições que a variável resposta pode assumir. Por isso neste trabalho procuramos uma forma de estender um MLG para um modelo semiparamétrico e trabalhamos na estimação de seus componentes lineares e não-paramétricos, através de um processo iterativo, com o auxílio do software estatístico R. Desenvolvemos o algoritmo para o cálculo das estimações e são feitas simulações para o aferimento da qualidade do ajuste dos modelos de regressão.

**Título do Projeto:** Métodos de Seleção de Modelos de Regressão com Aplicações em Grandes Bases de Dados

**Autores:** CLECIO DA SILVA FERREIRA (Orientador), ISABELA LOPES PENNA (Bolsista)

**Resumo:** Um dos grandes desafios atualmente é lidar com grandes bases de dados. Essas grandes bases de dados, que também são chamadas de Big Data, podem possuir uma enorme quantidade de observações e de variáveis. Essas variáveis são características de um determinado fenômeno, dentro de um banco de dados temos variáveis que podem ser explicativas e variáveis que podem ser respostas. Muitas das vezes se faz necessário reduzir o número dessas variáveis explicativas para sanar alguns problemas, como multicolinearidade, custo computacional, entre outros. Nesse projeto foram estudados os diferentes métodos de seleção em modelos lineares, como métodos de regularização e métodos de redução de dimensionalidade. Dentro dos métodos de regularização foram estudados dois métodos: Regressão Ridge e LASSO. Dentro dos métodos de redução de dimensionalidade foi estudado um método: Mínimos Quadrados Parciais. Após estudar cada método, eles foram aplicados em grandes bases de dados, para analisar suas performances. Foi utilizado o software R para fazer as aplicações.

**Título do Projeto:** ESTUDO SOBRE AS ANOMALIAS PLUVIOMÉTRICAS EM JUIZ DE FORA UTILIZANDO O ÍNDICE DE ANOMALIAS DE CHUVA (IAC)

**Autores:** FABIO DE OLIVEIRA SANCHES (Orientador), PÂMELA MARTINS CARVALHO, CAMILA DE MORAES GOMES TAVARES (Bolsista)

**Resumo:** A discussão a respeito das mudanças climáticas globais tem crescido no meio científico nas últimas décadas. O presente trabalho objetiva estudar o comportamento das precipitações no município de Juiz de Fora (1910- 2017), a partir da aplicação do Índice de Anomalias de Chuvas (IAC) e verificar se a climatologia das chuvas apresentam correlação com a dinâmica dos fenômenos ENOS e ODP. Foram utilizados dados pluviométricos mensais, trimestrais e anuais, nos quais foram aplicados os parâmetros do IAC. Os resultados foram comparados com os dados de monitoramento do fenômeno ENOS e da ODP. Pôde-se considerar que a variabilidade das chuvas no município de Juiz de Fora e região não são moduladas pela anomalia de Temperatura de Superfície do Oceano Pacífico que resulta no fenômeno ENOS e, em maior escala de tempo, a ODP. Nas análises comparativas entre ENOS, ODP e IAC pôde-se avaliar a relação entre ENOS e ODP, mas sem ser possível, verificar a correspondência entre ambos fenômenos e os valores extremos (seca e chuva) do IAC. O IAC revelou que a quantidade de anos entre muito seco e extremante seco, muito úmido e extremamente úmido mantiveram-se iguais (20 anos muito secos e extremamente secos e 20 anos muito úmidos e extremamente úmidos). Assim, é necessário entender as demais anomalias que podem influenciar a variabilidade das chuvas locais/reionais e, assim, modulá-la. Portanto, um caminho a ser seguido é o de avaliar a relação das chuvas com a anomalias de temperatura de superfície do mar do Oceano Atlântico e, assim, fazer porte de informações necessárias para tomadas de decisões futuras evitando, portanto, prejuízos à sociedade referentes aos efeitos das chuvas.

**Título do Projeto:** PADRÕES DE OCUPAÇÃO DO SOLO E OS MICROCLIMAS URBANOS: CORRELAÇÕES E PROPOSTAS DE INDICADORES AMBIENTAIS PARA A CIDADE DE JUIZ DE FORA-MG

**Autores:** CASSIA DE CASTRO MARTINS FERREIRA (Orientador), THIAGO ALVES DE OLIVEIRA, MICHAELA CAMPOS E SILVA. VICTOR SAMUEL BERNARDES DE PAULA (Bolsista)

**Resumo:** O trabalho mostra a aplicação de uma metodologia analítica aplicada ao estudo de clima urbano, baseada em Ferreira (2014). Foram utilizados camadas de informação espacial (altitude, declividade, cobertura vegetal, hidrografia, massa construída, altura das edificações, impermeabilidade e permeabilidade do solo), medições climáticas e conhecimento do clima urbano para avaliar e mapear o potencial térmico em três regiões urbanas da cidade de Juiz de Fora-MG, visando identificar diferentes campos térmicos. O resultado da aplicação desta metodologia converge com os dados experimentais e evidencia os efeitos do uso da terra, dos materiais construtivos e do fluxo de pessoas e mercadorias na definição de diferentes campos térmicos. Mostra que a distribuição e o tamanho da cobertura vegetal, além da amplitude da ventilação, interferem e proporcionam ambientes mais frescos e, portanto, reduzem o armazenamento de calor. A metodologia apresentada pode ser adaptada para outras áreas urbanas com características semelhantes às de Juiz de Fora-MG.

**Título do Projeto:** Aprendizagem de Máquina para minerar a base de Cota Parlamentar dos Deputados

**Autores:** LUCIANA CONCEICAO DIAS CAMPOS (Orientador), LETÍCIA FLORENTINO PIRES (Bolsista)

**Resumo:** No projeto Aplicação de técnicas de Análise de Dados e Aprendizagem de Máquina para encontrar padrões e extrair informações da base de Cota Parlamentar dos Deputados. Utilizou-se a base de dados do Kaggle, <https://www.kaggle.com/epattaro/brazils-house-of-deputies-reimbursements>, que contém os gastos dos parlamentares da Câmara Federal de 2009 a 2017. Nele fez-se o uso extensivo de técnicas de manipulação de dados da biblioteca Pandas e Numpy na linguagem Python, como groupby, aggregate, apply, máscara, entre outros. Além disso, testamos muitos métodos de Aprendizagem de Máquina, como SVM(único citado no vídeo por questões de tempo), Random Forest, Gradient Boosting, Adam, Decision Trees, Naive Bayes, bem como técnicas de aprendizado não-supervisionado como KMeans, DBSCAN, OPTICS, entre outros. Além disso, usamos métricas de avaliação como Acurácia, Precisão, Recall, F1 Score, curva ROC. Na fase final, pudemos desenvolver um app em Android para facilitar a leitura das informações por parte de todos os tipos de pessoas. Houve a participação do desenvolvimento do artigo de previsão de vazão para séries temporais do rio Paraíba do Sul, em que utilizamos deep learning, especificamente LSTM, e confrontamos com a técnica bem consolidada na área, ARIMA, e obtivemos ótimos resultados.

**Título do Projeto:** Previsão da Vazão na bacia do Rio Paraíba do Sul Com Deep Learning

**Autores:** LUCIANA CONCEICAO DIAS CAMPOS (Orientador), GABRIEL DIAS DE ABREU (Bolsista)

**Resumo:** Os modelos de deep learning vem se destacando em diversas tarefas, com isso, o nosso trabalho procurou aplicar o modelo LSTM, que é um modelo recorrente de deep learning adequado para tarefas sequenciais. Para demonstrar a aplicação do LSTM no escopo de previsão de vazão no rio Paraíba do Sul, utilizamos algumas técnicas de otimização de hiperparâmetros usando metaheurísticas, random sampling. Com esses testes exaustivos e diversas otimizações conseguimos alcançar o modelo que mostrou a melhor performance do LSTM em relação aos modelos da família ARIMA que são os modelos mais consolidados na literatura para a previsão de vazão. O experimentos conduzido comparou a média de 30 execuções do LSTM em quatro estações de medição de vazão com técnicas de validação cruzada para séries temporais, demonstrando ao fim que o LSTM é uma alternativa viável para previsão de séries temporais de vazão. Ao fim, conseguimos um modelo para prever a vazão na bacia do Rio Paraíba do Sul, que se mostrou superior ao modelo clássico ARIMA.

**Título do Projeto:** Impactos ambientais do rompimento de barragens: REÚNE AMBIENTAL

**Autores:** OTAVIO EURICO DE AQUINO BRANCO (Orientador), MARIA CLARA PEREIRA DOS SANTOS(Bolsista), IGOR WEISS DE SOUZA, LUIZ EVARISTO DIAS DE PAIVA, HIGOR FUGUEIREDO RIBEIRO (Colaborador)

**Resumo:** No dia 05/11/2015 o dique de Fundão (barragem de rejeitos) localizado no município de Mariana-MG, rompeu-se, causando desastre socioambiental sem precedentes na história do Brasil e do mundo. De acordo com o Governo de Minas Gerais, o rompimento da barragem deu vazão a mais de 55 milhões de metros cúbicos de rejeitos do processo de beneficiamento do minério de ferro. Após três anos do acontecimento em Mariana/MG o Brasil presenciou mais um trágico rompimento de barragem. No dia 25/01/2019, o rompimento da barragem localizada no ribeirão Ferro-Carvão, na região de Córrego do Feijão, no município brasileiro de Brumadinho em Minas Gerais. O rompimento da barragem liberou cerca de 12 milhões de metros cúbicos de rejeitos em direção ao rio Paraopeba. Nesse sentido, o estudo em questão objetivou inicialmente conhecer os reais danos causados pelo rompimento do dique de Fundão e contribuir para os estudos futuros de diagnóstico e prognóstico referentes aos impactos provocados por esse rompimento. É importante salientar que o estudo em questão foi planejado para ser executado em etapas, na qual a primeira (2017/2018) constituiu-se no levantamento de dados de qualidade ambiental (secundários) em diversos estudos realizados na bacia do Rio Doce. Esse levantamento permitiu a formatação de um banco de dados socioambientais da região afetada pelo rompimento da barragem de Fundão, englobando todos os relatórios feitos por órgãos e instituições, ressaltando que alguns desses relatórios foram geoprocessados pela equipe do projeto. A segunda etapa, realizada no período 2018/2019, elaborou análises estatísticas dos dados compilados anteriormente, focando principalmente em Governador Valadares, onde a UFJF tem campus. Esse projeto de IC contempla os dados de qualidade das águas superficiais das duas regiões impactadas. Adicionalmente, observou-se a oportunidade de expandir as pesquisas, trazendo ao público ferramenta de fácil acesso às informações geradas sobre o rompimento e sensibilização dos impactos ambientais negativos decorrentes de grandes tragédias. Criou-se, então, uma plataforma (site), intitulado Reúne Ambiental, no qual disponibilizam-se informações da qualidade ambiental da área afetada pelos dois rompimentos de barragem. O objetivo do site é entregar para a sociedade uma reunião de informações de forma didática, dinâmica, completa e interdisciplinar, com potencial para absorver dados e informações de outras barragens, e assim evidenciar a importância da gestão comprometida da segurança de barragens. É importante ressaltar a diretriz de trabalho desse projeto que potencializa parcerias com núcleos de pesquisas objetivando reunir dados sobre desastres ambientais e informações sobre segurança de barragens. Destaca-se finalmente que o desenvolvimento dessa pesquisa permitiu sensibilizar a equipe executora na proposição de projetos de extensão, contemplando a segurança de barragens na área de influência dos dois campi da UFJF.



**Título do Projeto:** Expansão Acelerada do Universo e Singularidades Big Rip

**Autores:** GIL DE OLIVEIRA NETO (Orientador), VINÍCIUS GUILHERME OLIVEIRA, CARLOS ROBERTO DE MELO CARNEIRO (Bolsista)

**Resumo:** Nesse projeto estaremos interessados em introduzir os bolsistas na grande área de Cosmologia teórica. Como motivação para este estudo, apresentaremos aos bolsistas um tópico bastante moderno de investigação científica em Cosmologia. Esse tópico é o surgimento da singularidade Big Rip no estágio final da evolução do Universo, devido a presente expansão acelerada do nosso Universo. Para isso, depois de um período inicial aonde os bolsistas farão um estudo aprofundado dos principais tópicos em Cosmologia, apresentaremos para eles alguns modelos cosmológicos em que os conteúdos materiais presentes visam descrever a energia escura com a propriedade de fluido fantasma ( $w < -1$ ). Estudaremos, principalmente, modelos cosmológicos em que os conteúdos materiais que visam descrever o fluido fantasma serão representados por um fluido perfeito com a equação de estado apropriada e o gás de Chaplygin generalizado. Nesses modelos estudaremos em detalhes as condições que levam ao surgimento da singularidade Big Rip.

**Título do Projeto:** MODELAGEM MATEMÁTICA E LIVRO DIDÁTICO DE MATEMÁTICA: ANÁLISES DE PROPOSTAS PEDAGÓGICAS

**Autores:** MARCO AURELIO KISTEMANN JUNIOR (Orientador), CHIRLEY SPECIAN SIMÃO DE OLIVEIRA (Bolsista)

**Resumo:** A presente investigação teve como região de inquérito a Educação Matemática. Nesse contexto, a temática foi a Modelagem Matemática e a análise de três coleções didáticas de Matemática (Ensino Fundamental) avaliadas pelo Programa Nacional do Livro Didático (PNLD). Os procedimentos metodológicos foram análises bibliográficas e estudos documentais de livros e artigos científicos, bem como estudo das propostas de ensino e de aprendizagem presentes na Base Nacional Comum Curricular (BNCC). Os resultados da pesquisa apontaram que as obras analisadas e que são mais utilizadas nas salas de aula de Matemática para aprendizagem matemática ainda oferecem em sua maioria poucos cenários para a investigação discente, com raros cenários para investigação como proposto por Ole Skovsmose, e com pouquíssimos ambientes para modelagem de problemas envolvendo Matemática e áreas afins. Tal resultado reforça ainda o engessamento das propostas didáticas presentes nas coleções aprovadas no PNLD e reifica a repetição de exercícios sem vínculos com a realidade vivenciada pelos estudantes. Tal fato é denominado de reificação do paradigma do exercício, ou seja, paradigma que faz com que os estudantes repitam algoritmos sem saber os porquês matemáticos.

**Título do Projeto:** EDUCAÇÃO FINANCEIRA NA EDUCAÇÃO DE JOVENS E ADULTOS (EJA)

**Autores:** MARCO AURELIO KISTEMANN JUNIOR (Orientador), DAVI EDUARDO FIUZA ABRAS DE MELO, IDCLEIRE SALLES BARBIERI DE OLIVEIRA (Bolsista)

**Resumo:** O presente projeto busca apresentar as ações de dois pesquisadores com a temática de Educação Financeira com jovens e Adultos. Foi realizados no Grupo Semente com cerca de 40 sujeitos de pesquisa com idades de 50 a 90 anos. O local da pesquisa é uma instituições sem fins lucrativos que atende jovens e adultos em ações sociais. Nesse sentido, por perceber que muitos adultos e jovens vem se endividando cada vez mais cedo, constituimos ações para orientar esses sujeitos. As ações da pesquisas foram relevantes pois por meio de observação participante, questionários e rodas de conversa com os sujeitos de pesquisa percebemos que muitos são induzidos a se endividar pois são constantemente assediados por instituições financeiras como bancos e financeiras de crédito para contratação de empréstimos, em geral desnecessários, mas de fácil aquisição. Tais empréstimos denominados de consignados, possuem taxas mais baixas de juros, porém correm todo a renda dos sujeitos investigados. Embasamo-nos em pesquisas do grupo Pesquisa de Ponta (UFJF) que já vem desde 2001 investigando o comportamento do consumidor e tomadas de decisão na sociedade líquido-moderna. Foram propostas atividades de conscientização e investigação para instruir os sujeitos a organizarem-se financeiramente, estruturarem seu orçamento doméstico e tornarem-se multiplicadores das ideias problematizadas em suas famílias e nos seus grupos sociais. Todas as ações foram embasadas na Estratégia Nacional de Educação Financeira (ENEF).

**Título do Projeto:** AMPLIAÇÃO DA BASE DOS MODELOS DE EQUIPAMENTOS DE SISTEMAS ELÉTRICOS DE POTÊNCIA PARA REPRESENTAÇÃO DE LIMITES E CONTROLES NO PROBLEMA DE FLUXO DE CARGA E SIMULAÇÃO QUASE-ESTÁTICA NA PLATAFORMA MODELICA

**Autores:** RICARDO MOTA HENRIQUES (Orientador), PÂMELA LACERDA PEREIRA TAVEIRA (Bolsista), MARCELO AROCA TOMIM (Colaborador)

**Resumo:** O presente trabalho tem como objetivo a continuação do desenvolvimento de modelos de equipamentos presentes em Sistemas Elétricos de Potência para simulação de sistemas de médio e grande porte utilizando a linguagem Modelica. Diante da inviabilidade de simular sistemas maiores conectando todos os componentes de um Sistema de Potência e passando seus parâmetros de forma manual, foi criado um código utilizando a linguagem Python com a finalidade de ler a configuração e os dados do Sistema de Potência e escrever um código desse sistema no formato Modelica. É importante lembrar que o arquivo de dados é o mesmo utilizado pelo programa ANAREDE. Nesse trabalho foi desenvolvido um sistema de transmissão em corrente contínua que interliga dois sistemas de corrente alternada, o qual é chamado de elo de corrente contínua. Os elos CC são representados através dos seguintes elementos: barra CC, linha CC e conversor CA/CC. A barra CC conecta um ou mais conversores a uma linha CC ou a um eletrodo de terra, sendo neste caso denominada barra neutra. A linha de transmissão CC é representada por uma resistência pura e conecta duas barras CC. O conversor, que pode ser retificador ou inversor, conecta a barra CA de interface à linha CC e ao eletrodo de terra e nele atuam os controles do elo CC. Os dados simulados no Modelica foram comparados com os resultados do ANAREDE, mostrando-se condizentes. O Modelica, mesmo sendo voltado para simulações dinâmicas no tempo, mostrou-se eficaz na simulação de regime permanente apresentada, com a vantagem de ser gratuito e possuir uma linguagem de programação relativamente simples.

**Título do Projeto:** REUNIÃO DE INFORMAÇÕES SOBRE IMPACTOS AMBIENTAIS DECORRENTES DO ROMPIMENTO DE BARRAGENS: A PLATAFORMA REÚNE AMBIENTAL

**Autores:** LUIZ EVARISTO DIAS DE PAIVA (Orientador), HIGOR FIGUEIREDO RIBEIRO (Bolsista), MARIA CLARA PEREIRA DOS SANTOS, OTÁVIO EURICO DE AQUINO BRANCO (Colaborador)

**Resumo:** No dia 05/11/2015 o dique de Fundão (barragem de rejeitos) localizado no município de Mariana-MG, rompeu-se, causando desastre socioambiental sem precedentes na história do Brasil e do mundo. De acordo com o Governo de Minas Gerais, o rompimento da barragem deu vazão a mais de 55 milhões de metros cúbicos de rejeitos do processo de beneficiamento do minério de ferro. Após três anos do acontecimento em Mariana/MG o Brasil presenciou mais um trágico rompimento de barragem. No dia 25/01/2019, o rompimento da barragem localizada no ribeirão Ferro-Carvão, na região de Córrego do Feijão, no município brasileiro de Brumadinho em Minas Gerais. O rompimento da barragem liberou cerca de 12 milhões de metros cúbicos de rejeitos em direção ao rio Paraopeba. Nesse sentido, o estudo em questão objetivou inicialmente conhecer os reais danos causados pelo rompimento do dique de Fundão e contribuir para os estudos futuros de diagnóstico e prognóstico referentes aos impactos provocados por esse rompimento. É importante salientar que o estudo em questão foi planejado para ser executado em etapas, na qual a primeira (2017/2018) constituiu-se no levantamento de dados de qualidade ambiental (secundários) em diversos estudos realizados na bacia do Rio Doce. Esse levantamento permitiu a formatação de um banco de dados socioambientais da região afetada pelo rompimento da barragem de Fundão, englobando todos os relatórios feitos por órgãos e instituições, ressaltando que alguns desses relatórios foram geoprocessados pela equipe do projeto. A segunda etapa, realizada no período 2018/2019, elaborou análises estatísticas dos dados compilados na primeira etapa do projeto (2017/2018), focando principalmente em Governador Valadares, onde a UFJF tem campus. Esse projeto de IC contempla os dados referente ao transporte sedimentos das duas regiões impactadas. Adicionalmente, observou-se a oportunidade de expandir as pesquisas, trazendo ao público ferramenta de fácil acesso às informações geradas sobre o rompimento e sensibilização dos impactos ambientais negativos decorrentes de grandes tragédias. Criou-se, então, uma plataforma (site), intitulado Reúne Ambiental, no qual disponibilizam-se informações da qualidade ambiental da área afetada pelos dois rompimentos de barragem. O objetivo do site é entregar para a sociedade uma reunião de informações de forma didática, dinâmica, completa e interdisciplinar, com potencial para absorver dados e informações de outras barragens, e assim evidenciar a importância da gestão comprometida da segurança de barragens. É importante ressaltar a diretriz de trabalho desse projeto que potencializa parcerias com núcleos de pesquisas objetivando reunir dados sobre desastres ambientais e informações sobre segurança de barragens. Destaca-se finalmente que o desenvolvimento dessa pesquisa permitiu motivar a equipe executora na proposição de projetos de extensão, contemplando a segurança de barragens na área de influência dos dois campi da UFJF.

**Título do Projeto:** Produção e caracterização de leite em pó de búfala tradicional e com hidrólise da lactose

**Autores:** LUIZ FERNANDO CAPPAL DE OLIVEIRA (Orientador), IGOR LIMA DE PAULA (Bolsista), RODRIGO STEPHANI (Colaborador)

**Resumo:** Com o grande aumento dos números de pessoas com algum tipo de alergia as proteínas encontradas no leite de vaca (principal leite usado no Brasil e no mundo), o estudo de leite de outras espécies se torna extremamente importante para a indústria de forma geral. Atrelado a isso, grande parte da população mundial passou a desenvolver algum grau de intolerância a lactose, principal açúcar encontrado em leites e derivados. Com isso o objetivo desse trabalho consiste na produção e caracterização de leite em pó de búfala, com e sem hidrólise da lactose, com a finalidade de estudar as propriedades físico-químicas e microestruturais desse produto, visando atender a demanda de mercado e podendo gerar assim um novo produto para o mercado interno. Tais análises foram efetuadas através de dados de microscopia eletrônica de varredura (MEV) e de espectroscopia Raman, visando buscar uma inter-relação entre estrutura e espectroscopia dos materiais obtidos.

**Título do Projeto:** COLISÕES COM TROCA DE CARGA DE  $\text{Li}^+$  COM VÁRIOS GASES.

**Autores:** WILSON DE SOUZA MELO (Orientador), LEONARDO NOGUEIRA PUCETTI, PEDRO AUGUSTO CHAGAS DE ARAÚJO(Bolsista)

**Resumo:** O objetivo deste projeto é dar sequência a implantação de uma linha de pesquisa em Colisões Atômicas e Física de Superfície no Departamento de Física da Universidade Federal de Juiz de Fora. A implantação desta linha está calcada em primeira ordem na construção de um equipamento destinado a acelerar os projéteis que irão colidir com alvos gasosos ou sólidos. Está em fase avançada a construção de um acelerador de baixa energia (até 30 keV) destinado a acelerar íons pesados. Está sendo utilizada uma fonte termiônica de íons alcalinos. Este tipo de fonte notabiliza-se pela produção de feixes de íons livres de estados metaestáveis, não necessitar de alimentação gasosa, por ser compacta e por produzir uma alta corrente de íons alcalinos simplesmente ionizados. O trabalho está centrado inicialmente na extração, aceleração e análise em carga e momento de feixes de Li, podendo-se depois trabalhar com feixes de outros elementos. No estágio que se encontra a construção do acelerador está se trabalhando para incluir na linha um trocador de carga (?stripper?) com o intuito de se obter íons de Li com diferentes estados de carga. Estão sendo projetadas e produzidas na oficina do Departamento de Física as peças necessárias para esta inclusão. Com a inserção do trocador de carga será possível obter medidas de seções de choque de captura simples e formação de  $\text{Li}^-$  em diferentes alvos com o intuito de verificar a possibilidade de se obter feixes neutros e negativos.

**Título do Projeto:** Desenvolvimento de Espectroscopias intensificadas por plasmon de superfície para diagnóstico in vitro

**Autores:** GUSTAVO FERNANDES SOUZA ANDRADE (Orientador), KLEBER DE SOUZA SILVA (Bolsista), PATRÍCIA BARROS SANTOS (Colaborador)

**Resumo:** Os catalizadores sintetizados foram caracterizados satisfatoriamente, dentro do proposto com as técnicas de UV-VIS e Raman, sendo que as duas metodologias apresentadas levaram a formação de catalizadores plasmônicos. O processo sintético da metodologia 2 foi realizado após um processo de busca por de otimização da metodologia 1. Com os catalizadores sintetizados pode-se realizar a fotodegradação em dois corantes e determinar se o corante se degradou ou não. Nada pode se afirmar comparativamente entre os catalizadores sintetizados nas duas diferentes metodologias, isto porque foram empregados em corantes distintos. Os catalizadores sintetizados pela metodologia 2 proporcionaram a degradação do corante cristal violeta sob luz visível. Os resultados obtidos pelo gráfico da razão de  $A/A_0$  em função do tempo demonstraram com clareza as alterações dos sistemas analisados. Os catalizadores plasmônicos foram mais eficientes que o pentóxido de níbio comercial na degradação do corante cristal violeta, principalmente quando considerado o ponto em 840 minutos, tempo no qual as diferenças de intensidades da banda de referência em 582 nm foram pronunciáveis. Para corroborar este resultado foi determinado a constantes de velocidade das reações, dando mais visibilidade a importância da adição de nanomateriais. Por fim este trabalho pode cumprir o seu principal o objetivo, de degradar um corante com a incidência de luz na região do visível.



**Título do Projeto:** Síntese e caracterização de novos complexos de metais da primeira série de transição contendo o íon croconato e ligantes nitrogenados

**Autores:** LUIZ FERNANDO CAPPA DE OLIVEIRA (Orientador), HELDER DE SOUZA (Bolsista)

**Resumo:** Este projeto teve como objetivo o planejamento e a síntese, a caracterização espectroscópica e a determinação estrutural via difração de raios x por monocristal de novos compostos supramoleculares, buscando o entendimento da química desses sistemas, suas características estruturais e macroestruturais, dos ligantes polidentados e nitrogenados, as especificidades da ligação metal ligante e também da influência dos solventes coordenantes e na análise da viabilidade de aplicação de tais sistemas. Na primeira etapa do projeto as metas foram definir a estratégia de síntese dos compostos de interesse, a pesquisa dos ligantes necessários e o entendimento das propriedades físico-químicas dos ligantes oxocarbônicos e nitrogenados, seus modos de coordenação, sua atuação como grupos espaçadores e/ou blocos construtores nos complexos metálicos, a fim de obter novos complexos, envolvendo os sais de metal da primeira série de transição - Cobre, zinco, níquel, cobalto, manganês, elucidar a estrutura molecular e compreender a natureza das interações responsáveis pela manutenção das estruturas supramoleculares. Na segunda etapa, os complexos obtidos foram caracterizados através de técnicas espectroscópicas, que auxiliaram no controle de obtenção dos materiais, possibilitando a confirmação rápida e precisa das coordenações, além de possibilitarem a compreensão dos modos de coordenação dos ligantes presentes nas estruturas, a relação entre estrutura supramolecular e espectro vibracional. Após a caracterização, as estruturas foram determinadas através de difração de raio x, revelando estruturas e geometrias distintas ao modificar o íon metálico e revelando a formação de interações supramoleculares através de ligações de hidrogênio e interações por empacotamento p ao longo do arranjo supramolecular.

**Título do Projeto:** Espectroscopia Raman de sais de íons rodizonato com metais de transição

**Autores:** LUIZ FERNANDO CAPPA DE OLIVEIRA (Orientador), MIKE DE OLIVEIRA PIRES (Bolsista)

**Resumo:** A Química Supramolecular tem se tornado uma área de pesquisa cada vez mais desenvolvida ao longo dos últimos anos, visando melhorar a compreensão da interface entre química, física e biologia. Temos como um dos objetivos principais do estudo em química supramolecular a síntese de materiais funcionais planejados a priori, tais como catalisadores, dispositivos magnéticos e materiais utilizados em reconhecimento molecular, como sondas espectroscópicas. Para além da química covalente "clássica", esta nova abordagem busca elucidar o entendimento de sistemas complexos em que os compostos não interagem entre si somente por ligações covalentes, mas por interações intermoleculares diversas. O objetivo geral do projeto é o desenvolvimento de pesquisas em áreas estratégicas das ciências aplicadas, tais como a química supramolecular e sistemas nanoestruturados, desenvolvendo o amplo uso de técnicas espectroscópicas capazes de monitorar as propriedades desses sistemas. O objetivo específico é o planejamento, a síntese e a caracterização espectroscópica de compostos supramoleculares, contemplando sistemas de interesse científico e tecnológico. Neste trabalho desenvolvemos um estudo sistemático das propriedades espectroscópicas e cristalográficas de sais do íon rodizonato ( $C_6O_6^{2-}$ ), da família dos oxocarbonos, mais especificamente os sais de íons de metais de transição da primeira série, ainda pouco investigadas na literatura, que geram estruturas supramoleculares. A síntese do composto objeto de estudo foi feita de acordo com as diretrizes da literatura. Os dados de espectroscopia obtidos dos compostos de rodizonato indicam um abaixamento da simetria do íon, com mudanças nos espectros Raman tanto no número de bandas como nas intensidades, indicando assim claramente não apenas a coordenação, mas também o abaixamento esperado da simetria do íon.

**Título do Projeto:** Preparação e automontagem em suspensão de nanobastões de Au para aplicação como substratos SERS de alto desempenho

**Autores:** GUSTAVO FERNANDES SOUZA ANDRADE (Orientador), HUDSON BATISTA DA SILVA, JOÃO MARCOS BERALDO CANDIDO (Bolsista)

**Resumo:** (1) A Espectroscopia Raman amplificada por superfície frequentemente abreviada na literatura para SERS é uma técnica sensível de superfície que resulta na ampliação do espalhamento Raman por adsorção de moléculas sobre superfícies metálicas rugosas de Ag, Au ou Cu. Azo-compostos são compostos aromáticos que apresentam um ou mais grupos azo (-N=N-) em sua estrutura. Os azo-compostos que conferem cor são denominados azo-corantes. Eles possuem um comportamento tautomérico azo-hidrazo. O objetivo do presente trabalho foi obter mais informações sobre o comportamento tautomérico dos azo-corantes Sudan1, Sudan2 e Sudan Red G, em meio ácido e em meio neutro através da adsorção dos mesmos em nanopartículas de prata (AgNP), na região espectral 633 nm, utilizando a técnica SERS e também utilizados cálculos computacionais para atribuição das bandas. Verificou-se que a forma azo predomina na superfície das AgNP em meio ácido. Por outro lado, os resultados em meio neutro não foram conclusivos. Os resultados computacionais poderão auxiliar nas conclusões a ser obtidas nos próximos passos. (2) A metodologia SHINERS surgiu com a finalidade de aumentar a estabilidade de nanopartículas metálicas para o SERS. A síntese de nanopartículas de ouro foi realizada de acordo com a metodologia descrita por Frens - após isso a preparação, o pH da suspensão coloidal foi ajustado antes para 9,5 e as nanopartículas foram recobertas com óxido de manganês., pPara cada espessura foi utilizado um diferentes volumes característico de soluções de  $KMnO_4$  e  $Na_2C_2O_4$ , e o pH dessa solução foi ajustado antes para aproximadamente 9,5. A caracterização foi feita utilizando UV-vis VIS e microscopia eletrônica de varredura. Para o SHINERS e o SHINEF foi utilizado a molécula-prova IR-820, e linha laser em 633 nm e 785 nm, respectivamente. Verificamos que o recobrimento de nanopartículas de ouro com óxido de manganês confere maior estabilidade temporal. O recobrimento foi efetivo sendo comprovado por microscopia eletrônica de transmissão por varredura. Além disso, foi possível obter espectros SHINERS com boa intensidade e um ótimo fator de intensificação para o SHINEF.

**Título do Projeto:** Proteção de nanopartículas de Au e Ag e avaliação do desempenho SERS e SEF para o desenvolvimento de sensores de alto desempenho

**Autores:** GUSTAVO FERNANDES SOUZA ANDRADE (Orientador), RAFAELA DA ROCHA LINHARES TOSTES, NAIANE APARECIDA GUILHERME, PAULO HENRIQUE DE MELO TOLEDO (Bolsista), LINUS PAULING DE FARIA PEIXOTO, FLÁVIA CAMPOS MARQUES (Colaborador)

**Resumo:** Vários tipos de substratos são empregados para o efeito de espalhamento Raman intensificado por superfície (SERS), tal efeito baseia-se na intensificação do espalhamento Raman em presença de nanoestruturas de metais plasmônicos (Au, Ag e Cu). Uma propriedade interessante empregada nesse trabalho é a ressonância de plasmon de superfície localizada (LSPR), que acontece quando se incide um campo eletromagnético sobre a NP metálica em forma de bastão (NP é muito menor que o comprimento de onda incidente), havendo um deslocamento dos elétrons da mesma, no sentido contrário ao campo eletromagnético incidente. Na primeira parte, utilizou-se o método Layer-by-Layer para a construção de substratos SERS. Tais substratos foram caracterizados por UV-VIS e microscopia de força atômica (AFM) e apresentaram bom desempenho SERS. Na segunda parte do trabalho, foram sintetizados AuNBs, promovida automontagem end-to-end dos mesmos utilizando a molécula de L-cisteína e feito o recobrimento dessas estruturas com SiO<sub>2</sub>, com o intuito de garantir uma maior estabilidade aos AuNB. Além disso, foi verificada a aplicabilidade por espalhamento Raman intensificado por superfície (SERS) e fluorescência intensificada por superfície (SEF), usando respectivamente as moléculas prova corante cristal violeta e IR-820.

**Título do Projeto:** Espectroscopia Raman aplicada ao estudo de políenos conjugados em moluscos

**Autores:** LUIZ FERNANDO CAPPÀ DE OLIVEIRA (Orientador), BEATRIZ DE SEIXAS REZENDE, HELDER DE SOUZA, LAYCE DE SOUZA CALLEGARO (Bolsista), LENIZE FERNANDES MAIA (Colaborador)

**Resumo:** Este projeto tem por objetivo central a caracterização de conchas de moluscos através de uma técnica não invasiva como a espectroscopia Raman e obter um banco de dados com as características espectroscópicas de cada espécie. Os espectros Raman foram obtidos com linhas de excitação em 532 nm diretamente das amostras de conchas das duas espécies, *Petaloconchus varians* e *Eualetes tulipa*. As análises espectrais revelaram a ocorrência de políenos conjugados e a presença de carbonato de cálcio, com as bandas típicas de estiramento C-O em 1085  $\text{cm}^{-1}$  e de deformação de ângulo em 712  $\text{cm}^{-1}$ . Políenos conjugados são moléculas que contêm mais de duas ligações duplas situadas em carbonos vizinhos dispostas em uma cadeia carbônica alifática. O número de ligações duplas conjugadas é a principal característica que determina as propriedades espectroscópicas dessas moléculas que absorvem luz entre 400 e 500 nm. Os políenais conjugados já identificados em corais e conchas apresentam entre 8 e 14 insaturações. A comparação entre os resultados obtidos para as duas espécies mostra uma diferença de 15  $\text{cm}^{-1}$  na posição das bandas atribuídas às vibrações de estiramento da ligação (C=C), indicando que cada espécie biossintetiza políenos com cadeias poliênicas distintas que podem variar de 9 a 11 conjugações insaturadas.

**Título do Projeto:** Modelo de Regressão Linear com Ponto de Mudança Contínuo sob a Distribuição Normal

**Autores:** CAMILA BORELLI ZELLER (Orientador), NÍCOLAS OLIVEIRA DA SILVA, RAFAEL ROCHA DE OLIVEIRA GARCIA (Bolsista)

**Resumo:** Neste trabalho, apresentamos resultados recentes em uma área de pesquisa da Estatística com uma possibilidade enorme de aplicações, que são os modelos de regressão linear. Além disso, consideramos o fato de que o mesmo modelo de regressão linear pode não ser válido para todo um conjunto de dados. Isto é, o modelo pode se alterar após um ponto específico que, em geral, é desconhecido, e denominado ponto de mudança. Neste contexto, o principal objetivo deste trabalho é estudar alguns aspectos de estimação em modelos de regressão linear com ponto de mudança, sem descontinuidade, sob a suposição de normalidade dos erros aleatórios e conseqüentemente dos dados. A estimação dos parâmetros dos modelos será pelo método da máxima verossimilhança, via um processo iterativo. Finalmente, exemplos numéricos considerando dados simulados e/ou reais são apresentados para ilustrar o modelo e os resultados inferenciais desenvolvidos. Foi utilizado o programa estatístico R.

**Título do Projeto:** Desenvolvimento de aplicativos em shiny para ensino de Estatística

**Autores:** TIAGO MAIA MAGALHAES (Orientador), MARIA JÚLIA NEVES GREGÓRIO (Bolsista)

**Resumo:** O projeto é destinado ao Ensino de Estatística, logo , os primeiros passos se resumiram na revisão dos principais tópicos da Estatística descritiva. A ideia era levar para a sala de aula um aplicativo interativo que unisse a teoria com dados do dia a dia. Para tal objetivo optamos pelo uso do pacote Shiny, disponível no Software R, que é capaz de criar painéis interativos em HTML sem a necessidade de aprendizado dessa linguagem. Ao criar uma interface amigável conseguimos conectar Estatística e tecnologia, sem o requisito do conhecimento de programação, que pode desestimular os alunos que não se interessam por essa área. O aplicativo feito permite que o aluno escolha um banco de dados do seu interesse, e o analise descritivamente, possui as principais medidas de posição como mediana, média, e o cálculo dos quantis, e as principais medidas de dispersão como o desvio padrão e o coeficiente de variação, também é possível plotar gráficos como histograma, barras ou setores.

**Título do Projeto:** Sistemas de informações geográficas e análise espacial: caracterizando os municípios de Minas Gerais segundo indicadores socioeconômicos

**Autores:** TIAGO MAIA MAGALHAES (Orientador), LEONARDO GRAVINA DE FARIA (Bolsista)

**Resumo:** Sistemas de Informações Geográficas (SIG) são sistemas que processam dados geográficos (dados indexados por um sistema de coordenadas cartográficas) e possuem quatro funções básicas: entrada, armazenamento, análise e visualização. A análise realizada em um SIG é a análise espacial, que objetiva, através da explicitação da espacialidade dos dados, mostrar sua distribuição no espaço e o relacionamento entre as entidades espaciais. Usamos como SIG a linguagem de programação R através do ambiente de desenvolvimento R Studio e pacotes que fornecem ferramentas que auxiliam desde a importação dos dados até os processos de análise espacial e geração dos mapas. Assim, através desse projeto, usamos os índices Moran para visualizar os clusters de autocorrelação espacial significantes de indicadores socioeconômicos no estado de Minas Gerais, a fim de melhor caracterizar os municípios mineiros numa perspectiva de diferenças regionais. A visualização final dessas análises foi feita através de mapas temáticos e de Moran Maps. Num relatório completo, comparamos ainda a análise exploratória de dados comum com a análise exploratória de dados espaciais, além de detalhar todo o processo de geração dos mapas. Esse processo de análise pode orientar melhor não só a formulação de teorias como também a de políticas públicas.



**Título do Projeto:** ANALOGIA ENTRE DIFRAÇÃO DA LUZ E ESPALHAMENTO MECÂNICO

**Autores:** IVAN FERREIRA DOS SANTOS (Orientador), LUCAS VENTURA ALVES (Bolsista), RODRIGO ALVES DIAS, WALLON ANDERSON TADAIESKY NOGUEIRA (Colaborador)

**Resumo:** Se um feixe de luz coerente incide em uma abertura plana, esse pode difratar se as dimensões da abertura forem pequenas em comparação ao comprimento de onda. Analogamente, se um feixe de partículas incide sobre a mesma abertura, essas serão espalhadas. A expressão matemática que descreve a intensidade luz difratada, em qualquer posição após a abertura, está bem estabelecida na literatura (propagador de Fresnel). O regime de validade dessa expressão também está bem definido. Nesse trabalho encontramos a expressão matemática que descreve a intensidade de partículas espalhadas por uma abertura arbitrária. Para um caso particular de aberturas (aquelas descritas por funções periódicas arbitrárias), obtivemos uma expressão muito semelhante àquela válida para difração de luz. Além disto, determinamos as condições experimentais sob as quais essa expressão é válida. Uma dessas condições é semelhante à condição de validade da óptica paraxial (pequenos ângulos). Assim como ocorre com a difração de luz em aberturas periódicas, a intensidade do feixe de partículas, após percorrer certas distâncias específicas, reproduzem a imagem da abertura. Nesse trabalho essas distâncias são calculadas e verificamos que elas não podem ser muito grandes, exatamente como na aproximação de "near field" da óptica. O quão pequeno essas distâncias devem ser, para valer as aproximações feitas, também foi calculado.

**Título do Projeto:** Espectroscopia na Caracterização de Materiais

**Autores:** ZELIA MARIA DA COSTA LUDWIG (Orientador), SUÉLLEN CHINA HERCULANO (Bolsista)

**Resumo:** A aplicação de Espectroscopias Raman e Infravermelho em plastificantes tem como objetivo identificar e qualificar o tipo de material composto nos plásticos. No trabalho realizado no Centro de Pesquisa em Materiais do Departamento de Física da UFJF, foi identificado o tipo de material que é composto a embalagem para forno, que é muito utilizado em preparo de alimentos. O motivo de ter escolhido a embalagem para forno é que em sua embalagem não há nenhuma informação sobre o tipo de material. Para a obtenção do resultado foi utilizado uma amostra da embalagem para forno e o equipamento Bruker Tensor 27, a partir do equipamento obteve-se o espectro da embalagem para forno, e esse espectro foi comparado com o espectro de um Polyester que foi obtido a partir de pesquisas, a partir da comparação dos espectros descobriu-se o tipo de material da embalagem para forno e partir dessa descoberta é possível explorar as características dessas embalagem.

**Título do Projeto:** ESTUDO TERMOGRAVIMÉTRICO COMBINADO COM TÉCNICAS VIBRACIONAIS EM FIBRA DE COCO, BAGAÇO DA CANA-DE-AÇÚCAR, PALHA DE ARROZ E PALHA DO CAFÉ PARA FINS ENERGÉTICOS

**Autores:** ZELIA MARIA DA COSTA LUDWIG (Orientador), MARLA SILVA DE OLIVEIRA LEAL (Bolsista)

**Resumo:** Para um melhor aproveitamento do bagaço da cana de açúcar, é fundamental o conhecimento do seu comportamento térmico e cinético durante o processo de termo conversão. Foi feito um estudo do comportamento térmico para caracterizar e avaliar a biomassa, utilizando as técnicas de análise térmica de termogravimetria (TG/DTG) e de análise térmica diferencial (DTA). O método termogravimétrico consiste em aquecer uma amostra da matéria em um forno com temperatura (ou taxa de aquecimento) controlada, medindo-se a perda de massa dessa amostra com uma balança de precisão acoplada ao forno. Neste processo, obtêm-se a análise imediata do material estudado e parâmetros da cinética e volatilização de seus compostos. A TG estuda a variação de massa devida à interação com a atmosfera - a DTG permite identificar as temperaturas onde ocorrem mudanças e temperaturas de maior volatilização e a DTA estuda os processos físico-químicos que envolvem variação de energia. As análises de TG/DTG e DTA foram feitas simultaneamente com velocidade de aquecimento de 10°C/min até atingir a temperatura de 500°C, utilizando como gás de arraste em atmosfera dinâmica. A partir do registro da massa em função da temperatura ou do tempo, obtêm-se a curva termogravimétrica. Para uma melhor visualização dos resultados obtidos, utiliza-se de um artifício matemático, que consiste na obtenção da derivada primeira da curva TG, a curva DTG. Através dos resultados obtidos por TG/DTG foi possível averiguar os processos envolvidos que causam variação da massa da biomassa. Além disso, observou-se a quantidade de decaimentos, onde eles ocorreram. As curvas ascendentes existentes significam respectivamente a perda ou ganho de massa. Através da curva DTG, torna-se possível extrair informações quantitativas sobre a perda de massa. De posse da altura do pico dessa curva, consegue-se fornecer a taxa de perda de massa nessa temperatura. Mediante informações a respeito do máximo da curva DTG, obtêm-se a máxima velocidade da reação térmica. Foi possível determinar se a decomposição térmica ocorre em vários eventos consecutivos e concomitantes - eventos referente à decomposição da amostra, desidratação e composição orgânica. Além do que já foi feito nesse trabalho, as técnicas descritas anteriormente, serão aplicadas em outras espécies de biomassa com o propósito de caracterizar cada uma delas e desenvolver bicompostível.

**Título do Projeto:** Análise teórico-computacional da molécula tiroxina isolada

**Autores:** VALDEMIR ENEIAS LUDWIG (Orientador), RICARDO VIANNA KUZMINSKI RIZZON (Bolsista)

**Resumo:** A tetraiodotironina (T4), mais conhecida como tiroxina, é um dos hormônios sintetizados pela glândula tireoide. Esses hormônios, produzidos na presença de iodo, são essenciais para o desenvolvimento e maturação do cérebro humano, são responsáveis pela síntese de enzimas necessárias para a produção de neurotransmissores [1] e pela regulação do metabolismo. A deficiência de iodo pode causar redução na produção de tiroxina, aumentando o tecido tireoidiano e causando bócio. Distúrbios na glândula tireoide podem levar a problemas mentais severos como depressão, mudanças de humor, retardo mental, etc. Dois distúrbios relacionados à tiroxina são o hipertiroidismo e o hipotiroidismo, sendo o primeiro causado pela excessiva síntese de tiroxina e o último pela síntese insuficiente. Essa pesquisa se baseia no interesse de compreender as propriedades vibracionais da molécula tiroxina, assim como suas funcionalidades. Dessa forma, utilizamos técnicas computacionais para análise, dos espectros infravermelho, Raman e UV-vis da molécula otimizada por três diferentes bases para o método DFT, e uma base para o espectro UV-vis. Os resultados obtidos demonstraram proximidade satisfatória ao compará-los com dados obtidos experimentalmente.

**Título do Projeto:** Construção de Curvas de energia potencial usando redes neurais

**Autores:** MAIKEL YUSAT BALLESTER FURONES (Orientador), MARCOS DANIEL SILVA ALVES, FELIPE AUGUSTO DOS SANTOS (Bolsista), RAMON SOUSA DA SILVA (Colaborador)

**Resumo:** Curvas de energia potencial para sistemas diatômicos são apresentadas. Moléculas neutras e iônicas são analisadas. O treinamento de redes neurais é usado para obter a dependência entre a energia potencial e distância inter-atômica. A suavidade das curvas é garantida corrigindo, por um método original, as derivadas do potencial. A metodologia testada nos sistemas estudados visa ser empregada na descrição de sistemas moleculares de maior número de átomos, os quais já estão sendo analisados usando métodos ab initio. Dois vídeos são apresentados, um de cada bolsista, que correspondentemente estudaram sistemas diferentes. Seguem os dois links (no sistema colocamos apenas um deles) <https://www.youtube.com/watch?v=y-jSnj6Awlo> e <https://youtu.be/LZE-hy04Dng>

**Título do Projeto:** Desenvolvimento de aparatos para o laboratório CASis-UFJF.

**Autores:** FABIO ZAPPA (Orientador), TAFAREL CARLOS SOARES, TÚLIO LAZARONI SACCHETTO (Bolsista)

**Resumo:** A Física Atômica e Molecular não só constitui um dos alicerces da ciência moderna, como também fornece técnicas e instrumentação para diversas outras ciências e tecnologias. O estudo das colisões entre elétrons, átomos e moléculas tornou-se uma ferramenta essencial no desenvolvimento científico e, apesar do longo tempo de existência, ainda apresenta surpreendente vitalidade como área de pesquisa básica. Além das aplicações, boa parte da longevidade da área de colisões atômicas se deve ao fato de que mesmo com a capacidade computacional disponível atualmente, poucos processos possam ser modelados completamente *ab initio*, necessitando aproximações cuja validade deve ser comprovada experimentalmente. Monocromadores de elétrons são equipamentos fundamentais para diversos tipos de experimentos em Física Atômica. Neste trabalho apresentaremos a construção de um monocromador do tipo trocoidal a partir de um projeto pré-existente. São abordados os problemas construtivos que foram encontrados para a construção do equipamento e as soluções que foram propostas. O nosso laboratório também dispõe de um canhão de íons alcalinos que é utilizado em experimentos colisões entre esses íons e alvos moleculares gasosos. Neste projeto realizamos o projeto de um copo de Faraday retrátil, que permita o monitoramento da corrente dos íons produzidos pelo canhão.

**Título do Projeto:** FÍSICA DE COLISÕES ATÔMICAS: CIÊNCIA BÁSICA E APLICAÇÕES III

**Autores:** FABIO ZAPPA (Orientador), CARLA ANDRESSA RODRIGUES LOPES (Bolsista), MARIANA MARIA DE FREITAS VIANA, ROBERTO ROSAS PINHO (Colaborador)

**Resumo:** Espectrometria de massas é uma técnica analítica extremamente valiosa, onde moléculas de uma amostra são ionizadas, depois são separados no espectrômetro de massas de acordo com sua razão massa ( $m$ ) sobre a carga ( $z$ ),  $m/z$ . O espectro de massa é um gráfico que mostra a abundância (intensidade) relativa de cada íon que aparece como picos com  $m/z$  definidos. No laboratório, utilizamos o processo de ionização/dessorção a laser assistida por matriz (MALDI). A matriz é constituída por um composto orgânico que absorve energia na região do comprimento de onda do laser. O ácido Alpha ciano é a matriz comumente usada para a análise de peptídeos por espectrometria tipo MALDI. Esta matriz é misturada com a amostra, que é co-cristalizada junto com a matriz adicionada em excesso. Pulsos de laser, de alguns nano-segundos de duração, incidem sobre a amostra causando uma rápida excitação da matriz cristalina que é acompanhada da ejeção simultânea do analito. Esses íons entram no analisador de massas do tipo TOF e são detectados. A vantagem do MALDI é a habilidade de produzir íons de moléculas grandes na forma intacta carregadas na sua grande maioria com uma ou duas cargas. O TOF é o melhor analisador a ser utilizado com o MALDI pois possui uma faixa de detecção de massas ilimitada. Este procedimento foi utilizado para análise do Coroneno que é um hidrocarboneto aromático policíclico compreendendo seis anéis de benzeno. Sua fórmula química é  $C_{24}H_{12}$ . É um material amarelo que se dissolve em solventes comuns. Suas soluções emitem fluorescência de luz azul sob luz UV. O Coroneno é utilizado para sintetizar materiais ativos para aplicações fotovoltaicas e optoeletrônicas orgânicas, também como 'semente de nucleação' para sintetizar o grafeno por deposição de vapor a baixas temperaturas e até construir novas estruturas e arquiteturas moleculares aromáticas policíclicas. Confeccionamos nossa amostra dissolvendo o Coroneno em uma solução de cloreto de metileno (diclorometano) e acetonitrila, intercalando amostra e matriz em diferentes proporções na placa. Com os resultados da espectrometria poderemos comparar com os dados obtidos pelo Prof. Drº Fabio Zappa, usando Espectrometria de massas com ionização por electrospray.

**Título do Projeto:** OBTENÇÃO DE SEÇÕES DE CHOQUE DE COLISÃO DE ELÉTRONS DE BAIXA ENERGIA COM BIOMOLÉCULAS PARTE II

**Autores:** MARIA CRISTINA ANDREOLLI LOPES (Orientador), IGOR DE CASTRO ESTEVES, FELIPE PONTES TEIXEIRA SALES (Bolsista), ANNE CAROLINE DE PAULA FERNANDES, MARCELO GOMES DA SILVA (Colaborador)

**Resumo:** Apesar do notável pioneirismo do país na produção de biocombustíveis, os processos envolvidos em suas obtenções são caracterizados em grande parte pelo o que se denomina de produção de primeira geração, que constitui na fermentação de biomassa, rica em açúcares livres. Com o objetivo de tornar a produção de biocombustíveis ainda mais eficiente, um considerável esforço científico tem sido investido no desenvolvimento da tecnologia de conversão de material lignocelulósico presente na biomassa, como no bagaço da cana-de-açúcar, cascas de arroz, côco, babaçu entre outras, pela rota sucroquímica, produzindo açúcares fermentáveis de segunda geração. Neste trabalho produzimos dados de Seções de Choque Totais (SCT) do espalhamento de elétrons pelo 1-butanol, um potencial biocombustível produzido na fermentação da biomassa. O trabalho possibilitou o envolvimento em um importante projeto com grande apelo tecnológico, aprendendo a técnica de transmissão linear e metodologia para aquisição de dados de SCT.



**Título do Projeto:** SEÇÕES DE CHOQUE TOTAIS DO ESPALHAMENTO DE ELÉTRONS POR BIOMOLÉCULAS

**Autores:** MARIA CRISTINA ANDREOLLI LOPES (Orientador), LEANDRO DOS SANTOS AVILA, HEITOR BACELLAR HOLLERBACH (Bolsista)

**Resumo:** Esse trabalho teve como objetivo central a recuperação de um aparelho de medidas de Seções de choque totais (SCT) do espalhamento de elétrons por amostra gasosas, visando o estudo de potenciais biocombustíveis. As medidas das seções de choques totais (SCT) do espalhamento de elétrons por biomoléculas são essenciais para o desenvolvimento de pesquisas e inovações tecnológicas. Física da atmosfera, astrofísica, bioquímica de radiação e estudos de quebra da fita dupla de DNA são ótimos exemplos para a aplicação de SCT. Apesar da importância das Seções de Choque, poucos grupos de pesquisas no mundo dominam a tecnologia envolvida na produção destes dados, sendo nosso grupo na UFJF o único no Brasil, até onde sabemos. Nesse projeto foi recuperado e colocado em funcionamento um aparelho de medidas de SCT do espalhamento de elétrons por amostras gasosas, visando o estudo de potenciais biocombustíveis através da análise de dados de SCT em diferentes biomoléculas.

**Título do Projeto:** Emergência de uma geometria não-comutativa devido a efeitos de spin

**Autores:** BRUNO FERREIRA RIZZUTI (Orientador), GUILHERME FERREIRA VASCONCELOS JÚNIOR, RAFAEL GROSSI RODRIGUES (Bolsista)

**Resumo:** Esse projeto de iniciação científica consistiu inicialmente num estudo intenso de conceitos de análise real e álgebra linear, visando, posteriormente, a aplicação na construção da estrutura topológica do espaço-tempo através de uma abordagem operacional. O interesse nessa abordagem decorre da conexão muito clara entre o caráter experimental dos fenômenos físicos e a respectiva descrição matemática. A proposta que decorre desse trabalho é de considerar como abertos para nossa topologia a interseção de dois ramos de dois hiperboloides distintos no espaço-tempo. Outro campo que o projeto visou atacar foi o da íntima relação entre geometria diferencial e mecânica clássica. Estudando a (não) equivalência entre dois modelos usuais na descrição de sistemas mecânicos, foi possível expor de maneira rigorosa qual a dinâmica de cada um e como a aparente equivalência entre as equações de movimento não é necessariamente verdadeira. Por fim, aplicamos esses resultados para o estudo clássico de partículas com spin.

**Título do Projeto:** Campos clássicos localizados tipo-string

**Autores:** JENS KARL HEINZ MUND (Orientador), DANIEL ROTMEISTER TEIXEIRA DE BARROS (Bolsista)

**Resumo:** Os campos elétricos e magnéticos são descritos, de maneira relativisticamente invariante, pelo tensor eletromagnético  $F$ , o qual é uma forma do grau 2. Pelas equações homogêneas de Maxwell e pelo Lema de Poincaré este tensor possui um potencial-vetor, ou seja, um campo (co-) vetorial  $A$  cuja derivada exterior é o próprio tensor  $F$ . O potencial para um dado  $F$  não é único, e pode ser submetido a chamadas condições de calibre. Correspondentemente, o potencial-vetor  $A$ , em contraste com o tensor eletromagnético, não é diretamente observável. Porém, ele é indispensável para a formulação de interações do campo eletromagnético com outros campos, e por isso é interessante analisar as características dos vários calibres, e as relações entre eles. No presente projeto, propomos a construção de um potencial-vetor através de uma integral de linha do tensor de campo até o infinito na direção de um quadrivetor  $v$ . Esse vetor pode ser considerado como caracterizando um "calibre", remanescente do calibre axial, mas também pode ser considerado um argumento do campo  $A$ . Entre outros, mostramos que o potencial-vetor construído dessa maneira com  $v$  tipo-tempo ("calibre axial temporal") satisfaz no vácuo as condições do calibre de Coulomb (no referencial de repouso do vetor  $v$ ). A mencionada construção do potencial-vetor mostrou-se profícua numa abordagem emergente à teoria quântica de calibre (evitando os "fantasmas" e os estados não-físicos dessa teoria). As considerações clássicas podem, além de ser interessantes por si mesmas, ser úteis para complementar e interpretar os resultados da teoria quântica de campos.

**Título do Projeto:** APRENDIZADO DE MAQUINA - FASES DE SISTEMAS MAGNÉTICOS

**Autores:** RODRIGO ALVES DIAS (Orientador), DOUGLAS FRANCISCO PAULINO DA SILVA (Bolsista)

**Resumo:** Rede neural é um tipo de algoritmo bioinspirado baseado em neurônios humanos, que possibilita o aprendizado do computador através do reconhecimento de padrões. Atualmente, fornece soluções para muitos problemas em reconhecimento de imagem, reconhecimento de fala, aplicações na indústria, e especificamente, obter temperatura de transição de fase de sistemas ferromagnéticos com a presença de campo externo, mesmo com redução nos parâmetros de entrada. O ferromagnetismo é a propriedade que caracteriza materiais que reagem facilmente com um campo magnético e possuem magnetização espontânea. Ao atingir uma temperatura maior que a temperatura de Curie também chamada de temperatura de transição de fase, temos então que o material passa a ser paramagnético. Transição de fase é um dos mais comuns fenômenos na natureza. O modelo de Ising de duas dimensões é o mais simples sistema para mostrar transição de fase e fenômenos críticos em temperaturas finitas.

**Título do Projeto:** Supressão do Efeito Hall do Skyrmion em nanomagnetos planos pela variação da intensidade da interação de Dzyaloshinskii-Moriya: Transporte de skyrmions em nanofitas com bordas repulsivas

**Autores:** SIDINEY DE ANDRADE LEONEL (Orientador), ANA LÍDIA SANTOS MIRANDA (Bolsista)

**Resumo:** Nanomagnetos são sistemas apropriados para investigar estruturas magnéticas exóticas, como vórtices, skyrmions e as paredes de domínio. Essas quasepartículas são relevantes para o micromagnetismo e possibilitam a fabricação de dispositivos spintrônicos. Nesse trabalho demos foco aos skyrmions, os transportadores de informação que provavelmente formarão a base para as próximas gerações no armazenamento de dispositivos lógicos. Diferentemente de paredes de domínios que apresentam um movimento unidirecional restrito ao longo da nanofita, skyrmions não podem ser conduzidos por uma corrente spin-polarizada sem que sejam afastados do maior eixo da nanofita. Portanto, o Efeito Hall do Skyrmion pode ser um problema para futuros dispositivos spintrônicos baseados no transporte de skyrmions. Sabe-se que o skyrmion é atraído por uma armadilha caracterizada por um aumento local na constante de Dzyaloshinskii-Moriya e repelido por uma redução local da constante de Dzyaloshinskii-Moriya. A fim de suprimir o Efeito Hall Skyrmion, investigamos o efeito de duas bordas paralelas e repulsivas ao longo do maior eixo da nanofita. Nesse estudo, variamos os parâmetros das bordas repulsivas da nanofita, ou seja, a redução local da constante de Dzyaloshinskii-Moriya e a área da borda. O movimento do skyrmion deslocado pela corrente spin-polarizada foi estudado através de uma simulação micromagnética e os resultados encontrados mostram que é possível transportar o skyrmion na região central da nanofita. Os resultados aqui apresentados oferecem uma base para estudos experimentais.

**Título do Projeto:** Estudo de propriedades eletrônicas de borofenos

**Autores:** DANIEL VASCONCELOS PAZZINI MASSOTE (Orientador), IURI KISTENMACKER MACHADO, VINÍCIUS MOREIRA MAYRINK MARTINS, FELIPE BOECHAT MAZZI (Bolsista)

**Resumo:** Apresentamos as atividades desenvolvidas durante o último ano de trabalhos. Nele, os estudantes Iuri e Vinícius apresentam as ferramentas que utilizamos ao estudar nanomateriais computacionalmente. Mais especificamente, realizamos cálculos de estrutura eletrônica por meio da Teoria do Funcional da Densidade como implementada no programa SIESTA. Como os bolsistas necessitavam aprender os conceitos básicos da pesquisa, desenvolveram modelos computacionais de moléculas simples, inicialmente, como água e depois partiram para modelos mais complexos como nanotubos de carbono. Mais recentemente, conseguiram efetuar cálculos de estrutura eletrônica de borofenos. Assim como o grafeno, que foi o primeiro material 2D composto por uma única camada atômica de carbono, o borofeno possui simetria similar com átomos de boro. Como o borofeno foi sintetizado há pouco tempo, muitas propriedades ainda estão por ser descobertas. Os alunos apresentam as estruturas de bandas, que dão as características eletrônicas dos materiais e vemos que apresentam caráter metálico. Pretendemos continuar a pesquisa e partiremos para nanofitas desses borofenos. Com isso, essas propriedades já obtidas nos fornecem os subsídios necessários para a sequência do trabalho.

**Título do Projeto:** MATERIAIS SOB BINÔMIO TEMPO E TEMPERATURA: ÓTICA DE FEMTOSEGUNDOS E PROPRIEDADES TÉRMICAS EM TEMPERATURAS CRIOGÊNICAS

**Autores:** VIRGILIO DE CARVALHO DOS ANJOS (Orientador), CÉSAR AUGUSTO RUBIM. MARINA COSTA TOTTI (Bolsista)

**Resumo:** Estudos de cristais fonônicos tem ganhado muita projeção no meio científico devido as inúmeras aplicações possíveis. Dentre elas podemos citar a emissão estimulada de fônons (phaser ou saser) onde fônons de alta frequência podem ser gerados (THz). Este sistema poderá a vir a ser utilizado em sistemas de imageamento THz que produzirão imagens com resolução manométricas. Além disso, na área de telecomunicações é desejável que haja emissão de ondas na escala de THz. Estas ondas podem ser detectadas e emitidas por dispositivos fonônicos. Assim são necessários sistemas de transdução de radiação eletromagnética para o dispositivo semiconductor e vice-versa. Modelamento e aproveitamento de energia térmica também podem ser projetados, como por exemplo, em retificadores térmicos. Neste trabalho o aluno deverá calcular a relação de dispersão de cristais fonônicos de Si com inclusões de outros materiais como, por exemplo, metal ou ar em sistemas unidimensionais.

**Título do Projeto:** MATERIAIS SOB BINÔMIO TEMPO E TEMPERATURA: ÓTICA DE FEMTOSEGUNDOS E PROPRIEDADES TÉRMICAS EM TEMPERATURAS CRIOGÊNICAS

**Autores:** VIRGILIO DE CARVALHO DOS ANJOS (Orientador), CÉSAR AUGUSTO RUBIM, RENAN AUGUSTO DE SOUZA SILVA, WILLIAM DORNELLAS DE FARIA (Bolsista), MARIA JOSÉ VALENZUELA BELL (Colaborador)

**Resumo:** Estudos de cristais fonônicos tem ganhado muita projeção no meio científico devido as inúmeras aplicações possíveis. Dentre elas podemos citar a emissão estimulada de fônons (phaser ou saser) onde fônons de alta frequência podem ser gerados (THz). Este sistema poderá vir a ser utilizado em sistemas de imageamento THz que produzirão imagens com resolução manométricas. Além disso, na área de telecomunicações é desejável que haja emissão de ondas na escala de THz. Estas ondas podem ser detectadas e emitidas por dispositivos fonônicos. Assim são necessários sistemas de transdução de radiação eletromagnética para o dispositivo semiconductor e vice-versa. Modelamento e aproveitamento de energia térmica também podem ser projetados, como por exemplo, em retificadores térmicos. Neste trabalho o aluno deverá calcular a relação de dispersão de cristais fonônicos de Si com inclusões de outros materiais como, por exemplo, metal ou ar em sistemas unidimensionais.



**Título do Projeto:** O IMPACTO DAS NORMAS DE PESCA SOBRE O TAMANHO MÉDIO DE POPULAÇÃO PÉCEAS: UMA ABORDAGEM BIOFÍSICA

**Autores:** FERNANDO SATO (Orientador), CARLOS CESAR PEREIRA PETERGABRIEL SILVA MEDINA (Bolsista), JOÃO PAULO ALMEIDA DE MENDONÇA, MAXWEL GAMA MONTEIRO JÚNIOR, WALLON ANDERSON TADAIESKY NOGUEIRA (Colaborador)

**Resumo:** Esse projeto visa contribuir com os trabalhos teóricos que já vem sendo desenvolvidos dentro da área de biofísica. Além disso, o conhecimento dessas previsões em termos dos tamanhos das populações e tamanhos absolutos dos peixes são importante para que não haja colapso populacional ou extinção de espécies. Espécies essas que não são de alta demanda e/ou importância econômica, mas também aquelas que cooperam para o delicado equilíbrio ambiental da biosfera local onde vivem. No decorrer do período do desenvolvimento do projeto de pesquisa, foi possível conhecer mais a fundo a bibliografia envolvida no estudo, a legislação de vários estados brasileiros e também a construção preliminar do programa que será utilizado para a simulação do crescimento dos peixes.

**Título do Projeto:** Desenvolvimento de instrumentação para monitoramento de propriedades físicas em montagem experimental de espectroscopia ótica

**Autores:** MARIA JOSE VALENZUELA BELL (Orientador), CLÁUDIA ALINE DA SILVA MARQUES DO NASCIMENTO (Bolsista), VIRGILIO DE CARVALHO DOS ANJOS (Colaborador)

**Resumo:** O projeto visa o desenvolvimento de instrumentação de monitoramento de propriedades físicas de materiais como nanocompositos com íons terras raras. Os nanocompositos deste projeto consistem de vidros dopados com íons Terras Raras e nanopartículas metálicas. As aplicações destes sistemas encontram-se na área de fotônica, onde as propriedades óticas dos sistemas (especificamente emissão de luz) são otimizadas de acordo com a região espectral de interesse do estudo. Podem ser desenvolvidos materiais para emissão laser, displays RGB ou mesmo leds. Para realizar o monitoramento, são necessários sensores de temperatura e umidade ambiente, uma vez que estes parâmetros interferem diretamente nas propriedades de emissão luminosa. Assim, foram utilizados sensores de temperatura e umidade acoplados à plataforma Arduino, de forma que o conjunto pudesse ser adaptado à técnica de luminescência, onde as amostras são estudadas. Este trabalho é a primeira etapa para monitoramento completo do experimento de emissão laser. No momento, o projeto encontra-se em andamento com os primeiros testes do dispositivo e primeiros dados sendo coletados. O dispositivo ainda permite o armazenamento dos dados para posterior avaliação.

**Título do Projeto:** Aproximação contínua do potencial TB-SMA

**Autores:** FERNANDO SATO (Orientador), GUILHERME CORRÊA SILVA, TIAGO LUCAS BUCCHI MORAES (Bolsista)

**Resumo:** O projeto visa o desenvolvimento de instrumentação de monitoramento de propriedades físicas de materiais como nanocompositos com íons terras raras. Os nanocompositos deste projeto consistem de vidros dopados com íons Terras Raras e nanopartículas metálicas. As aplicações destes sistemas encontram-se na área de fotônica, onde as propriedades óticas dos sistemas (especificamente emissão de luz) são otimizadas de acordo com a região espectral de interesse do estudo. Podem ser desenvolvidos materiais para emissão laser, displays RGB ou mesmo leds. Para realizar o monitoramento, são necessários sensores de temperatura e umidade ambiente, uma vez que estes parâmetros interferem diretamente nas propriedades de emissão luminosa. Assim, foram utilizados sensores de temperatura e umidade acoplados à plataforma Arduino, de forma que o conjunto pudesse ser adaptado à técnica de luminescência, onde as amostras são estudadas. Este trabalho é a primeira etapa para monitoramento completo do experimento de emissão laser. No momento, o projeto encontra-se em andamento com os primeiros testes do dispositivo e primeiros dados sendo coletados. O dispositivo ainda permite o armazenamento dos dados para posterior avaliação.

**Título do Projeto:** Uso das Técnicas físicas para detecção de adição de soro resultante da produção de queijo

**Autores:** MARIA JOSE VALENZUELA BELL (Orientador), LETICIA MARIA RESENDE SOUZA, IOLANDA FREITAS DE SOUZA SANTOS, RENAN SILVA DE ARAÚJO (Bolsista), FABÍOLA FONSECA ÂNGELO, VIRIGLIO DE CARVALHO DOS ANJOS (Colaborador)

**Resumo:** Este projeto visa o uso de técnicas físicas como espectroscopia e MALDI para detecção de soro em leite. O soro é proveniente da produção de queijo e pode ser propositalmente adicionado ao leite como uma forma de adulteração. A adição de soro é de difícil detecção pois sua composição é similar ao leite. Propomos então o uso da técnica de MALDI como uma técnica extremamente sensível para este tipo de estudo. O equipamento é capaz de detectar proteínas específicas do soro e que não são encontradas no leite cru. Dessa forma, podemos ter uma identificação inequívoca do soro. Para a realização do projeto foram preparadas diversas amostras de soro, leite cru e também amostras com diferentes proporções de leite cru e soro (de 0 a 100%), a fim de adequar a técnica para a detecção dos compostos esperados. Foi demonstrado que a técnica de MALDI é eficaz na detecção da fraude e no momento busca-se o desenvolvimento de uma metodologia de utilização do equipamento, especialmente no que diz respeito ao procedimento de preparação das amostras.

**Título do Projeto:** Uso de técnicas de espectroscopia para determinação das propriedades físicas do leite e suas variações naturais

**Autores:** MARIA JOSE VALENZUELA BELL (Orientador), LETICIA MARIA RESENDE SOUZA, WILLIAM DORNELLAS DE FARIA (Bolsista), IOLANDA FREITAS DE SOUZA SANTOS, VIRGILIO DE CARVALHO DOS ANJOS (Colaborador)

**Resumo:** Neste projeto propomos o uso de técnicas de espectroscopia ótica, como absorção infravermelha por transformada de Fourier, para investigar propriedades físicas do leite, como seus modos de vibração e sua associação com gorduras, lactose e proteínas. O objetivo é monitorar eventuais variações naturais do leite em função do local de produção, alimentação, estação do ano, entre outros, fatores estes que podem modificar a composição do leite. Comparações com leite de diferentes localidades foram feitas, para verificar eventuais mudanças. Além disso foram comparados espectros de diferentes países, especialmente da Europa, já publicados em artigos científicos. Este estudo se justifica em função da necessidade de um espectro padrão para a determinação de parâmetros quantitativos do leite, como porcentagem de gorduras, porcentagem de proteínas e lactose. Escoa-se também que eventuais mudanças de composição do leite possam afetar a qualidade do queijo produzido.

**Título do Projeto:** Efeitos de temperatura na geração de espectro supercontínuo por lasers de femtossegundos

**Autores:** GIOVANA TREVISAN NOGUEIRA (Orientador), LEANDRA DE SOUZA E ALMEIDA, PEDRO HENRIQUE CARDOSO DA SILVA (Bolsista)

**Resumo:** Este projeto tem como objetivo implementar sistema laser de Ti:safira de femtossegundos com emissão de pulsos de femtossegundos e de um espectro supercontínuo, com 500 nm de largura (cobrindo toda a região do visível). O laser em desenvolvimento foi projetado com da dispersão intracavidade ajustável o que permitiria obter a emissão de espectro estreito (10 nm de largura espectral) ou a emissão do supercontínuo (500 nm de largura). Em resultados preliminares, obtivemos uma largura espectral de 20 nm. Entretanto, com a redução em 20°C da temperatura do cristal de Ti:safira, conseguimos um espectro de largura de 139 nm, maior que a largura da banda de emissão do cristal de Ti:safira. Com o objetivo de estudar a dependência da largura deste espectro com a temperatura, projetamos um sistema de controle de temperatura do cristal. Neste sistema, o cristal do laser foi montado sobre uma placa peltier, que altera a temperatura dependendo da corrente que passa por ele. Para controle de temperatura, montamos uma fonte de corrente regulável que fornece até 3 A ao sistema, usada para testes rápidos e também um circuito controlador de temperatura ativo e retroalimentado, que ajusta automaticamente a corrente no peltiere para manter a temperatura no cristal constante. Como resultado, conseguimos ajustar e estabilizar a temperatura do cristal de Ti:safira com o laser em funcionamento em temperaturas entre 20°C e 50°C .

**Título do Projeto:** Quantificação da Não-Gaussianidade de Feixes de Laser Não-difrativos

**Autores:** WALLON ANDERSON TADAIESKY NOGUEIRA (Orientador), ESTEVÃO EMERICK CALHEIRA (Bolsista), IVAN FERREIRA DOS SANTOS (Colaborador)

**Resumo:** Neste trabalho, estudamos a Não-Gaussianidade de um feixe do tipo Airy por meio do cálculo de uma quantidade conhecida como Negentropia. Essa quantidade nos informa o quão distante uma distribuição de probabilidade qualquer se encontra de uma distribuição Gaussiana. A negentropia de uma distribuição de probabilidade qualquer é definida como a diferença entre a entropia de Shannon de uma distribuição de probabilidade Gaussiana que possui o mesmo valor de média e de desvio padrão da distribuição de probabilidade que se estuda e a entropia de Shannon desta última. Dado que para um determinado valor de média e de desvio padrão uma distribuição Gaussiana de probabilidade possui o valor máximo possível para a entropia de Shannon, essa quantidade é sempre positiva ou, no limite, possui o seu valor nulo no caso de a probabilidade de interesse for a própria distribuição de probabilidade Gaussiana. Como resultado principal, calculamos a Negentropia associada a um feixe do tipo Airy e mostramos que ela tende a reduzir o seu valor conforme ele se propaga. Esse resultado pode ser compreendido da seguinte forma. Na medida em que o feixe Airy se propaga, a função de distribuição de probabilidades transversal associada a esse tipo de feixe tende a assemelhar-se a uma função Gaussiana, possuindo um comportamento mais suave do que esse tipo de feixe na posição  $z=0$ .

**Título do Projeto:** Elementos de topologia e G. D. para Caracterização de Grandezas Multidimensionais

**Autores:** BRUNO FERREIRA RIZZUTI (Orientador), LUCA MAUAD GAIO (Bolsista), CRISTHIANO DUARTE (Colaborador)

**Resumo:** No presente trabalho apresentamos a continuação natural do recente artigo "Grandezas Físicas Unidimensionais", publicado na Revista Brasileira de Ensino de Física. Tal trabalho foi fruto de uma Iniciação Científica custeada pela UFJF em 2017/2018. A construção operacional de uma grandeza passa pela definição de seu domínio, separação do domínio em classes e, por fim, associação injetiva de um espaço de valores às classes. Essa formulação é aqui delineada para abarcar grandezas multidimensionais, incluindo vetores, vetores duais e tensores, sendo que os dois últimos, apesar do caráter essencialmente geométrico, são interpretados como operadores. Adotar um viés operacional, nesse caso, permite ressignificar assuntos aparentemente tautológicos da matemática, como geometria, a partir de sua conexão com o mundo físico. Além disso, podemos também, aparentemente, ressignificar certas estruturas em matemática, como topologia, espaços métricos, espaços vetoriais com norma e produto interno, que surgem naturalmente da nossa construção. Todas elas são "descobertas" na descrição do nosso mundo físico. Nesse sentido, tais estruturas ganham realidade física objetiva.



**Título do Projeto:** Órbitas na Geometria de Schwarzschild : Uma Introdução

**Autores:** VALERIA MATTOS DA ROSA (Orientador), GUSTAVO RIBEIRO DE OLIVEIRA ROQUE (Bolsista)

**Resumo:** O projeto visa, a partir do estudo de Geometria Diferencial e Tensores, aprofundar no estudo da Relatividade Geral. A Geometria Diferencial une a Geometria com o Cálculo, enquanto que os Tensores generalizam noções de escalar, vetores e matrizes, e elimina a necessidade de um sistema de coordenadas. Então, começamos o estudo na relatividade, focando o estudo em órbitas e buracos negros. Analisamos como a órbita de uma partícula na Relatividade se difere da órbita prevista pela Mecânica Newtoniana. Em seguida, estudamos o que é um buraco negro na geometria de Schwarzschild e como ele é formado. Depois, começamos a estudar órbitas de partícula em torno de buracos negros. A partir disso, analisamos o comportamento de uma partícula orbitando um buraco negro de Schwarzschild com influência de uma força induzida por um campo escalar, principalmente na ISCO, que é a última órbita estável que a partícula pode desferir em torno do buraco negro.

**Título do Projeto:** Estudo teórico de complexos trinucleares de platina(II)

**Autores:** LUIZ ANTONIO SODRE COSTA (Orientador), FREDERICO HENRIQUE DO CARMO FERREIRA (Bolsista), NATHÁLIA MAGALHÃES PAIXÃO ROSA (Colaborador)

**Resumo:** Este trabalho visa estudar através de modelos miméticos teórico-computacionais, utilizando o pacote de software Gaussian09, as interações do tipo não covalentes encontradas entre PPC?s (complexos polinucleares de platina) e biomoléculas. Tais complexos apresentam potencial anticancerígeno (ou antimetastático) e surgiram após os estudos com o BBR3464 que foi o primeiro PPC a apresentar esse tipo de interação apesar de ainda possuir abandonadores cloreto como seus antecessores e a própria cisplatina (Qu, et. al., 2015). Essas interações são promissoras no intuito de apontar tais complexos como potenciais fármacos no combate a doenças como o câncer. Alterações estruturais podem ocorrer ao longo da biomolécula alvo devido a interações com outras espécies, e junto a ela algumas consequências como uma potencial anulação de suas funções bio-lógicas. Exatamente neste ponto os PPC?s (carregados positivamente) atuam como uma molécula capaz de interagir com o sulfato de heparano (HS, um glicosaminoglicano com carga negativa, conhecido como DNA extracelular) e causar tais disfunções o que poderia, por exemplo, evitar ou diminuir o processo de metástase. Para verificar tal comportamento, foram estudadas as energias envolvidas no sistema além da influência estrutural causada pela interação do PPC com a biomolécula. As interações não covalentes formam estruturas cíclicas do tipo garfos e grampos. As análises teóricas realizadas para modelos do HS ficaram de acordo com os dados estruturais da literatura experimental para o DNA, cuja média relatada foi 2,90 Å (KOMEDA, et al., 2006), e as variações nas energias livre de Gibbs foram majoritariamente negativas, o que indica uma tendência termodinâmica na formação destas estruturas de grampo ou garfo estudadas. Em uma comparação realizada com as interações destes mesmos PPC?s com o DNA (ROSA, et al., 2019), pode-se observar também uma interação favorável, que segue os mesmos parâmetros da interação com o HS, mesmo contendo menos unidades de fosfato por base nitrogenada quando comparado com o número de grupos sulfatos presente no HS (KATNER, et al., 2018). Katner, S. J., et al., *Inorg. Chem.* 2018, 57, 3116-3125. Komeda, V., et al., *JACS* 128, 16092-16103 (2006). Qu, et al., *Dalton Transactions* 44, 3563-3572 (2015). Rosa, N. M. P., et al., *Frontiers in Chemistry*, 7, 307 (2019).

**Título do Projeto:** ESTUDO DAS PROPRIEDADES ÓPTICAS, BIOQUÍMICAS E FOTOCATALÍTICAS DAS NANOPARTÍCULAS DE AU OU AG POR TÉCNICAS ESPECTROSCÓPICAS INTENSIFICADAS POR SUPERFÍCIE

**Autores:** ANTONIO CARLOS SANT ANA (Orientador), PÂMELLA DA SILVA CAMPOS (Bolsista)

**Resumo:** A adsorção do ácido fólico sobre superfície de ouro de nanopartículas sintetizadas em meio aquoso foi estudada por espectroscopia de absorção nas regiões do ultravioleta, visível e infravermelho próximo e por espectroscopia Raman intensificada por superfície.

**Título do Projeto:** Uso de nanoestruturas de prata como substrato para construção de sistemas reconhedores de tecidos biológicos

**Autores:** ANTONIO CARLOS SANT ANA (Orientador), HUGO CAMARANO BELGO, MARIA EDUARDA TOLEDO LIMA (Bolsista)

**Resumo:** Síntese de nanopartículas de prata com distribuição de tamanhos deslocada para LSPR no infravermelho próximo, que corresponde a tamanhos médios próximos de 100 nanômetros. Este material foi adequado para obtenção de espectros Raman intensificados por superfície após tratamento pós-síntese, para modificação da superfície, inicialmente bloqueada para adsorção de analitos orgânicos.

**Título do Projeto:** Avaliação dos Mecanismos de Extensibilidade de Linguagens de Programação

**Autores:** LEONARDO VIEIRA DOS SANTOS REIS (Orientador), CAIO SOUZA DE OLIVEIRA (Bolsista), ELTON MÁXIMO CARDOSO (Colaborador)

**Resumo:** Vivemos na era da produtividade, na qual estamos sempre buscando ser mais eficiente e produtivos. Na área de linguagens de programação não é diferente. Com o intuito de aumentar a produtividade e eficiência do programador, linguagens de domínio específico (DSLs, do inglês Domain-Specific Languages) tem ganhado a atenção a comunidade científica. DSLs têm a expressividade limitada e focada em um domínio particular, podendo ser implementadas como uma maneira particular de se usar uma linguagens de propósito geral (DSLs internas) ou externamente tendo um compilador próprio (DSLs externas). DSLs externas tem a vantagem de terem a sintaxe mais próxima do domínio em questão, ao passo que a sintaxe das DSLs internas está limitada pelas construções oferecidas pela linguagem hospedeira. No entanto, o custo para implementação de uma DSLs externa é maior quando comparado com uma DSL interna além da dificuldade para compor e reusar outras DSLs. Idealmente, deseja-se a combinação das vantagens de ambas as abordagens: sintaxe mais apropriada ao domínio das DSLs externas com as facilidades de reuso da infraestrutura da linguagem hospedeira na implementação interna. Diversas abordagens tem sido propostas na literatura nessa direção. Assim, nesse trabalho buscou-se categorizar as abordagens existente na literatura para estender linguagens de programação, identificando se tais abordagens tratam de composição e reuso das extensões ou DSLs. Para tal, foi realizado um mapeamento sistemático da literatura.

**Título do Projeto:** Corpos finitos e suas aplicações

**Autores:** BEATRIZ CASULARI DA MOTTA RIBEIRO (Orientador), RAPHAEL CASCELLI DOS SANTOS SOUZA (Bolsista)

**Resumo:** Na transmissão de dados, podem ocorrer problemas, como interferências eletromagnéticas ou erros humanos, como erros de digitação, que fazem com que a mensagem recebida seja diferente da enviada. Na teoria da informação, chamamos tais erros de ruídos e gostaríamos de estudar métodos que permitam não só detectá-los, como também corrigi-los. Essa teoria é relativamente nova, tendo tido início na metade do século XX com os trabalhos de Richard W. Hamming e Claude Elwood Shannon. A partir da década de 1970, com as pesquisas espaciais e a grande popularização dos computadores, essa teoria começou a interessar também aos engenheiros. Hoje em dia, os códigos corretores de erros são utilizados sempre que se deseja transmitir ou armazenar dados, garantindo a sua confiabilidade. São exemplos disso todas as comunicações via satélite, as comunicações internas de um computador, o armazenamento de dados em fitas ou disquetes magnéticos, ou o armazenamento óptico de dados. Nesse trabalho, os códigos corretores de erros são subespaços vetoriais de dimensão  $k$  de  $F_q^n$  e, nesse caso, existem vários problemas a serem considerados na teoria. Um deles é: fixados um corpo finito  $F_q$ , um comprimento  $n$  e uma dimensão  $k$ , quantos erros esse código pode detectar? Mais ainda, quantos pode corrigir? Essa pergunta tem relação com a métrica utilizada no código, que determina qual é a distância mínima entre os elementos no espaço. Códigos com mesmos parâmetros, mas métricas distintas podem corrigir mais ou menos erros. Outro problema clássico é o de empacotamento de esferas, que consiste em distribuir esferas de mesmo raio no espaço de forma que duas esferas se toquem no máximo em um ponto do bordo. Busca-se ainda um arranjo de esferas que ocupe o maior espaço possível do plano. No caso da relação entre esse problema e os códigos corretores de erros, estamos interessados em empacotar o plano com esferas centradas em pontos do código.

**Título do Projeto:** Criptografia com Curvas Elípticas

**Autores:** BEATRIZ CASULARI DA MOTTA RIBEIRO (Orientador), THIAGO SOARES NOGUEIRA (Bolsista)

**Resumo:** No dia a dia, temos senhas para nossas informações acadêmicas, senhas de banco, senhas de endereço eletrônico, tudo para que o acesso de outras pessoas as nossas informações privadas seja dificultado. Dessa forma, a procura por métodos cada vez mais seguros de troca de informações, que antes era uma necessidade de guerra, tornou-se uma necessidade para a vida cotidiana. Em 1975, Diffie e Hellman introduziram a noção de criptografia de chave pública, descrevendo como duas pessoas poderiam determinar uma chave secreta via comunicação por um canal não-seguro. A segurança do protocolo está relacionada com a dificuldade de resolver o logaritmo discretos módulo um número primo grande. Alguns anos depois, em 1977, Rivest, Shamir e Adleman propuseram o um criptossistema de chave pública e um sistema de assinatura digital, cuja segurança está relacionada a fatoração de um número inteiro grande. Esses trabalhos solidificaram a fundação da criptografia de chave pública e, desde então, diversos outros criptossistemas foram propostos se baseando no problema da fatoração de inteiros e no problema do logaritmo discreto (DLP). Em vez de explorar o DLP módulo um primo grande como base da criptografia, pode-se considerar o DLP em um grupo arbitrário que admitia uma representação eficiente de seus elementos. Nesse caso, dados dois elementos  $g$  e  $h$  no grupo  $G$ , onde  $h=g^x$ , o DLP se refere à determinação do expoente  $x$ . O motivo para considerar grupos arbitrários é que, em comparação com o DLP nos inteiros, o DLP geral é extremamente mais difícil, permitindo a utilização de parâmetros e chaves bem menores (implicando em menores pegadas e códigos) e, ainda assim, obter o mesmo nível de segurança. Em 1985, Miller e Koblitz (separadamente) propuseram o uso do grupo dos pontos de uma curva elíptica definida sobre um corpo finito. A eficiência está baseada na existência de uma fórmula simples para a soma de pontos na curva, permitindo uma aritmética rápida para adição no grupo dos pontos.

**Título do Projeto:** Teoremas Básicos da Geometria Algébrica

**Autores:** FREDERICO SERCIO FEITOSA (Orientador), VÍTOR CARREIRO RAMALHO, CAIO REZENDE MARQUES DOS SANTOS (Bolsista)

**Resumo:** Neste projeto estudamos a relação entre Álgebra e Geometria através dos teoremas clássicos da Geometria Algébrica. Conhecendo os objetos básicos de estudo de cada área, as variedades algébricas definidas por zeros de polinômios e os ideais radicais (logo ideais primos) de um anel quociente conseguimos estabelecer uma correspondência biunívoca entre estes objetos caracterizados por uma equivalência de categorias dada principalmente pelo Teorema dos Zeros de Hilbert. Analisamos também esta correspondência no caso projetivo que relaciona as variedades algébricas projetivas com os ideais radicais homogêneos, distintos do ideal trivial, de um anel quociente. A partir daí investigamos as interseções entre as variedades algébricas, incluindo as projetivas, através do Teorema de Bézout que estabelece a quantidade exata do número de pontos de interseção entre duas variedades projetivas, incluindo as suas multiplicidades.



**Título do Projeto:** Curvas Algébricas Planas: Cúbicas Não Singulares

**Autores:** FREDERICO SERCIO FEITOSA (Orientador), WALTER CÉSAR DA SILVA PIRES (Bolsista)

**Resumo:** O estudo da Geometria Algébrica se inicia na Itália nos anos 1910 e 1920, no qual pretendia reunir técnicas de Álgebra com a linguagem e os problemas de Geometria. Mas, os matemáticos gregos já sabiam efetuar cálculos elaborados, recorrendo a procedimentos geométricos. Essas construções que auxiliavam na resolução de problemas algébricas através de construções geométricas utilizavam retas e círculos, porém os matemáticos da Antiguidade estudaram outras curvas, geralmente descritas como o lugar geométrico de pontos satisfazendo certas condições. Logo, com a inclusão do método das coordenadas, proposto por Descartes, constatou-se que várias curvas que foram estudadas e analisadas nos primórdios da Geometria podiam ser descritas por equações polinomiais. Visto isto, este projeto de iniciação científica teve como objetivo inicial introduzir o estudo à Geometria Algébrica através das Cúbicas Não Singulares. Com o estudo das Curvas Algébricas focalizando o estudo das Cúbicas Não Singulares desenvolvemos ferramentas para estudos mais aprofundados e aplicados. Mostramos como principal resultado que toda cúbica não singular é congruente por uma projetividade a uma cúbica do tipo  $ZY^2 = X(X-Z)(X-\lambda Z)$ , e com isto conseguimos mostrar e provar que sobre uma cúbica definida uma certa operação entre seus pontos conseguimos uma estrutura de grupo com o conjunto de pontos que pertencem a ela. Portanto, com esta vantagem podemos utilizar cúbicas em diversas áreas do conhecimento, em especial, na criptografia de chave pública. Assim, munidas de tais ferramentas podemos aprofundar nossos estudos de curvas, especificamente no estudo de mais aplicações utilizando cúbicas não singulares e cúbicas em geral.

**Título do Projeto:** O ESTUDO DE EQUAÇÕES ELÍPTICAS VIA MÉTODOS VARIACIONAIS E NÃO VARIACIONAIS

**Autores:** LUIZ FERNANDO DE OLIVEIRA FARIA (Orientador), PABLO DOS SANTOS CORRÊA JUNIOR (Bolsista)

**Resumo:** Neste trabalho estudamos dois importantes métodos no estudo de equações diferenciais parciais, o método variacional e o método de Galerkin. Buscamos, por meio de dois problemas, analisar os pontos de convergências e divergências destas técnicas e para isto foi necessário abordar temas como medida e integração, análise funcional e parte da teoria envolvendo espaços de Soblev e suas imersões. Os mecanismos estudados possuem grande relevância na pesquisa em matemática na área de EDP's devido a sua plasticidade, isto é, capacidade de adequação a diferentes problemas e contextos. O aprendizado das teorias iniciais, como por exemplo medida e integração, se deu por meio de apresentações semanais e debates. Após este período foi abordado o artigo Métodos Variacionais em Equações Diferenciais, do Djairo G. de Figueiredo onde estudamos métodos variacionais em três problemas : um problema de contorno linear, não linear e superlinear. Em um segundo momento utilizamos o material do mini-curso Introdução às Equações Elípticas do Claudianor O. Alves, ministrado no primeiro encontro nacional de análise matemática e aplicações, e neste material estudamos o método de Galerkin.

**Título do Projeto:** Operadores hipercíclicos sobre espaços de Frèchet

**Autores:** ANDRE ARBEX HALLACK (Orientador), ARTUR ASSIS AMORIM (Bolsista)

**Resumo:** Nesta apresentação são definidos os operadores hipercíclicos sobre espaços de Frèchet: Um operador hipercíclico  $T$  sobre um espaço de Frèchet  $X$  é essencialmente um operadores linear e contínuo sobre  $X$  que admite um vetor  $v$  (chamado um vetor hipercíclico para  $T$ ) tal que a órbita de  $v$  sobre  $T$  ( $v, Tv, T(T(v)), \dots$ ) é densa em  $X$ . Apresentamos os exemplos clássicos de operadores hipercíclicos e o importante Critério de Hiperciclicidade: condição suficiente para se ter hiperciclicidade e que levou muito tempo para se mostrar que não é uma condição necessária. Observamos também os exemplos clássicos à luz do Critério de Hiperciclicidade.

**Título do Projeto:** SEQUÊNCIAS ABSOLUTAMENTE P-SOMÁVEIS, FRACAMENTE P-SOMÁVEIS E OPERADORES P-SOMANTES

**Autores:** CRISTIANE DE ANDRADE MENDES (Orientador), ELISABETH BRACHER DE ANDRADE SOARES (Bolsista)

**Resumo:** O trabalho realizado em 2018 e em 2019 baseia-se no estudo introdutório e na compreensão da definição de sequências fortemente  $p$ -somáveis, fracamente  $p$ -somáveis e operadores  $p$ -somantes, cujo título leva esse nome. Para o entendimento desse conceito, foi preciso fazer um estudo de alguns tópicos de análise: espaços métricos e normados, espaços de Banach, sequências e séries em espaços normados e operadores lineares definidos em espaços normados. O estudo dos operadores  $p$ -somantes, inicialmente conhecidos como "operadores semi-integrais à direita" ou "aplicações  $H$ -integráveis", iniciou-se com A. Grothendieck, em um trabalho publicado no Boletim da Sociedade Matemática de São Paulo em 1956. Contudo, a teoria de operadores absolutamente  $p$ -somantes ( $p > 0$ ) foi desenvolvida através dos estudos de A. Pietsch, em um trabalho realizado em 1967. Anos após, esse estudo sofreu contribuições de matemáticos como Pelczynski e Mitjagin. Esses operadores generalizam os definidos por Grothendieck que, inicialmente, estudou os operadores para  $p=1$  e  $p=2$  e são definidos como aqueles que levam sequências fracamente  $p$ -somáveis em sequências fortemente  $p$ -somáveis. A teoria dos operadores  $p$ -somantes vem sendo amplamente estudada pelos pesquisadores da área após os resultados de Pietsch, Mitjagin e Pelczynski.

**Título do Projeto:** Ciclos Hamiltonianos: alguns resultados e exemplos clássicos da Teoria dos Grafos

**Autores:** ANDRE ARBEX HALLACK (Orientador), ELIAS LOPES OLIVEIRA (Bolsista)

**Resumo:** Na Teoria dos Grafos, temos um pioneiro Teorema de Euler que caracteriza a existência dos hoje chamados passeios Eulerianos (em homenagem ao próprio Euler. Aliás, este Teorema é considerado como o primeiro na Teoria dos Grafos). Por outro lado, quando se trata da existência de ciclos Hamiltonianos (ciclos - passeios fechados onde apenas o nó inicial-final se repete - que percorrem todos os nós de um grafo), até hoje não se tem uma caracterização de tal existência, ou seja, não se conhece uma condição que seja necessária e suficiente para que um grafo admita um ciclo Hamiltoniano. Nesta apresentação (na qual são resumidos os principais tópicos estudados no projeto de IC), após rápida introdução com conceitos básicos da Teoria dos Grafos, são apresentadas algumas condições suficientes (Dirac, Ore, das arestas) e uma condição necessária (West) para que um grafo admita um ciclo Hamiltoniano, bem como alguns exemplos clássicos que ilustram tais resultados.

**Título do Projeto:** Estudo de ondas de combustão em meio poroso

**Autores:** GRIGORI CHAPIRO (Orientador), GIULIA CARVALHO FRITIS (Bolsista)

**Resumo:** Muitos princípios que regem nosso mundo podem ser bem descritos através de equações diferenciais, como o problema envolvendo ondas de combustão em meios porosos, sendo assim importante estudá-las para melhor entender e prever possíveis eventos. Infelizmente, nem sempre podemos resolver todos os problemas encontrados analiticamente, sendo assim necessário recorrer a ferramentas computacionais. Neste trabalho iremos utilizar diversos métodos numéricos para equações diferenciais ordinárias, e compará-los entre si.

**Título do Projeto:** Abordagem Econômica para Planejamento de Modelo Integrado de Confiabilidade e de Controle On-Line por Atributo com Inspeção Imperfeita

**Autores:** LUPERCIO FRANCA BESSEGATO (Orientador), JOÃO VITOR DE LIMA (Bolsista)

**Resumo:** O gráfico controle de Shewhart é provavelmente a mais utilizada das ferramentas de Controle Estatístico de Processo para se alcançar a estabilidade de processo de produção. Muitas características de qualidade não são medidas em uma escala contínua ou mesmo em uma escala qualitativa. Nesses casos, se ela possuir ou não certos atributos, julga-se cada unidade do produto como conforme ou não-conforme. Os gráficos de controle para tais características de qualidade são denominados gráficos de controle para atributos. Dentre esses, o gráfico de controle np monitora o número de itens defeituosos na amostra. Um fator importante no uso do gráfico de controle é seu planejamento, ou seja, a seleção do tamanho da amostra, dos limites de controle e da frequência da amostragem. Os critérios estatísticos para esse planejamento estão fundamentalmente associados à probabilidade de falso alarme e ao poder de o gráfico identificar alterações na fração de não conformidade do processo produtivo. Utiliza-se algoritmo genético para a busca dos valores ótimos dos parâmetros de planejamento que minimizam a taxa de alarme falso e maximizam o poder do gráfico para perceber alterações na proporção de itens defeituosos produzidos. O procedimento é ilustrado por um exemplo numérico. Os autores agradecem à FAPEMIG e ao CNPq o apoio financeiro concedido ao projeto.

**Título do Projeto:** ADESÃO AO CHECKLIST DE CIRURGIA SEGURA E SEU EFEITO NA INCIDÊNCIA DE EVENTOS ADVERSOS CIRÚRGICOS

**Autores:** RONALDO ROCHA BASTOS (Orientador), EDUARDO GONZAGA DE SOUZA, LUÍZA COSTA SOUTO (Bolsista), LUCIANE RIBEIRO, ANNA STEPHANY PEREIRA DSO SANTOS (Colaborador)

**Resumo:** Introdução: a adesão ao checklist (CL) de cirurgia segura reduz a incidência de eventos adversos (EA) em pacientes cirúrgicos, que são indicadores para avaliar a segurança do paciente e a qualidade dos serviços de saúde. Objetivo: Avaliar a adesão ao Checklist de Cirurgia Segura da Organização Mundial de Saúde (OMS) e seu efeito na incidência de eventos adversos cirúrgicos em pacientes submetidos a procedimentos cirúrgicos de todas as especialidades, em um hospital de referência do interior de Minas Gerais. Método: Estudo retrospectivo e documental realizado a partir da revisão de uma amostra de 851 prontuários de pacientes submetidos a procedimentos cirúrgicos nos anos de 2012 e 2015 (antes e após a implantação do CL). As incidências de EA nos dois anos estudados foram estimadas e posteriormente comparadas buscando identificar o efeito da utilização desse instrumento na segurança do paciente cirúrgico. A adesão ao CL foi avaliada a partir da verificação do preenchimento dos instrumentos de checagem que se encontravam disponíveis nos prontuários dos pacientes submetidos à cirurgia na amostra referente ao ano de 2015. Resultados: Os resultados preliminares obtidos pelo estudo sinalizam para um alto percentual de adesão ao checklist pela equipe cirúrgica. No entanto, encontramos uma baixa completude do instrumento, além de inconsistências em alguns itens de checagem. Os resultados referentes a ocorrência de EA e efeito do checklist ainda estão em fase de análise. Conclusão: O estudo proporcionou o exercício do raciocínio clínico cientificamente fundamentado nas condutas e seguimento dos casos estudados, além de propiciar a construção do conhecimento, tema do estudo, durante a revisão da literatura. Ademais, a pesquisa estimulou a troca de experiências durante as reuniões de consenso com os profissionais Enfermeiros e Médicos da instituição cenário do estudo, oportunizando o desenvolvimento de um trabalho multidisciplinar. Acredita-se que o material produzido por essa pesquisa poderá ser utilizado pela instituição parceira, demais instituições e profissionais de saúde para subsidiar discussões acerca da utilização do checklist de cirurgia segura para promover mudanças que visem a consolidação de boas práticas de segurança na assistência cirúrgica.



**Título do Projeto:** Gráficos Dinâmicos na Análise Exploratória de Dados Aplicada ao Ensino de Estatística e Probabilidade no Ensino Médio

**Autores:** LUPERCIO FRANCA BESSEGATO (Orientador), CALVIN SILVA RODRIGUES (Bolsista), FELIPE (Colaborador)

**Resumo:** A apresentação tem como finalidade a introdução de princípios gerais da Estatística e Probabilidade, os quais serão úteis qualquer que seja a área de conhecimento escolhida pelo aluno de ensino médio. Está fundamentado na análise exploratória de dados, a qual é uma abordagem estruturada e fundamental na investigação de padrões dos dados e suas relações, por meio do uso intensivo do pacote estatístico R, software de acesso livre e código aberto. A apresentação enfatiza o aspecto prático da metodologia por meio da exploração e análise de dados do IBGE, relacionados com situações contextualizadas na realidade cotidiana do aluno de ensino médio, auxiliando o ensino da Estatística e da Probabilidade por meio da didática pragmática. É apresentado gráfico dinâmico e interativo baseado na pirâmide demográfica do Brasil.

**Título do Projeto:** Aplicação de Aprendizagem Estatística a Modelo de Decisão em Gestão

**Autores:** LUPERCIO FRANCA BESSEGATO (Orientador), JOÃO VITOR DE LIMA, JÚLIO PIUBELLO DA SILVA CABRAL (Bolsista)

**Resumo:** Apresenta-se a aplicação de modelos de aprendizagem estatística em modelo de decisão em gestão da produção. Seu foco é avaliar e comparar o desempenho e a aplicabilidade de procedimentos estatísticos por meio de estudo de caso, com o intuito de verificar sua precisão e rapidez nas tarefas reais de agrupamento. Adota metodologias de busca e otimização baseadas em algoritmos evolucionários.

**Título do Projeto:** Vantagens e Desafios do Uso de Big Data de Registros Administrativos

**Autores:** MARCEL DE TOLEDO VIEIRA (Orientador), JOÃO GABRIEL MALAGUTI SOBRINHO, PEDRO HENRIQUE DE MESQUITA PACHECO, FILIPE OLIVEIRA FERNANDES (Bolsista)

**Resumo:** Estudos em Métodos Quantitativos para Avaliação de Impactos de Políticas Públicas cada vez mais vem considerando dados provenientes de fontes múltiplas, incluindo dados amostrais e registros administrativos. O maior benefício desta combinação é a ampliação do escopo das análises, o que não seria possível se estivessem disponíveis cada uma das bases de dados por si só. No Brasil, os dados longitudinais provenientes dos registros administrativos do Cadastro Único para Programas Sociais do Governo Federal (CadÚnico) é um instrumento que identifica e caracteriza as famílias de baixa renda onde são registradas informações que incluem as características da residência, identificação de cada pessoa, escolaridade, situação de trabalho e renda, dentre outras. O primeiro passo para um cidadão em situação de vulnerabilidade social poder se candidatar ao recebimento de benefícios sociais é o registro no CadÚnico, que serve como meio de seleção não apenas para o Programa Bolsa Família, mas também para uma série de programas sociais do governo. Esse sistema foi criado em julho de 2001 e tem a finalidade de realizar o cadastro e manutenção de informações de famílias brasileiras de baixa renda, com renda per capita inferior a meio salário mínimo ou renda familiar total de até 3 (três) salários mínimos. O cadastro das famílias é de responsabilidade dos municípios e as informações fornecidas são autodeclaradas mediante entrevista podendo ser de forma passiva, na qual o responsável familiar procura a unidade de atendimento e realiza o cadastro, ou de forma ativa, uma modalidade recente em que os agentes municipais buscam famílias pertencentes ao público-alvo dentro do município. A base de dados do CadÚnico conta com registros de aproximadamente cerca de 30 milhões de famílias, representando cerca de 100 milhões de brasileiros.

**Título do Projeto:** As contribuições do Estágio Docência na formação docente dos pós-graduandos

**Autores:** JOSE GUILHERME DA SILVA LOPES (Orientador), DRIELE CARLA SILVA MOTA (Bolsista), VÍCTOR GOMES LIMA FERRAZ (Colaborador)

**Resumo:** A LDB 9394/96 afirma que a pós-graduação strictu sensu ?é responsável por preparar os professores para o magistério no Ensino Superior? (BRASIL, 1996). No entanto, como ressaltam Pimenta e Anastasiou (2014), tais programas possuem maior enfoque na formação de pesquisadores. No Programa de Pós-Graduação em Química da UFJF, os pós-graduandos devem se matricular na disciplina de Estágio Docência, onde acompanham uma disciplina de graduação, elaboram e ministram de 2 a 4 aulas. No entanto, essas atividades muitas vezes não são construídas e discutidas com os docentes das disciplinas e pouco somam à formação docente do pós-graduando. Os dados foram obtidos por meio de um questionário online enviado por e-mail aos sujeitos da pesquisa. Estes são 15 estudantes de pós-graduação em Química, identificados como PGQX, que se matricularam no Estágio Docência durante o ano de 2018. Para a análise dos dados utilizamos a Análise de Conteúdo (BARDIN, 2011). Verificamos que todos demonstraram interesse em lecionar no Ensino Superior e a maioria citou o Estágio Docência e as tutorias como uma importante oportunidade de introdução à prática docente. No entanto, alguns revelaram que a formação na pós-graduação tem maior enfoque no desenvolvimento de pesquisas, deixando em segundo plano o preparo do aluno para a docência. Ao citarem o Estágio Docência, todos os pós-graduandos descreveram experiências com práticas docentes, onde tiveram oportunidade de lecionar, corrigir atividades e acompanhar os alunos no decorrer da disciplina, embora apenas em uma resposta foi possível perceber a oportunidade de reflexão sobre a prática docente. Dessa forma, é possível identificar que a prática docente tem relevante contribuição na formação dos alunos, mas ainda há desafios a serem superados. Referências BARDIN, L. Análise de conteúdo. Lisboa: Edições 70, 1977. BRASIL. Lei de Diretrizes e Bases da Educação Nacional, Lei nº9.394, 1996. PIMENTA, S. G., ANASTASIOU, L. G. C. Docência no ensino superior. 5ª edição. São Paulo: Cortez, 2014. TARDIF, M. Saberes docentes e formação profissional. 13ª ed. Petrópolis: Vozes, 2014.

**Título do Projeto:** Caracterização vibracional do comportamento térmico de nanocompósitos de MEH-PPV e nanopartículas de Au e Ag

**Autores:** CELLY MIEKO SHINOHARA IZUMI (Orientador), ALVARO CESAR CAGNIN BARRA (Bolsista)

**Resumo:** O polímero poli [2-metoxi-5-(2-etil-hexiloxi) -1,4-fenilenovinileno], (MEH-PPV) é um derivado do polímero poli (p-fenilenovinileno), (PPV). O MEH-PPV, é um polímero condutor, que possui propriedades luminescentes e eletroluminescentes. Utilizamos a espectroscopia Raman com o intuito de verificar o comportamento do MEH-PPV. Foram registrados espectros Raman com excitação em 785 nm em diferentes temperaturas (77 K até 573 K). Os espectros Raman sugerem que há uma diminuição do comprimento de conjugação com o aumento da temperatura. Os espectros Raman registrados acima da temperatura de degradação indicam que há uma distorção da estrutura planar ao redor do grupo vinileno. Posteriormente a estas análises foram sintetizadas nanopartículas metálicas de ouro e a outra de prata. As nanopartículas de ouro foram sintetizadas utilizando a partir da redução do  $\text{HAuCl}_4$  pelo citrato de sódio em meio alcalino. As nanopartículas de prata, foram sintetizadas através da redução de  $\text{AgNO}_3$  com  $\text{NaBH}_4$ . Essas nanopartículas foram utilizadas para a preparação de nanocompósitos de MEH-PPV contendo nanopartículas metálicas. A próxima etapa do trabalho será a avaliação do efeito das nanopartículas no comportamento térmico do MEH-PPV.

**Título do Projeto:** Degradação de paracetamol através da utilização de processos oxidativos avançados empregando metais de transição, agente oxidante e luz ultravioleta

**Autores:** LILIAN LUCIA ROCHA E SILVA (Orientador), RAFAEL DE OLIVEIRA (Bolsista)

**Resumo:** Uma grande quantidade de fármacos de diferentes classes é consumida anualmente em todo o mundo. A frequente ocorrência de fármacos no ambiente aquático e na água potável tem levantado à questão sobre o seu impacto no ambiente e na saúde pública. No entanto, a persistência destes resíduos no ambiente aquático é um reflexo de que os processos naturais de eliminação não têm sido eficientes para eliminá-los. O uso de processos oxidativos avançados (POAs), é um caminho alternativo para diminuir e eliminar resíduos de fármacos do meio ambiente. O paracetamol é altamente danoso para o fígado devido ao seu alto potencial hepatotóxico, não devendo ser utilizadas mais que 4000 mg diárias (8 comprimidos de 500 mg). De acordo com dados da literatura, cerca de 58 a 68% do paracetamol é excretado na urina durante o uso terapêutico. Assim, nesse projeto pretende-se estudar as potencialidades da degradação de paracetamol na presença dos metais de transição como Ag(I), Co(II), Mn(II) e Ni(II) para a ativação de agentes oxidantes como peróxido de hidrogênio (H<sub>2</sub>O<sub>2</sub>) e persulfato de potássio (K<sub>2</sub>S<sub>2</sub>O<sub>8</sub>), em conjunção com luz ultravioleta (UV), com o objetivo de verificar os metais favoráveis para a decomposição dos agentes oxidantes a serem estudados obtendo-se assim alta eficiência na degradação de paracetamol em meio aquoso. A taxa de degradação de paracetamol será monitorada por espectrometria de absorção molecular na região do ultravioleta/visível (UV-Vis), constituindo o presente projeto um estudo em Química ambiental e de degradação de contaminantes emergentes.

**Título do Projeto:** PREPARAÇÃO DE NANOSSISTEMAS COM PROPRIEDADES ÓPTICAS, CATALÍTICAS E ARRANJOS SUPRAMOLECULARES CONTROLADOS

**Autores:** GUSTAVO FERNANDES SOUZA ANDRADE (Orientador), JOÃO MARCOS BERALDO CANDIDO, NAIANE APARECIDA GUILHERME, RAISSA BOSICH ANTUNES JAMBO, BEATRIZ ROCHA DE MORAES (Bolsista), LINUS PAULING DE FARIA PEIXOTO (Colaborador)

**Resumo:** A ressonância de plasmon de superfície localizado (LSPR) é um fenômeno associado a alguns metais em escala nanométrica. A frequência em que se observa a LSPR é dependente do ambiente químico dos nanomateriais, o que torna o fenômeno interessante para biossensoriamento, já que é possível modificar a superfície de nanopartículas de metal para que seja possível fazer o reconhecimento molecular e obter informações relacionadas à concentração dos materiais pela variação da banda de LSPR. No presente trabalho foram preparados nanobastões de Au por via úmida. Esses nanobastões foram modificados quimicamente por albumina de soro bovino. Os nanobastões modificados foram imobilizados em vidro. Os materiais resultantes foram utilizados para detectar o anticorpo da albumina de soro bovino. O dispositivo resultante foi utilizado para detectar a presença do anticorpo através da exposição a solução com o anticorpo e acompanhamento do deslocamento da banda de ressonância de plasmon de superfície localizado.

**Título do Projeto:** Avaliação do estudo da lixiviação dos metais oriundos de bráquetes de aparelhos ortodônticos fixos em saliva artificial

**Autores:** DENISE LOWINSOHN (Orientador), ANA LUIZA SANTOS FAGUNDES COSTA (Bolsista), TAIMARA POLIDORO FERREIRA (Colaborador)

**Resumo:** Foi possível investigar o processo de lixiviação dos bráquetes de aparelhos ortodônticos fixos, através dos estudos das variáveis: tempo e temperatura.



**Título do Projeto:** DESENVOLVIMENTO DE METODO POR ELETROFORESE CAPILAR UV-VIS/MS PARA DETERMINAÇÃO DE H<sub>2</sub>S, HS<sup>-</sup> E S<sub>2</sub><sup>-</sup> LIBERADOS NO CULTIVO DE BACTÉRIA BRS EM PRESENÇA DE FERRO: SUA IMPORTÂNCIA NO PROCESSO DE BIOCORROSÃO.

**Autores:** MARCONE AUGUSTO LEAL DE OLIVEIRA (Orientador), LARISSA DOS ANJOS CASTRO (Bolsista)

**Resumo:** O projeto contempla estudos para o desenvolvimento de um método por eletroforese capilar UV-Vis/MS, para determinação das espécies H<sub>2</sub>S, HS<sup>-</sup> e S<sub>2</sub><sup>-</sup> em tanques de petróleo. Esse estudo utiliza a construção e interpretação de curvas de mobilidade efetiva em função do pH, para a seleção do eletrólito de corrida mais adequado para a separação, assim como do pH de trabalho, objetivando a análise simultânea das espécies de enxofre envolvidas no processo de biocorrosão. Esse processo pode ser causado por bactérias redutoras de sulfato (BRS) de ferro férrico e metanogênicas, produzindo sulfeto de hidrogênio (H<sub>2</sub>S), sendo esse considerado um dos principais problemas na indústria do petróleo. Nessa hipótese, uma longa busca científica foi e está sendo realizada para a identificação das formas de enxofre em estados de oxidação diferentes, presentes na natureza, que fazem com que o ciclo do enxofre apresente transformações oxidativas e redutivas, que influenciam na biocorrosão do petróleo.

**Título do Projeto:** Avaliação da inibição da formação da  $\beta$ -hematina de complexos metálicos com atividade anti-malárica

**Autores:** MARIBEL COROMOTO NAVARRO ACOSTA (Orientador), JAQUELINE DE ALMEIDA CELESTINO (Bolsista)

**Resumo:** Avaliação da inibição da formação da  $\beta$ -hematina de complexos metálicos com atividade anti-malárica. A malária é a doença parasitária que causa maior morbidade e mortalidade no mundo e o Brasil é responsável por 22% dos casos na América Latina, sendo que a maior área de risco é a região amazônica<sup>1</sup>. A malária é causada pelo protozoário do gênero Plasmodium e é transmitida ao homem através da picada do mosquito fêmea Anopheles.<sup>2</sup> A cloroquina foi o fármaco mais bem sucedido para o tratamento da malária e por um longo período foi utilizada de forma contínua para fins de profilaxia, gerando assim a resistência do parasita à quimioterapia, ocasionando seleção e multiplicação de parasitas resistentes. Assim, atualmente o tratamento é baseado na utilização de uma combinação entre dois ou mais fármacos.<sup>3</sup> O mecanismo de ação mais aceito para a cloroquina é a inibição da formação da hemozoína que ocorre na fase intra-eritrocítica.<sup>4</sup> O parasita que invade o eritrócito digere a hemoglobina liberando os aminoácidos e o grupo heme. Este grupo heme livre é altamente tóxico para o parasita, assim o mecanismo encontrado pelo parasita para a remoção do grupo heme livre é promover a formação da hemozoína, que é um cristal formado por dímeros do grupo heme ligados através do ferro com os grupos carboxilato das cadeias laterais da porfirina, que é altamente insolúvel e não-reativa.<sup>2</sup> Desta forma, os fármacos atuam concentrando-se no vacúolo alimentar do parasita e interagem com a hematina livre dificultando, conseqüentemente, a cristalização em hemozoína. Assim, a hematina interage com as membranas e exerce efeitos tóxicos severos, matando o parasita por meio do estresse oxidativo. O estudo da inibição da formação da  $\zeta$ -hematina é uma das abordagens que podem ser utilizadas na busca de novos compostos antimaláricos. Diversos métodos tem sido estudados e utilizados para detectar e medir a formação da  $\zeta$ -hematina.<sup>5</sup> Neste trabalho realizou-se a avaliação da interação dos antimaláricos com a hemina através de titulação espectroscópica no UV-Vis e também a inibição da formação da  $\zeta$ -hematina através do ensaio baseado no infravermelho. Referências: 1. WHO. World malaria report 2018. Disponível em: <https://www.who.int/malaria/publications/world-malaria-report-2018/report/en/>. Acesso em: 19 de agosto de 2019. 2. Francisco, A. I. - Vargas, M. D. Ferroquina: O Antimalárico do Futuro. Rev. Virtual Quim, v. 2, n. 2, p. 118-129, 2010. 3. França, T.C.C. - Dos Santos, M. G. - Figueroa-Villar, J. D. Malária: Aspectos históricos e quimioterapia. Química Nova, v. 31, n. 5. p. 1271-1278, 2008. 4. Biot, C. - Castro, W. - Botté, C.Y. - Navarro, M.. The therapeutic potential of metal-based antimalarial agents: Implications for the mechanism of action. Dalton Transactions, v. 41, p. 6335-6349, 2012. 5. Navarro, M. - Castro, W. - Martínez, A. - Sánchez-Delgado, R. A. The mechanism of antimalarial action of [Au(CQ)(PPh<sub>3</sub>)]PF<sub>6</sub> : Structural effects and increased drug lipophilicity enhance heme aggregation inhibition at lipid/water interfaces. Journal of Inorganic Biochemistry, v.105, n. 2, p. 276-282, 2011.

**Título do Projeto:** Avaliação da interação dos complexos metálicos bioativos com o DNA

**Autores:** MARIBEL COROMOTO NAVARRO ACOSTA (Orientador), CASSIANO CUNHA DE SOUZA (Bolsista)

**Resumo:** O DNA é um biomacromolécula de grande importância, uma vez que exibe funções essenciais a vida em sistemas biológicos, como a síntese de proteínas e o armazenamento de informações genéticas. A presença de uma estrutura rica em composição química garante uma variedade de modos de combinação complexo metálico - DNA, que podem ser benéficos para novas terapias. Nesse contexto, tal molécula torna-se um alvo interessante para fármacos, uma vez que uma possível interação com ela pode gerar a eliminação de agentes patogênicos. Ao longo do tempo, a comunidade científica conseguiu construir alguns métodos de avaliação das interações entre espécies químicas e o DNA. Sendo assim, o presente trabalho se concentra no estudo da viscosidade e na utilização da titulação espectrofotométrica para compreender parte do comportamento químico dos complexos metálicos na presença do biopolímero.

A titulação espectrofotométrica baseia-se na alteração das propriedades de absorvidade do composto de coordenação, na região do UV-vis, na qual são realizadas adições sucessivas de alíquotas fixas de uma solução de DNA. Logo, lançando mão da equação de Benesi-Hildebrand, há a linearização desses dados e a determinação da constante de ligação (Kb). Tal parâmetro define-se há interação ou não entre o composto e o DNA. No que tange o estudo de viscosidade, há a avaliação da existência de interações não covalentes do tipo intercalação e interações covalentes. A intercalação trata-se da inserção do composto em questão entre as bases nitrogenadas do DNA, o que gera uma desestruturação da dupla-hélice, culminando no alongamento da mesma. Portanto, do ponto de vista experimental, observa-se o aumento da viscosidade do sistema a medida em que se aumenta a concentração do intercalador. Por outro lado, as interações covalentes pelos grupos fosfato dobram a dupla-hélice, tal fenômeno é conhecido na literatura internacional como "phosphate clamp". Assim, há uma diminuição da viscosidade.

Ao associarmos as técnicas supracitadas com outros experimentos é viável sugerir algum mecanismo de ação para os fármacos. No presente estudo, foi possível concluir que o composto MNCS-73 apresenta interação com o DNA e o composto MNJA ? 117 não apresenta intercalação. FARREL, N. et al. Molecular methods for assesment of non-covalent metallodrug-DNA interactions. Chem. Soc. Rev., 2019,48, 971-988.

**Título do Projeto:** Síntese, caracterização e atividade biológica de complexos metálicos.

**Autores:** ALEXANDRE CUIN (Orientador), KAÍQUE ALEXANDRE D´OLIVEIRA (Bolsista)

**Resumo:** A Química Bioinorgânica estuda as funções, metabolismo e aplicações de íons inorgânicos e seus respectivos complexos em sistemas biológicos, correlacionando assim a atividade biológica apresentada por um sistema inorgânico com suas características estruturais e eletrônicas, atribuídas aos constituintes químicos presentes na estrutura a ser estudada. Dessa forma, a síntese, caracterização e estudo de complexos de coordenação contendo ligantes com atividades biológicas e metais constituintes do sistema biológico são de suma importância. O uso de bases de Schiff (azometina ou iminas) como ligantes em compostos de coordenação vem crescendo a fim de estudar suas propriedades químicas e biológicas. Isso deve-se a estas moléculas possuírem uma grande versatilidade em formar estruturas químicas com diferentes grupos orgânicos. As tiossemicarbazonas são amplamente estudadas, devido à tiossemicarbazida apresentar importantes atividades antitumoral, antiviral e antibacteriana, onde são observadas se tais propriedades permanecem em seus respectivos complexos. Por fim, esta é uma importantíssima classe de compostos orgânicos com amplas aplicações, devido à sua relativa facilidade em síntese e purificação. Este projeto teve como foco, obter bases de Schiff a partir da Tiossemicarbazida e aldeídos/cetonas, e através destas obter seus respectivos complexos metálicos para estudos biológicos, utilizando metais de transição ( $Ag^+$ ,  $Au^{+3}$ ,  $Fe^{2+/3}$ ,  $Zn^{2+}$ ) como potenciais modificadores de sistemas biológicos. Para a síntese das amostras foram utilizadas rotas sintéticas utilizando refluxo sob condições controladas de temperatura e pH. As caracterizações estrutural e óptica deram-se via Difração de raios X, espectroscopias no Raman e IR e CHN.

**Título do Projeto:** SÍNTESE E CARACTERIZAÇÃO DE COMPLEXOS DE Ag(I) COM DERIVADOS DA ISONIAZIDA E PIRAZINAMIDA

**Autores:** ALEXANDRE CUIN (Orientador), BIANCA MENDES SILVA (Bolsista)

**Resumo:** Atualmente há vários complexos metálicos com aplicações medicinais descritos na literatura. Especificamente, os compostos contendo os íons metálicos  $VO_2^+$ , Ag(I), Au(I/III), Pt(II), Pd(II) e Ru(II/III) têm demonstrado excelentes resultados no tratamento e no combate de diversas enfermidades, vírus e bactérias. Nosso grupo de pesquisa tem obtido complexos ativos contra a Tuberculose, onde resultados biológicos preliminares demonstraram que complexos de Ag(I) com (isoniazida+salicilaldeído, o-,m-,p-vanilina) possuem concentração inibitória mínima (CIM) abaixo de 0,50mgL<sup>-1</sup> sendo mais de 15 vezes potente que o composto comercial sulfadiazina de prata (CIM 7,80mgL<sup>-1</sup>). Visando um fármaco contra parasitas causadores da Leishmania, sintetizamos um complexo de vanádio como ligante partir do o-fenildiamina e salicilaldeído, onde esse complexo mostrou ação leishmanicida nos parasitas em suas formas promastigota, amastigota e em macrófagos, com concentração inibitória de 6,65, 3,51 e 24,3  $\mu\text{molL}^{-1}$ , respectivamente, sendo mais ativo que a metilfosina (fármaco comercial contra leishmania). No intuito de se aprofundar os estudos biológicos e na obtenção de diversos novos complexos metálicos, esta proposta, pretende sintetizar, caracterizar e estudar as propriedades biológicas de complexos envolvendo os íons metálicos acima citados com derivados da isoniazida e da pirazinamida (drogas utilizadas contra a tuberculose) com os aldeídos naturais salicilaldeído, o-,m-,p-vanilina, benzaldeído, p-,o-anisalaldeído, 2-tiofenocarboxaldeído, citral e cinamalaldeído, que podem gerar mais de uma centena de compostos. Após a obtenção e total caracterização dos compostos, há a previsão de testes contra M.tuberculosis e bactérias Gram-positivas e negativas para complexos de Ag(I), Au(I) e Ru(II), teste de viabilidade celular e citotoxicidade nos complexos de Au(III), Pt(II) e Pd(II), e testes contra leishmania para complexos de  $VO_2^+$  e Ag(I).

**Título do Projeto:** Síntese e caracterização de complexos de Ag(I) com derivados de aldeídos naturais e sulfas

**Autores:** ALEXANDRE CUIN (Orientador), THAMYRES GOMES DE ALMEIDA (Bolsista)

**Resumo:** Nosso grupo de pesquisa vem trabalhando na determinação de estrutura de complexos de prata com ligantes sulfas, onde um dos trabalhos reportados foi o de NAKAHATA e col., na síntese de complexos de prata com o ligante Sulfametoxidiazina onde o complexo mostrou-se ser ativo contra cepas Gram-negativo E. coli e P. Aeruginosa (NAKAHATA et al. 2016). Outro trabalho foi a sínteses de complexos de prata com ligantes sulfisoxazol e sulfadimetoxina, tendo resultados biológicos eficazes contra cepas Gram-positivas e Gram-negativas (FIORI et al., 2017). Esses trabalhos avaliaram a relação estrutura-eficácia antibacteriana de vários complexos de prata com sulfonamidas. Portanto, a classe de compostos "sulfas" ainda despertam grande interesse da comunidade científica, pois pequenas mudanças estruturais ou a incorporação de íons metálicos em sulfas reconhecidamente ativas contra bactérias podem originar novos fármacos contra a TB. Nesse sentido, as seguintes sulfas: sulfacetamida, sulfadiazina, sulfapiridina, sulfadimetoxina, sulfametoxidiazina, sulfafurazol, sulfametoxazol e sulfatiazol com aldeídos naturais, salicilaldeído e o-vanilina podem originar novos compostos híbridos mantendo-se a porção biológica das sulfas

**Título do Projeto:** COMPOSIÇÃO QUÍMICA DO ÓLEO ESSENCIAL DE FOLHAS, CAULES E INFLORESCÊNCIAS DE *Peperomia magnoliifolia* (JACQ.) A. DIETR. (PIPERACEAE)

**Autores:** LEOSVALDO SALAZAR MARQUES VELOZO (Orientador), BEATRIZ OLIVEIRA COELHO (Bolsista), ADEMAR ALVES DA SILVA FILHO, PRISCILA DE FARIA PINTO (Colaborador)

**Resumo:** Introdução: *Peperomia magnoliifolia* (Jacq.) A. Dietr. (Piperaceae) é uma planta herbácea e suculenta, de folhagem decorativa, nativa nas principais regiões tropicais do Brasil, com ampla distribuição na Mata Atlântica. Objetivos: Este trabalho tem como objetivo o estudo da composição do óleo essencial de folhas, caules e inflorescências de *P. magnoliifolia*. Metodologia: Folhas, caules e inflorescências de *P. magnoliifolia* coletados separadamente no Horto Medicinal da Faculdade de Farmácia, UFJF, Juiz de Fora, MG foram reduzidos a pequenos fragmentos e submetidos à hidrodestilação (HD) por 2h em aparelho de Clevenger, para obtenção e caracterização do óleo essencial. A análise dos componentes da fração volátil obtida foi feita por cromatografia com fase gasosa acoplada à espectrometria de massas (GC-MS) em aparelho QP10000 Shimadzu, a 70 eV provido de uma coluna ZB-5MS (30m x 0,25mm x 0,25µm), injetor a 260°C, interface a 200°C, operando com variação de temperatura de 60°C a 240°C (3°C/min) sendo hélio o gás de arraste (1ml/min). Foi preparada uma solução de óleo essencial obtido com concentração de 1mg/ml (CHCl<sub>3</sub>) e 1µl da amostra foi injetada no GC-MS. A identificação dos constituintes do óleo essencial foi feita através do cálculo dos índices de retenção (IR) de cada substância e posterior comparação com o banco de dados do espectrômetro (biblioteca NIST) e a literatura especializada. Os IR's foram obtidos com base na curva padrão, elaborada com os tempos de eluição dos componentes de uma mistura constituída por uma série homóloga de hidrocarbonetos contendo de 8 - 26 átomos de carbono. Resultados e Discussão: A análise dos óleos essenciais permitiu identificar, como componentes majoritários, nas folhas β-mirceno - 65,06%, α-pineno - 16,75% e terpinoleno - 8,59% - nos caules β-mirceno - 39,38%, α-pineno - 30,41% e terpinoleno - 10,33% e nas inflorescências α-pineno- 29,32%, β-mirceno - 22,36 e terpinoleno - 21,75%. Foram identificados 100,00% da composição do óleo essencial, pelo método de HD. Os constituintes identificados são monoterpenos, metabólitos usados na produção de perfumes. Conclusão: *Peperomia magnoliifolia* é uma fonte renovável de monoterpenos. Agradecimentos: FAPEMIG, CAPES, CNPq.

**Título do Projeto:** Redes Metal-orgânicas de nova geração

**Autores:** FLAVIA CAVALIERI MACHADO (Orientador), CAIO MARTINS DE ALMEIDA MAGALHÃES, KAMILLA DE BARROS ABDO (Bolsista)

**Resumo:** As redes metalo-orgânicas (MOFs, metal-organic frameworks) são materiais porosos altamente cristalinos que são compostos por sais metálicos e ligantes orgânicos. Embora o foco inicial no campo das MOFs tenha sido sua síntese e caracterização estrutural, um aumento no número de MOFs que agora estão sendo explorados pelas propriedades físico-químicas tem sido observado. As MOFs atraem cada vez mais atenção devido a suas possíveis aplicações em diversas áreas, incluindo: catálise, armazenamento e separação de gases, entrega de medicamentos e outras. O maior entendimento de sistemas supramoleculares em associação com promissores aspectos de relevância tecnológica permite a produção de materiais porosos com propriedades fluorescentes para aplicação em dispositivos eletroluminescentes. Nesse trabalho foi sintetizada uma MOF de Tb(III) a partir da reação com os ligantes 1,3-bis(4-piridil)propano e o ácido 2-furóico, que apresentou fotoluminescência verde sob a ação da luz ultra-violeta. Esse composto apresenta potencial aplicação na construção de um dispositivo eletroluminescente.



**Título do Projeto:** Síntese e Caracterização de Redes Orgânicas Metálicas e Covalentes (MOFS e COFS) Contendo Ligantes Nitrogenados e Oxigenados

**Autores:** CHARLANE CIMINI CORREA (Orientador), GABRIEL BARBOSA SOUZA, JULIA BRUCE ALVES (Bolsista)

**Resumo:** As redes metalorgânicas porosas (MOFS) são uma classe dos polímeros de coordenação com notáveis propriedades físico-químicas e aplicações como estocagem de gases, catálise, entre outras. Devido a essas aplicações, o objetivo do trabalho é a síntese de novos polímeros de coordenação utilizando ligantes Oxigenados e metais de transição. Anteriormente pelo grupo de pesquisa um polímero (PC4), foi sintetizado utilizando os ligantes, Ácido Trimésico (B) e Ácido Glutárico (F). O sal metálico utilizado foi o Acetato de Manganês e os solventes H<sub>2</sub>O e DMSO. O ligante B é um composto orgânico rígido, enquanto o ligante F é um composto mais flexível devido a sua cadeia alifática. Ambos os ligantes são capazes de se coordenar ao íon metálico na forma monodentada, bidentada, ou até mesmo formando quelatos. Após a reação obteve-se uma rede tridimensional trinuclear, onde o solvente utilizado DMSO forma uma ponte oxometálica. Com base nessa estrutura, foi pensado na possibilidade de alterar a SBU desse composto, ou seja, a unidade secundária de construção da rede, através da alteração dos solventes utilizados no processo de síntese. Com base nessa ideia, uma nova síntese foi proposta, alterando os solventes utilizados, constatando após a análise de DRX por monocristais que uma nova rede tridimensional (GAB47), com uma estrutura distinta e uma SBU infinita foi obtida. Os grupos carboxilatos nessa rede encontram-se todos desprotonados. Esse composto também foi caracterizado por DRX por policristais, atestando a sua pureza cristalina. Com isso, podemos concluir que a alteração dos solventes ocasionou na mudança da SBU, criando uma nova estrutura polimérica.

**Título do Projeto:** Síntese, Estudo Topológico e Mapas de interação de Redes Metalorgânicas através dos Ligantes N- e O- Doadores.

**Autores:** CHARLANE CIMINI CORREA (Orientador), THALISON LUNA GOMES E SILVA (Bolsista), TALITA VALVERDE FERREIRA DA SILVA (Colaborador)

**Resumo:** As redes metalorgânicas porosas (MOFs) são descritas como sendo uma subclasse dos polímeros de coordenação, formando circuitos de átomos que podem se estender uni, bi ou tridimensionalmente. Sua estrutura apresenta sítios ativos para interação com moléculas convidadas resultando em uma gama de aplicações, como estocagem de gases, transporte de fármacos, sensores e catálise. Essas aplicações se devem a algumas características estruturais tais como tamanho do poro, robustez e a estabilidade térmica. Para a obtenção de MOFs é necessário recorrer a diversas estratégias e metodologias sintéticas. Para o primeiro estudo, escolheu-se a HKUST-1. O objetivo é a síntese e caracterização deste composto, seguida da adsorção de nanopartículas de ouro e posterior estudo das possíveis aplicações da MOF. A rota de síntese escolhida foi proposta por Khoshhal em 2015 que consiste na reação de nitrato de cobre tri-hidratado e ácido 1,3,5-benzenotricarboxílico. Após o término da síntese foi obtido um pó azul, característico da MOF. Para a caracterização deste composto foram utilizadas técnicas como a difração de raios X e espectroscopia na região do infravermelho (IV). A partir da análise do difratograma e do espectro IV, os resultados indicam que o composto produzido é a HKUST-1. Por outro lado os metaloligantes são uma boa alternativa para a obtenção de MOFs quando empregados como um bloco uma vez que possuem sítios de ligação disponíveis e de geometria adequada para a expansão polimérica da estrutura. Utilizando os metaloligantes, um ou mais centros metálicos podem ser incrementados ao sistema levando a obtenção de redes heterometálicas. O 2,5-piridinodicarboxilato tende a formar anéis quelatos de 5 membros produzindo complexos que apresentam regiões de geometria adequada para a expansão polimérica. Neste estudo foram utilizados complexos de Cobre e Manganês obtidos pelo grupo de pesquisa, a fim de empregá-los como metaloligantes. Foi realizada análise cristalográfica pelos mapas de interação e um estudo topológico para se avaliar com precisão a estrutura das MOFs obtidas.

**Título do Projeto:** CICLOADIÇÃO [2+2] ENTRE AZALACTONAS VIA CATÁLISE FOTO REDOX MEDIADA POR LUZ VISÍVEL

**Autores:** GIOVANNI WILSON AMARANTE (Orientador), ANA FLAVIA DOS SANTOS FUZARO, LARISSA PINTO SILVA, RÔMULO FERREIRA DA CUNHA PEREIRA (Bolsista), ISABELLA FLORES DE SOUZA MARRA (Colaborador)

**Resumo:** Neste trabalho foi proposto o desenvolvimento de uma nova metodologia em Síntese Orgânica para o preparo de anéis ciclobutanos altamente funcionalizados de forma estereosseletiva. Os ciclobutanos, de forma geral, são estruturas químicas com potencial biológico bastante destacado, como por exemplo, antimicrobiano, antibacteriano e carcinogênico. Os métodos sintéticos disponíveis para seu preparo incluem as reações de cicloadição [2+2]. A abordagem adotada neste trabalho inclui a cicloadição [2+2] em combinação com a irradiação pela luz visível na presença de um fotocatalisador. Dentro dessa abordagem foram preparados uma série de ciclobutanos análogos dos ácidos truxínicos e 1,2-diamino truxínicos em bons rendimentos e completo controle da estereoquímica relativa. Ainda, pela primeira vez, a regioseletividade do produto de cicloadição, denominada cabeça-cabeça, foi alcançada. Além disso, foi possível combinar, em um processo denominado "one-pot" a catálise foto redox e a catálise por ácido de Bronsted em uma funcionalização na abertura do anel azalactônico, posterior a cicloadição. Por fim, os dados obtidos neste trabalho foram parte de um trabalho que foi publicado em uma revista de alto impacto na área de Química Orgânica, o Journal of Organic Chemistry.

**Título do Projeto:** SÍNTESE DE DERIVADOS DE PRODUTOS NATURAIS, CANDIDATOS A NOVOS AGENTES ANTI-DENGUE

**Autores:** MAURO VIEIRA DE ALMEIDA (Orientador), CAROLINA SOUSA PONCIANO, LUÍS FERNANDO VALIAS SILVA (Bolsista), LARISSA ALBUQUERQUE DE OLIVEIRA (Colaborador)

**Resumo:** Compostos de origem natural podem ser utilizados como agentes terapêuticos para uma grande gama de doenças. Estes também podem tornar-se excelentes compostos-protótipos para desenvolvimento de derivados e análogos mais potentes ou com melhoria de alguma propriedade biológica ou físico-química que permita que sejam utilizados como fármacos. &nbsp; - &nbsp; - Flavonoides e isoflavonoides, como a genisteína, a quercetina e a naringenina, possuem várias atividades biológicas e farmacológicas tais como antioxidantes, anti-hipertensivos, antitumorais, anti-inflamatórias, antialérgicas, antivirais e contra esclerose múltipla. &nbsp; - Dessa forma, esse projeto trata da preparação, purificação, caracterização e avaliação biológica de diferentes derivados do composto natural naringenina, visando a obtenção de novos compostos com potente ação biológica, principalmente contra os vírus da dengue, zika e zika e chikungunya. Para obtenção dos novos derivados a naringenina será tratada com diferentes reagentes, os produtos serão purificados e analisados por técnicas de caracterização com Infravermelho e RMN.

**Título do Projeto:** SÍNTESE E AVALIAÇÃO BIOLÓGICA DE PIRAZÓIS DI- E TRISSUBSTITUÍDOS A PARTIR DE CHALCONAS E HIDRAZINAS

**Autores:** MARA RUBIA COSTA COURI (Orientador), ANA CLARA ALVES BRANCO (Bolsista), KARINE BRAGA ENES (Colaborador)

**Resumo:** Azóis são heterociclos aromáticos contendo um átomo de nitrogênio e outro heteroátomo dispostos na posição 1,2 de um anel de cinco membros. Compostos azólicos representam um papel importante na química medicinal e de materiais, servindo como modelos para o desenvolvimento de uma grande diversidade de novos compostos. Esse trabalho consistiu na síntese e avaliação da atividade citotóxica de dez derivados pirazólicos. A síntese se iniciou pela síntese de diferentes chalconas pela reação de aldeídos aromáticos com acetofenonas em meio etanólico básico. Uma vez obtidas as chalconas, as mesmas foram submetidas à reação com p-toluenossulfonilhidrazida na presença de quantidades catalíticas de iodo em meio etanólico de K<sub>2</sub>CO<sub>3</sub> obtendo-se assim os derivados pirazólicos. Todos os compostos sintetizados tiveram suas estruturas elucidadas através de espectros de infravermelho e de RMN de <sup>1</sup>H e <sup>13</sup>C. Os pirazóis sintetizados neste trabalho foram testados quanto a sua atividade citotóxica e a partir dos resultados, pode-se dizer que pirazóis derivados da acetofenona sem substituinte são mais ativos e mais seletivos frente a linhagem celular CT26, e que a presença de bromo como substituinte no anel aromático pode favorecer a atividade citotóxica e que tal atividade é dependente do sinergismo dos dois substituintes nos anéis aromáticos.

**Título do Projeto:** SÍNTESE E AVALIAÇÃO DA AÇÃO ANTITUMORAL DE DERIVADOS 1,2,4-OXADIAZÓLICOS EM MODELOS IN VITRO

**Autores:** MARA RUBIA COSTA COURI (Orientador), FILLIPE CAITANO CALZAVARA, LETÍCIA DA SILVA SANT'ANNA (Bolsista), CAMILLE CARVALHO DE MENDONÇA (Colaborador)

**Resumo:** O câncer está entre um dos maiores causadores de morte no mundo. Sabendo que existem padrões crescentes de incidência e mortalidade, e que há uma deficiência do arsenal quimioterapêutico, a sociedade científica procura novos compostos com atividade tumoral que apresentem maior eficácia no tratamento e alta seletividade. Tendo em vista o panorama, esse trabalho consistiu na síntese e avaliação da atividade antitumoral de oito derivados 1,2,4-oxadiazólicos. A síntese se iniciou pela reação de nitrilas aromáticas com hidroxilamina, gerando duas amidoximas distintas. Em seguida a reação das hidroxilaminas com brometo de bromo acetila seguido de ciclização, levou a obtenção de dois intermediários 5-(bromometil)-1,2,4-oxadiazol aromáticos. A reação desses intermediários com piperazina levou a obtenção de outros dois derivados oxadiazólicos. Por fim os dois derivados contendo piperazina sofreram reação de N-alquilação com haletos de alquila de cadeia longa levando a obtenção de oito compostos. Todos os compostos sintetizados tiveram suas estruturas elucidadas através de espectros de infravermelho e de RMN de  $^1\text{H}$  e  $^{13}\text{C}$ . Todos os compostos foram avaliados com relação a atividade antitumoral através do ensaio de citotoxicidade e determinação do  $\text{IC}_{50}$  em linhagens de células animais. Os compostos sintetizados apresentaram citotoxicidade e seletividade significativas frente as linhagens de células animais destacando-se os resultados citotóxicos para três intermediários oxadiazólicos que estão entre os compostos mais citotóxicos, com valores de  $\text{CI}_{50}$  entre 6,0 e 7,8 micromolar para a linhagem celular B16F10 e valores de  $\text{CI}_{50}$  entre 2,5 e 7,9 micromolar para a linhagem celular CT26.WT, sendo que um dos compostos foi mais ativo que o controle positivo, a daunorrubicina, e cerca de dez vezes mais seletivo para a linhagem CT26.WT em relação à linhagem celular não tumoral BHK-21.

**Título do Projeto:** Efeito da hidrólise da lactose e adição de maltodextrina em leite em pó de cabra.

**Autores:** RODRIGO STEPHANI (Orientador), ELZA SALES QUEIROZ, ALICE SARAIVA DE ALMEIDA (Bolsista), IGOR LIMA DE PAULA, ITALO TULER PERRONE, LUIZ FERNANDO CAPPAS DE OLIVEIRA (Colaborador)

**Resumo:** O leite de cabra em pó com baixo teor de lactose é um produto inovador e ainda pouco estudado na literatura. No processo de hidrólise da lactose originam-se dois novos açúcares redutores (glicose e galactose). O aumento desses açúcares intensifica a reação de Maillard podendo resultar no escurecimento não enzimático do alimento. Com isto, o objetivo deste estudo foi caracterizar a cor e quantificar a concentração do 5-hidroximetilfurfural (HMF) como indicador da intensidade do tratamento térmico em leite em pó de cabra: tradicional (controle), com hidrólise da lactose (hidrolisado) e com hidrólise da lactose adicionado de maltodextrina (composto). Foram realizadas análises de colorimetria e de HMF na condição ambiente ( $24^{\circ}\text{C} \pm 2^{\circ}\text{C}$ ) e na condição térmica de  $50^{\circ}\text{C}$  após 21 dias (simulando condição extrema de estocagem). Analisando os resultados de HMF, na condição ambiente e na condição simulada, o tratamento controle não apresentou diferença ( $p > 0,05$ ) em relação ao composto e diferiu do hidrolisado em ambas as condições. Observou-se na análise de HMF livre que os leites em pó submetidos a condição térmica foram mais suscetíveis a reação de Maillard

**Título do Projeto:** Estudo de Creme de Leite UHT em diferentes concentrações de gordura com adição de goma Xantana

**Autores:** RODRIGO STEPHANI (Orientador), ÁLVARO AUGUSTO PEREIRA SILVA (Bolsista), ÍTALO TULER PERRONE, LUIZ FERNANDO CAPPAL DE OLIVEIRA (Colaborador)

**Resumo:** O tratamento Ultra-High Temperature é uma tecnologia que visa a destruição de microrganismos patogênicos e deteriorantes, aumentando a vida útil do alimento com mínimas alterações nas características químicas/nutricionais. Esse tratamento é comum na indústria alimentícia, principalmente para derivados lácteos, como o creme de leite, sendo este um alimento rico em gordura e comercializado em diversos teores lipídicos. Atualmente, o mercado consumidor tem buscado cremes com teores de gordura reduzido. O teor lipídico relaciona-se com a estabilidade do creme de leite, principalmente, após o tratamento UHT, sendo que a homogeneização visa mitigar a separação da gordura da fase contínua da emulsão. Neste trabalho foram avaliados 5 tratamentos, em duplicata, de creme de leite com diferentes teores de gordura: 25% (Controle, sem adição de Xantana) e 25%, 20%, 17% e 15% (adicionados de 0,25% m/v de Xantana). As amostras foram homogeneizadas a 20MPa e submetidas ao tratamento UHT de 140°C por 5 segundos em planta piloto. Realizou-se análises de estabilidade em centrífuga, viscosidade e distribuição do tamanho das partículas em 5 diferentes momentos de estocagem (1, 7, 14, 35 e 54 dias). Em relação à estabilidade observou-se que o tratamento Controle apresentou separação de fases em D7. Todas os demais tratamentos apresentaram separação menor que 1% v/v durante todo o tempo de estocagem com exceção ao tratamento Xantana 15% em D54, que apresentou separação de 5% v/v. A análise de tamanho das partículas permitiu observar a distribuição na região



**Título do Projeto:** Leite em pó nanoparticulado: produção e determinação das propriedades físico-químicas e microestruturais durante o armazenamento.

**Autores:** RODRIGO STEPHANI (Orientador), NATHALIA DA SILVA CAMPOS, MARIANA BRAGA DE OLIVEIRA (Bolsista), ÍTALO TULER PERRONE, LUIZ FERNANDO CAPPÀ DE OLIVEIRA (Colaborador)

**Resumo:** O leite em pó é um ingrediente comumente utilizado na fabricação do sorvete. Assim, é importante estudar como a estrutura do sorvete se comporta com a mudança de temperatura afim de verificar a sua faixa de congelamento, além de seu comportamento com a redução de um dos principais ingredientes, o açúcar, quando utilizamos um leite em pó nanoestruturado. O presente trabalho teve como objetivo estudar a microestrutura de bases para sorvete com o uso da microscopia óptica e controle de temperatura. Foi avaliada a influência do uso de diferentes leites em pó nanoparticulados (desenvolvidos pela própria equipe) na preparação das bases para sorvete, os quais foram submetidos a diferentes pressões de homogeneização (0, 20MPa e 80MPa). Também foi avaliada a influência da redução de sacarose e a substituição parcial desta por fibra solúvel (0% sacarose, 0% sacarose/substituição de 50% por fibra e 0% sacarose/substituição de 80% por fibra). A base para sorvete foi preparada a partir do leite em pó, leite pasteurizado integral, sacarose, glicose e creme de leite. Nos tratamentos com redução de sacarose, foi utilizada a fibra solúvel Promitor 70 da Tate & Lyle. As misturas foram tratadas termicamente à 85°C por 10 minutos. Para a observação da microestrutura foi utilizado o microscópio ótico Olympus BX51 acoplado ao acessório de temperatura. O processo de congelamento foi observado da temperatura ambiente (22°C ± 2°C) até -40°C, onde foram capturadas imagens a cada intervalo de 10°C. Também foram capturadas imagens do processo de descongelamento utilizando o mesmo protocolo. Foi possível identificar grandes modificações microestruturais entre -18°C e -24°C para o estudo utilizando os diferentes leites em pó. Para o estudo utilizando a redução de sacarose foi possível observar modificações intensas entre -12°C e -20°C. Comparando ambos resultados, é possível inferir maior amplitude na faixa de congelamento devido a redução da sacarose e adição da fibra. Conclui-se que o uso da microscopia ótica acoplada ao sistema de temperatura fornece importantes informações para o estudo da microestrutura de base para sorvetes durante o congelamento.

**Título do Projeto:** Estudo do incremento nutricional em composto orgânico obtido a partir da bioestabilização aeróbia de Resíduos Sólidos Urbanos

**Autores:** SAMUEL RODRIGUES CASTRO (Orientador), PEDRO BARREIROS SILVA DE SOUZA FAGUNDES (Bolsista), LISÉTE CELINA LANGE (Colaborador)

**Resumo:** Globalmente, a urbanização e o crescimento populacional resultaram no aumento da geração de resíduos sólidos, levando a uma série de desafios ambientais, sociais e econômicos, especialmente em países em desenvolvimento, que demandam estratégias efetivas de gerenciamento e manejo (GUO et al., 2018 - ONWOSI et al., 2017). A compostagem tem ganhado destaque no tratamento de resíduos, no entanto, uma das questões relacionadas à técnica é a perda excessiva de nitrogênio por volatilização de amônia que, além de potencializar a poluição atmosférica, contribui na depreciação do produto final com a redução da qualidade nutricional do composto (CÁCERES et al., 2018 - KATAKI et al., 2016 - WANG - ZENG, 2018). O presente estudo tem por objetivo geral avaliar a técnica da compostagem de resíduos alimentares sintéticos aliada à formação de estruvita ( $MgNH_4PO_4 \cdot 6H_2O$ ), com fins de incremento no teor nutricional do composto orgânico obtido com a fixação do nitrogênio amoniacal. Foram realizados dois tratamentos: o primeiro, com suplementação de sais de magnésio e fósforo no meio reacional - e o segundo, sem adição de sais, adotado como experimento controle. A adição de sais promoveu uma conservação de 21% de nitrogênio total extraível ao final do 56° dia, verificando-se um incremento nutricional significativamente superior à condição controle. Os tratamentos apresentaram formação de cristais com características e propriedades morfológicas similares à estruvita, sendo necessárias análises instrumentais para evidenciar tal hipótese. Diante do potencial da técnica e dos resultados obtidos até o momento, o grupo de pesquisas continua a explorar o tema, tendo como foco a otimização da técnica, além de novos testes que possam contribuir para que a compostagem se torne uma alternativa efetiva e real no gerenciamento de resíduos sólidos urbanos.

**Título do Projeto:** COEXISTÊNCIA EM REDES COGNITIVAS SEM FIO: MITIGAÇÃO DE INTERFERÊNCIA COM MECANISMOS DE ALOCAÇÃO DE CANAIS E CONTROLE DE POTÊNCIA

**Autores:** EDUARDO PAGANI JULIO (Orientador), GABRIEL MARTINS SANTANA (Bolsista)

**Resumo:** Atualmente tem sido cada vez mais comum o uso de redes sem fio para acesso à internet. Tais redes, devido ao fato de não serem cabeadas necessitam de um meio alternativo para transmitirem e receberem informações. Dessa forma, faz-se uso do espectro de radiofrequência. O espectro de radiofrequência por sua vez é um recurso limitado, e concorrido, através do qual as redes sem fio (wireless) realizarão suas atividades. Atualmente são reservadas 14 faixas de frequência desse espectro (também conhecidas como canais), na faixa dos 2.4GHz para operações wireless. Neste contexto surgem as Redes de Rádio Cognitivas, que se tratam de uma tecnologia de rede para o aumento da eficiência de alocação dos usuários no espectro disponível. Nelas existem os usuários licenciados que possuem o direito de operar em seu canal sem que sofram interferências, e os usuários cognitivos que farão acesso oportuno às faixas de frequência do espectro conforme os usuários licenciados não estejam operando, deixando lacunas que podem ser aproveitadas. A coexistência nestas redes ocorre justamente quando mais de um usuário cognitivo faz acesso oportuno a um mesmo canal, o que irá ocasionar um problema de interferência, de modo que suas transmissões e recebimentos de pacotes serão prejudicadas. Usuários cognitivos fazendo uso de canais adjacentes ou até mesmo próximos irão gerar uma interferência de maior ou menor intensidade, de acordo com a proximidade. A proximidade geográfica dos usuário das redes sem fio (roteadores) também é um fator importante a se observar quando se tenta reduzir a interferência, pois usuários em locais próximos e alocados a canais iguais ou próximos geram interferência entre si. A alternativa então é reduzir a potência de transmissão destes usuários, o que reduz a interferência, mas prejudica a área de abrangência do seu alcance. Assim sendo, o objetivo deste projeto de Iniciação Científica foi estudar o cenário das redes cognitivas, além de buscar algoritmos que pudessem realizar uma alocação dos usuários de uma dada região geográfica aos canais, de modo que a interferência total do sistema fosse a mínima possível e que a área de abrangência de cada usuário fosse a maior possível.

**Título do Projeto:** Editor Web Gráfico de Ontologias

**Autores:** FABRICIO MARTINS MENDONCA (Orientador), LUCAS PIAZZI DE CASTRO (Bolsista), TIAGO LUIZ FERREIRA DE CARVALHO, PEDRO HENRIQUE BARBOSA ALVES (Colaborador)

**Resumo:** Este projeto de Iniciação Científica conduziu uma pesquisa sobre os problemas encontrados no processo de construção de ontologias, usadas como base para elaboração de modelos conceituais para o desenvolvimento de sistemas de informação. A partir do estudo e análise de tais problemas foi implementado um framework de suporte à modelagem de sistemas de informação tendo como base ontologias de referência. O framework implementado é um editor web gráfico de ontologias, denominado Onto4AllEditor, que permite orientar desenvolvedores de ontologias no processo de modelagem, apresentando dicas, mensagens e regras de construção ontológicas. O editor foi implementado a partir de tecnologias web recentes, que incluem o framework Laravel, as linguagens de programação PHP e JavaScript, além das bibliotecas MXGraph, JQuery. O vídeo, a seguir, traz a apresentação das funcionalidades do Onto4AllEditor através de exemplos didáticos sobre construção de ontologias. Conclui-se que a ferramenta proposta traz contribuições ao processo de modelagem de ontologias, ao utilizar um conjunto de classes e relações ontológicas pré-definidas, explicações detalhadas desses elementos e suas propriedades, além de uma interface web simples, intuitiva e rápida.

**Título do Projeto:** Topologia Geométrica. Uma abordagem Intuitiva

**Autores:** ROGERIO CASAGRANDE (Orientador), MELISSA KELMER PEREIRA CAMPOS (Bolsista)

**Resumo:** No presente trabalho, inserido na área de Geometria e Topologia, exploraremos a topologia de superfícies fechadas, generalizações de poliedros. Tal assunto é estudado por matemáticos desde a segunda metade do século 19, sendo objeto de pesquisa até os dias atuais. Como um tratamento formal para os conceitos e resultados relativos à topologia das superfícies requer conhecimento de topologia geral e cálculo avançado, optamos nessa apresentação explorar superfícies do ponto de vista topológico e geométrico, o mais intuitivamente possível, a partir de exemplos e figuras. Listamos quatro tipos de deformações que preservam propriedades intrínsecas à superfície, chegando a um conceito que permite dizer quando duas superfícies são topologicamente equivalentes. Apresentamos exemplos de superfícies que são definidas abstratamente a partir de colagens estratégicas de pares de arestas de regiões poligonais planas, como o Toro Bidimensional e a Garrafa de Klein. Também veremos como obter uma nova superfície a partir de superfícies conhecidas, por meio de uma soma conexa. Por fim, daremos um resultado que responde a seguinte questão: Quantas superfícies fechadas existem, além da superfície da bola esférica?

**Título do Projeto:** Tratamento de lixiviado por Precipitação de Estruvita combinado a Fenton

**Autores:** SAMUEL RODRIGUES CASTRO (Orientador), CAROLINA DE OLIVEIRA RESENDE, DÉBORA AZEVEDO DA SILVA (Bolsista), SUE ELLEN COSTA BOTTREL (Colaborador)

**Resumo:** A aplicação de fertilizantes nitrogenados e fosfatados no solo, assim como a inadequada gestão de efluentes líquidos, resulta na adição de N e P no fluxo de água, contribuindo com a eutrofização de corpos d'água. Nesse contexto, a precipitação química da estruvita surge como uma forma de recuperação desses nutrientes, mitigando a eutrofização de corpos d'água e a exploração de fontes naturais. Além disso, a estruvita ( $MgNH_4PO_4 \cdot 6H_2O$ ) é um mineral capaz de contribuir no aprimoramento da produtividade das culturas por ser um fertilizante de liberação lenta. Diferentes tipos de efluentes possuem elevada carga orgânica, constituindo um grave problema ambiental. Assim, a adoção de processos oxidativos avançados, como o fenton homogêneo, vem ganhando destaque por mineralizar a matéria orgânica capaz de comprometer a precipitação da estruvita. Nesse sentido, o presente trabalho teve como objetivo avaliar a técnica Fenton homogêneo como alternativa de pré e pós tratamento da precipitação química de estruvita. As condições experimentais foram geradas aleatoriamente pelo software Minitab seguindo um planejamento 2k sendo 2 o número de níveis (mínimo/máximo) e K o número de variáveis do processo, sendo eles: pH, razão estequiométrica e concentrações de  $Fe^{2+}$  e  $H_2O_2$ , totalizando 8 experimentos para cada configuração. O efluente utilizado foi o lixiviado do aterro sanitário de um município de grande porte. Foi realizada uma caracterização do lixiviado bruto e os experimentos foram desenvolvidos em escala laboratorial no Laboratório de Qualidade Ambiental da UFJF, em batelada e com utilização de reagentes sintéticos. Como resultado, obteve-se uma maior remoção de nitrogênio amoniacal na configuração do Fenton como pós tratamento, pH de 8,5 e razão estequiométrica de 1:1:1, totalizando 52% de remoção. Já com relação a DQO, a maior remoção foi de 68%, obtida nas condições de pH igual a 9, razão estequiométrica de 1:1:1 e configuração do Fenton como pré tratamento. Conclui-se, que a melhor configuração a ser adotada varia de acordo com o objetivo de remoção, visto que a maior eficiência de remoção de DQO se deu com Fenton como pré tratamento, enquanto que a maior remoção de nitrogênio se deu com o Fenton como pós tratamento.