



DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA E TECNOLÓGICA EM
METROLOGIA
QUALIDADE E TECNOLOGIA

ANAIS da 1ª Jornada de Iniciação Científica e Tecnológica
em Metrologia, Qualidade e Tecnologia – JICT Inmetro

30 de novembro de 2018

Anais da 1ª. Jornada de Iniciação Científica e Tecnológica em Metrologia, Qualidade e Tecnologia

Organização de: Manuela Leal da Silva e Paulo Emílio Corrêa Leite

**Duque de Caxias, RJ
Inmetro
2018**



Ficha catalográfica elaborada pela Biblioteca do Inmetro

J769a Jornada de Iniciação Científica e Tecnológica em Metrologia, Qualidade e Tecnologia (1. : 2018 : Duque de Caxias, RJ).
Anais da 1ª. Jornada de Iniciação Científica e Tecnológica em Metrologia, Qualidade e Tecnologia / Organização de: Manuela Leal da Silva e Paulo Emílio Corrêa Leite. – Duque de Caxias, RJ : Inmetro, 2018.
25 p.

Evento realizado no Instituto Nacional de Metrologia, Qualidade e Tecnologia, em 30 de novembro de 2018.

ISBN: 978-85-86920-26-4

Tipo de suporte: E-book. Formato do E-book: PDF.

1. Iniciação científica. 2. Ciência e tecnologia. 3. Metrologia.
I. Silva, Manuela Leal da (Org.). II. Leite, Paulo Emílio Corrêa (Org.).
III. Instituto Nacional de Metrologia, Qualidade e Tecnologia.
IV. Título.

CDD 001.891

COMITÊ GESTOR – PIBIC, PIBIT e PIBIC-EM

REPRESENTANTE DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA DA INSTITUIÇÃO

RODRIGO PEREIRA BARRETTO DA COSTA-FELIX

COORDENADOR INSTITUCIONAL DO PIBIT

VANDERLEA DE SOUZA

COORDENADOR INSTITUCIONAL DO PIBIC

BRAULIO ARCHANJO

COORDENADOR INSTITUCIONAL DO PIBIC-EM

LUIS FERNANDO RUST DA COSTA CARMO

REPRESENTANTE PPGBIOTEC

CELSO BARBOSA DE SANT'ANNA FILHO

REPRESENTANTE PPGMQ

RAPHAEL CARLOS SANTOS MACHADO

REPRESENTANTE DO CURSO TÉCNICO

RODOLFO S SOUZA

MEMBROS EXTERNOS AO INMETRO

CARLOS R HALL BARBOSA, Programa de Pós-Graduação em Metrologia da PUC-Rio

HELENA CARLA CASTRO, Programa de Pós-graduação em Patologia da UFF

MÁRCIO LUIS LYRA PAREDES, Instituto de Química da UERJ

RENATA ANTOUN SIMÃO, Escola Politécnica da UFRJ

WAGNER COELHO DE ALBUQUERQUE PEREIRA, Programa de Pós-Graduação em Engenharia Biomédica da COPPE/UFRJ

COMISSÃO ORGANIZADORA

MANUELA LEAL DA SILVA

PAULO EMÍLIO CORRÊA LEITE

COMISSÃO DE APOIO

RAISSA SANTOS DE LIMA

CAIO BULGARELLI

ALESSANDRA SBANO DA SILVA

MARIA FERNANDA RIBEIRO DIAS





DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA E TECNOLÓGICA EM
METROLOGIA
QUALIDADE E TECNOLOGIA

Programação

30/11/2018

- 12h – **Credenciamento e fixação dos pôsteres**
- 13h – **Abertura** - Luiz Fernando Rust da Costa Carmo (Presidente do Conselho Acadêmico do Inmetro) e Rodrigo Pereira Barretto da Costa-Félix (Coordenador do Programa de Pós-graduação em Biotecnologia do Inmetro)
- 13h20min – Manuela Leal da Silva (Docente PPGBiotec) – Palestra: **A Biologia Computacional no Inmetro**
- 14h – Giselle Morgado – **Medidor De Potência Ultrassônica para o Pós Mercado de Equipamentos de Terapia por Ultrassom Utilizando Um Calorímetro**
- 14h15min – Guilherme de Almeida Santos de Castro e Miranda - **Avaliação da Cinética e das Alterações Morfológicas da Fusão de Esferoides de Células-tronco/Estromais de Tecido Adiposo Humano Visando Protocolos de Bioimpressão**
- 14h30min – Melissa Fabricio Melo de Oliveira - **Avaliação da Desmineralização Óssea por Ultrassom**
- 14h45min – Murilo Costa Matsunaga - **Medição das Propriedades Ultrassônicas de Phantoms Mimetizadores de Tecido em Função da Temperatura**
- 15h – Raissa Santos de Lima - **Predição Funcional: Anotação Sequencial versus Anotação Estrutural. Aplicação em *Mycobacterium tuberculosis***
- 15h15min – Thais Suelen Mello Lima - **Avaliação da Citotoxicidade de Nanopartículas de Dióxido De Titânio Em Células Ósseas Humanas**
- 15h30min – Douglas Melo - **Nanopartículas de Cloreto de Prata e Prata/Cloreto de Prata Sintetizadas Quimicamente para Aplicações Biomédicas**



DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA E TECNOLÓGICA EM
METROLOGIA
QUALIDADE E TECNOLOGIA

Programação

30/11/2018

16h-16h30min – **Sessão de Pôsteres**

Helton Gonçalves de Medeiros - **Desenvolvimento de Material de Referência para Avaliação de Qualidade em Nanoespectroscopia Raman (TERS)**

Letícia Alves da Silva - **Sensores Eletroquímicos Compostos por Eletrodos de Carbono Vítreo Modificados com Nanotubos de Carbono Multi-wall**

Maria Eduarda Alves Esteves - **Metanálise Quantitativa de Proteínas Relacionadas ao Hepacivirus C**

Ricardo Cardozo de Barros - **Desenvolvimento do Portal ASAProt: Sistema Computacional para Anotação Estrutural em Larga Escala**

Thiago G-L. Brito - **Estudo da Influência do Substrato nas Medidas Nanotribológicas de Materiais Bidimensionais**

Vinícius Santos de Pontes - **SASBT: Uma nova ferramenta para busca de alvos biológicos em amostras sequenciadas por métodos baseados em *shotgun***

William Ferreira da Silva - **Modificação de Grafeno por Microscopia de Íons de Hélio e caracterização por TERS**



DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA E TECNOLÓGICA EM
METROLOGIA
QUALIDADE E TECNOLOGIA

RESUMOS

Medidor de Potência Ultrassônica para o Pós Mercado de Equipamentos de Terapia por Ultrassom Utilizando um Calorímetro

Gisele Morgado¹, Rodrigo Costa Félix¹, Sandro Miqueleti¹

Contato: gisele.morgado@hotmail.com

¹ *Laboratório de Ultrassom (Labus) / Divisão de Metrologia Acústica e Vibrações (Diavi), Instituto Nacional de Metrologia, Qualidade e Tecnologia (Inmetro), Duque de Caxias, RJ, Brasil.*

Palavras chave: *potência ultrassônica, calorímetro, terapia por ultrassom, metrologia*

A terapia por ultrassom é o recurso físico mais utilizado pelos fisioterapeutas profissionais no tratamento dos diversos distúrbios do sistema musculoesquelético. A intensidade da radiação ultrassônica é um fator essencial para o sucesso de qualquer terapia, bem como é o tempo de aplicação. Porém, os riscos do mau uso do ultrassom, crescem na medida que suas indicações e aumentam relatos de insucesso nos tratamentos. O uso de equipamentos não calibrados é uma das causas da diminuição ou ausência dos efeitos terapêuticos pretendidos, acarretando perda de tempo para o fisioterapeuta e para o paciente, além de gerar altos custos e tratamentos prolongados desnecessários. Outra situação proveniente do uso de equipamentos não calibrados, de importância ainda maior, é o agravamento dos sinais e sintomas de doenças preexistentes, devido à diferença de potência de saída acima do especificado, causando assim, prejuízo ao paciente e ao próprio terapeuta. O método padrão para a verificação do equipamento de terapia por ultrassom (ETUS) é padronizado pela IEC 61689, pela balança de força de radiação. Um método de custo elevado e alta complexidade. O objetivo do presente estudo é projetar e confeccionar um equipamento através da calorimetria, que verifique a potência ultrassônica de equipamentos de terapia por ultrassom que já se encontram em uso nas clínicas e consultórios, a fim de que contemplem a Norma IEC 61689, indicando ao fisioterapeuta (ou operador) o bom ou mal funcionamento de seu equipamento e a importância da manutenção periódica. No trabalho, foram confeccionados dois calorímetros. Em ambos projetos, medições em condição de repetibilidade foram executadas e a potência ultrassônica foi obtida através de cálculos físicos. Cálculos das incertezas de medição também foram realizados. No primeiro experimento, o erro normalizado menor que 1, em duas medições, atesta a compatibilidade dos resultados das medições das potências do equipamento de ultrassom entre o calorímetro e o valor de referência obtido a partir da balança de força de radiação e no segundo experimento, o aumento de temperatura em função do tempo foi plotado em triplicata, e para todos os casos o coeficiente de determinação foi maior que 0,995, o que foi considerado altamente consistente. A medição de potência ultrassônica usando a abordagem de calorimetria foi estatisticamente equivalente ao método padronizado conforme descrito na Norma IEC 61161. Esses resultados são fundamentais para um desenvolvimento futuro de uma junta de equipamentos com um procedimento adequado para ser utilizado em um estabelecimento de usuário final para avaliar o desempenho de potência de saída de um equipamento de fisioterapia.

Suporte Financeiro: CNPq

Avaliação da cinética e das alterações morfológicas da fusão de esferoides de células-tronco/estromais de tecido adiposo humano visando protocolos de bioimpressão

Guilherme de Almeida Santos de Castro e Miranda^{1,2}, Gabriela Soares Kronemberger^{1,2}, José Mauro Granjeiro^{1,2} e Leandra Santos Baptista^{1,2}

Contato: guilherme.mirandao@hotmail.com

¹UFRJ, Duque de Caxias, RJ, Brasil,

²INMETRO, Duque de Caxias, RJ, Brasil

Palavras Chave: *engenharia de tecidos, fusão, esferoides, biofabricação*

A fusão de esferoides é uma etapa fundamental para biofabricação de tecidos utilizando bioimpressão. O objetivo deste projeto é avaliar o processo de fusão in vitro de esferoides de células-tronco/estromais de tecido adiposo humano no seu estado indiferenciado e diferenciado para a via osteogênica. Para isso, a suspensão de células será semeada em hidrogel de agarose micromoldado (2x10⁶ células/hidrogel) contendo 81 microrressecções a partir de um molde de silicone, conforme recomendações do fabricante (Microtissues, Inc.). Os esferoides formados serão mantidos em meio de cultivo composto por albumina 1,25µg/ml, ácido ascórbico 50µg/mL, insulina 0,01 mg/ml, transferrina 0,01mg/ml selênio 0,01µg/ml e penicilina 100UI/ml e estreptomicina 100µg/ml (esferoides indiferenciados) ou em meio de indução de diferenciação (meio condrogênico por 2 semanas composto de Dexametasona 10-8mM e TGFβ-3 10ng/mL seguido de meio osteogênico por 3 semanas composto de β-glicerofosfato 10mM e Dexametasona 10-7mM - esferoides diferenciados) totalizando 5 semanas. Após o período de 2, 3 e 5 semanas, os esferoides serão coletados e delicadamente dispostos em poços de placa de 96 poços previamente recobertos com agarose. Quatro esferoides por poço serão dispostos em proximidade uns com os outros e mantidos em estufa úmida a 37°C com 5% de CO₂. O processo de fusão de esferoides indiferenciados e diferenciados foi acompanhado por microscopia óptica de contraste de fase, obtendo-se fotos nos tempos de 0 e 3 horas, bem como de 1, 2, 3, 6 e 7 dias após o plaqueamento, com auxílio de um microscópio invertido. O processo de fusão também foi avaliado após 3 e 7 dias do plaqueamento através de análises histológicas realizadas em cortes corados por hematoxilina e eosina. Portanto observamos que os esferoides indiferenciados apresentam uma subpopulação de células morfolologicamente distinta orientada para área região da fusão, além disso observamos a presença de projeções entre os esferoides induzidos o que pode sugerir um mecanismo de ação distinto quando comparado ao controle. Além disso, testes de viabilidade e quantitativos da fusão de esferoides foi testado indicando um alto índice de viabilidade pós fusão, além de um processo completo de fusão em 7 dias dos esferoides controle.

Suporte financeiro: CNPq – PIBIC

Avaliação da Desmineralização Óssea por Ultrassom

Melissa Oliveira^{1*}, Cristiane Silva², Rodrigo Costa Félix¹

Contato: melissafabricio94@gmail.com

¹ Laboratório de Ultrassom (Labus) / Divisão de Metrologia Acústica e Vibrações (Diavi), Instituto Nacional de Metrologia, Qualidade e Tecnologia (Inmetro), Duque de Caxias, RJ, Brasil.

²Instituto Nacional de Tecnologia, Brasil

Palavras chave: desmineralização, osso cortical, ultrassom, densidade mineral, metrologia

A osteoporose é uma doença em que a densidade e a qualidade do osso são reduzidas, principalmente pela perda de massa óssea. Entre as várias técnicas de ultrassom quantitativo (QUS – quantitative ultrasound) disponíveis para avaliar o osso, apenas algumas têm se mostrado com potencial para prever riscos de fraturas com uma eficiência equivalente às técnicas de densitometria óssea. O objetivo deste trabalho é investigar o uso do ultrassom quantitativo para analisar ossos corticais em diferentes estágios de desmineralização. Foram coletados fêmures bovinos provenientes de um frigorífico e posteriormente, cada osso será dividido em quatro pedaços e depois usinados. A desmineralização será feita por imersão da amostra em uma solução de ácido etilendiamino tetraacético (EDTA), sendo realizada em 10 etapas. Cada etapa será dada por um tempo de imersão, e a cada etapa de desmineralização será realizada usando uma nova solução, que serão analisadas por método de análise química para a determinação da quantidade de mineral presente no sobrenadante após a desmineralização. Serão usados diferentes protocolos ultrassônicos, variando a frequência com sinal contínuo em pulso eco. As medições serão feitas com um suporte dentro de um tanque acústico imergido em água com temperatura controlada de 22°C com variação inferior a $\pm 3^\circ\text{C}$. Resultados: até o momento, as epífises ósseas foram removidas. Posteriormente, as dissecações interna e externa foram realizadas. O suporte para fixação dos transdutores foi impresso 3D em ABS (acrylonitrile butadiene styrene). Os resultados esperados são o estudo sistemático do efeito da desmineralização óssea em modelos animais, correlacionando com parâmetros de QUS da peça em diferentes estágios de desmineralização. Pretende-se, adicionalmente, correlacionar estatisticamente a relação entre parâmetros de QUS e as condições físicas e química das peças em distintos estágios de desmineralização. Até o momento foram desenvolvidas as rotinas em LabVIEW para análise dos sinais ultrassônicos, foram projetados e construídos os suportes para a realização dos ensaios e os ossos foram limpos, cortados e estão em processo de usinagem.

Suporte Financeiro: CNPq

Medição das propriedades ultrassônicas de phantoms mimetizadores de tecido em função da temperatura

Murilo C. Matsunaga^{1,*}, André V. Alvarenga¹

Contato: murcosta@gmail.com

¹ *Laboratório de Ultrassom (Labus) / Divisão de Metrologia Acústica e Vibrações (Diavi), Instituto Nacional de Metrologia, Qualidade e Tecnologia (Inmetro), Duque de Caxias, RJ, Brasil.*

Palavras chave: phantom, PVCP, velocidade de propagação, tecido;

Phantoms são corpos de prova que mimetizam as propriedades acústicas dos tecidos biológicos. Esses phantoms são comumente utilizados nas pesquisas de ultrassom terapêutico (UST). Eles podem mimetizar as propriedades dos tecidos moles (tecido adiposo, muscular e epitelial) e tecidos duros (tecido ósseo) como impedância acústica, velocidade de propagação e coeficiente de atenuação. Nesse estudo, foi utilizada a técnica do pulso/eco como método para a estimativa da velocidade de propagação e do coeficiente de atenuação em phantoms de tecidos biológicos, em função da variação da temperatura. O sistema de medição utilizado para as medições das propriedades ultrassônicas foi desenvolvido no Laboratório de Ultrassom do Inmetro e as incertezas envolvidas no procedimento de medição foram estimadas. A velocidade de propagação longitudinal no phantom de PVCP estudado variou de 1.424 m.s⁻¹ a 1.379 m.s⁻¹, com incertezas inferiores a 6 m.s⁻¹, para temperaturas que variaram de 20°C a 37°C. Os valores do coeficiente de atenuação para a frequência de 5 MHz variaram de 10,64 dB.cm⁻¹ a 11,40 dB.cm⁻¹ para temperaturas de 22,5 °C a 34,2 °C. Para a frequência de 2,25 MHz o coeficiente de atenuação do phantom variou de 3,29 dB.cm⁻¹ a 6,55 dB.cm⁻¹ entre temperaturas de 21,2°C a 32,6 °C. Por fim, considerando-se a frequência de 3,5 MHz, os valores do coeficiente de atenuação variaram entre 6,06 dB.cm⁻¹ e 8,69 dB.cm⁻¹, para temperaturas de 21,6 °C a 32,5 °C. Nesse trabalho, a velocidade de propagação no phantom se aproximou do valor de velocidade estabelecido na literatura para os tecidos moles. Entretanto, no que se refere ao coeficiente de atenuação, os valores medidos para o phantom de PVCP foram superiores aqueles mencionados na literatura. Uma abordagem para corrigir os valores do coeficiente de atenuação é reduzir a quantidade de grafite utilizada na confecção do phantom, pois este componente tem influência direta na atenuação do sinal de ultrassom que atravessa o phantom. Cabe ainda ressaltar que, considerando as faixas de temperatura estudadas, a velocidade de propagação no phantom tende a diminuir com o aumento da temperatura, enquanto os resultados obtidos para o coeficiente de atenuação nas diferentes frequências estudadas, não se mostrou conclusivo.

Suporte financeiro: PIBIC/CNPq



Predição funcional: anotação sequencial versus anotação estrutural. Aplicação em *Mycobacterium tuberculosis*.

Raissa Santos de Lima¹, Manuela Leal da Silva^{1,2}

Contato: raissalima2709@gmail.com

¹Inmetro - Instituto Nacional de Metrologia, Qualidade e Tecnologia, Duque de Caxias/RJ – Brasil

²Universidade Federal do Rio de Janeiro-UFRJ, Macaé/RJ, Brasil.

Palavras Chave: Tuberculose, Predição, Proteínas, Modelagem.

A predição funcional tem o objetivo de resolver o desafio central da era pós genômica: inferir função para o produto de todos os genes dos organismos sequenciados. Entretanto, não existe na literatura um protocolo único que deva ser utilizado para cada ciência ômica e dessa forma seria interessante para o Inmetro participar da criação dos novos protocolos para análises de sequências oriundas de ciências ômicas. Para tanto, inicialmente buscaremos por diferenças e parâmetros que possam ser utilizados nessa padronização, utilizando duas cepas de *Mycobacterium tuberculosis* agente causador da tuberculose. A tuberculose é um doença negligenciada que segundo a OMS em 2016 teve mais de 1 milhão de mortes confirmadas. Visto isso, o objetivo deste projeto é criar um perfil comparativo entre os dois genomas depositados de *M. tuberculosis* no NCBI e realizar a predição funcional através da metodologia de anotação estrutural, visando a busca de possíveis novas funções para proteínas já preditas. Foi utilizado o organismo *M. tuberculosis*, duas cepas CCDC 5180 porém com sequenciamentos realizados por grupos de pesquisas diferentes. Através da comparação entre os dois genomas utilizando a ferramenta Blast foi observado que 2089 proteínas possuem menos de 100% de identidade entre os dois genomas. Além disso, foi possível inferir função para 283 das proteínas preditas com função hipotética. Utilizando o software MHOLline foi possível a obtenção de modelos tridimensionais de diversas proteínas preditas nos dois genomas. Foi possível obter modelos tridimensionais para 2248 proteínas oriundas do genoma 1 e no genoma 2 a obtenção de 2403 modelos. Utilizando os resultados do MHOLline foram realizadas as análises de predição de função em larga escala com a plataforma ASAProt, ferramenta de predição funcional desenvolvida em parceria com o Inmetro. Foi possível inferir função para 526 das 1234 proteínas descritas anteriormente com função hipotética no genoma 1. Além disso, a análise das proteínas preditas e a avaliação dos modelos tridimensionais construídos direcionaram nossos estudos para as proteínas DprE1 e Topoisomerase 1, alvos promissores para o desenvolvimento de novos fármacos. Dessa forma foi possível caracterizar as mutações encontradas nessas proteínas, mapear as superfícies das proteínas e inferir que nenhuma dessas mutações interfeririam no sítio catalítico dessas proteínas.

Suporte financeiro: CNPq, Inmetro, CAPES-BioComputacional



Avaliação da citotoxicidade de nanopartículas de dióxido de titânio em células ósseas humanas

Thais S. M. Lima^{1,2}, **Ana R. L. P. Ribeiro**¹.

Contato: thaismellolima@gmail.com / tsmlima@colaborador.inmetro.gov.br

¹Instituto Nacional de Metrologia, Qualidade e Tecnologia (INMETRO). Laboratório de Bioengenharia Tecidual (LABIO). Avenida Nossa Senhora das Graças, 50, prédio 27. Campus Xerém – Duque de Caxias, Rio de Janeiro.

²Universidade Federal do Rio de Janeiro (UFRJ). Campus Duque de Caxias Professor Geraldo Cidade. Santa Cruz da Serra – Duque de Caxias.

Palavras Chave: Nanotoxicidade, Dióxido de titânio, Nanopartículas, Osteoblastos.

O número de implantes dentários e próteses ortopédicas têm aumentado significativamente em todo o mundo. Esse aumento é explicado em grande parte pela crescente expectativa de vida populacional e preocupação com a estética. No ano de 2016, foram aplicados cerca de 2,2 milhões de implantes de titânio (Ti) no mundo inteiro. O Ti é o metal mais utilizado na produção de implantes dentários devido à sua excelente biocompatibilidade, entretanto fenômenos de degradação de superfície (corrosão e desgaste) podem ocorrer promovendo a liberação de íons e partículas metálicas em escala nano e micrométricas. Pouco se sabe sobre a degradação superficial dos implantes e subsequente citotoxicidade dos seus resíduos sobre as células ósseas, contudo acredita-se que essas partículas podem alterar a homeostase do tecido ósseo. Devido à sua grande relevância na manutenção da homeostase e consequente remodelamento do tecido ósseo, os osteoblastos são as principais células a serem analisadas na biointerface implante osso. Visto que poucos estudos visam a toxicidade de detritos em escala nanométrica nas células do tecido ósseo, este trabalho teve como objetivo avaliar a influência de diferentes concentrações de nanopartículas (NPs) de dióxido de titânio (TiO₂) na diferenciação, mineralização e expressão gênica de osteoblastos humanos primários *in vitro*. As células cultivadas em monocamada foram expostas a diferentes concentrações de NPs de TiO₂ (0, 5, 10 e 100 µg/mL) durante 3, 7, 14 e 21 dias de cultivo. Não foram observadas diferenças quanto à diferenciação das células após exposição a diferentes concentrações de nanopartículas de TiO₂ ao longo dos dias. Em contraposição, para a concentração de 10 µg/mL de TiO₂, foi observado um aumento no número de nódulos de mineralização após o 14º dia de cultivo, de forma dose dependente. Não foram encontradas diferenças significativas quanto ao perfil do padrão gênico de genes envolvidos nos processos de diferenciação e mineralização, tais como fator de transcrição relacionado ao Runt-2 (RUNX2) e fosfatase alcalina (ALP). Entretanto para o paciente A, observou-se um aumento na expressão relativa do gene colágeno 1 (COL1), sendo necessário a realização de novos ensaios.

Suporte financeiro: Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq) e Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior (CAPES).

Nanopartículas de Prata Sintetizadas Quimicamente para Aplicações Biomédicas

Douglas Melo da Fonseca, Renata Cavalho, Celso Sant'Anna*

Contato: *cbfilho@inmetro.gov.br

Laboratório de Microscopia Aplicada às Ciências da Vida – Lamav, Inmetro, Duque de Caxias, Xerém.

Palavras Chave: *AgNPs, nanopartículas, síntese química, nanopartículas de prata.*

Nanopartículas metálicas são partículas sólidas com dimensão entre 1 e 100 nm que possuem propriedades que se diferem dos seus respectivos átomos e dos seus sólidos metálicos. As características das nanopartículas se diferem também de acordo com o seu diâmetro e forma. Devido a sua instabilidade, as nanopartículas tendem a formar aglomerados metálicos o que faz com que elas percam suas características e conseqüentemente sua eficiência, afinal, uma característica das nanopartículas é que quanto menor o tamanho das partículas, maior a sua área de contato e conseqüentemente maior é sua eficácia. Dentro das nanopartículas destacam-se as de prata, devido sua grande toxicidade a torna uma forte agente antibacteriana, antifúngica etc, isso despertou o interesse não só da comunidade científica, mas também da indústria e do comércio, transformando esse num campo de enorme potencial não só científico mas também econômico. A síntese química das nanopartículas metálicas se dá através de reações de oxirredução, onde ocorre transferência de elétrons entre o agente redutor e o agente oxidante. O presente trabalho tem como objetivo desenvolver metodologias para a síntese química de nanopartículas de prata (AgNPs) estáveis. Foram testadas diversas metodologias de produção e estabilização das nanopartículas, usando variação de temperatura, concentração, volume e tempo de reação chegando a dois protocolos principais de síntese, utilizando como agente redutor o borohidreto de sódio na concentração de 0,002 M e como agente oxidante o precursor de prata, uma solução 0,001 M de nitrato de prata. Os dois protocolos se diferem no processo de estabilização das AgNPs. No primeiro, as partículas são centrifugadas em ultracentrífuga, descarta-se o pellet e o sobrenadante é filtrado com seringa e filtro de 0.22 μm . No segundo procedimento as nanopartículas são centrifugadas em ultracentrífuga, descartando o pellet e estabilizando a solução coloidal com solução de BSA 0,01%. Os objetivos futuros do nosso grupo são: testar novas variações de condições físicas; análise das AgNPs em DLS e microscópio eletrônico; realizar encapsulamento das partículas com PVA; realizar testes em fungos, bactérias, células tumorais e células animais; produção de cosméticos contendo nanopartículas de prata.

Suporte financeiro: CNPq e FAPERJ

Modelos Biológicos Tridimensionais para Estudos de Nanotoxicologia

Joice Nascimento¹, Wanderson de Souza¹, Ana Lopes Ribeiro¹, José Mauro Granjeiro¹

Contato: jmgranjeiro@gmail.com

¹Laboratório de Bioengenharia, Dimav/Inmetro

Palavras Chave: *Esferoide, osteoblasto, titânio, anatase, toxicologia.*

A avaliação de risco de nanomateriais para a saúde humana é uma preocupação atual dos EU, Europa, mas também nacional. Até o momento, os modelos in vitro bidimensionais de monocamada celular são os predominantes para a avaliação da nanotoxicidade, contudo, estes apresentam uma reduzida relevância anatômica e fisiológica. O projeto aqui apresentado, com foco principal na nanotoxicologia em modelos tridimensionais, visa atender a demanda mundial de desenvolver novas metodologias de avaliação dos potenciais riscos para a saúde associados à presença e liberação de nanopartículas em modelos que mimetizem os tecidos e órgãos. Esferóides formados por diferentes números de células (1, 2, 3, 4, 5 x 10⁴), foram caracterizados quanto ao tamanho, volume, viabilidade, diferenciação e mineralização. O modelo formado por 1 x 10⁴ células / poço mostrou melhores características de tamanho, viabilidade, diferenciação e mineralização tendo por isso sido selecionado para os estudos com NPs. Este modelo foi exposto às NPs nas concentrações de 5 e 100 µg/mL durante 72h. Não encontramos diferenças significativas na viabilidade após a exposição das NPs. Contudo, foi observada uma diferença significativa na avaliação do ciclo célula na fase S/G2 na concentração de 100 µg/mL. Além disso, imagens de microscopia eletrônica demonstraram que a estrutura 3D não é comprometida pela presença de NPs havendo internalização das NPs em todas as condições testadas. Os resultados mostram que, apesar da exposição das células às NPs, os esferóides não perdem a capacidade de se diferenciar e mineralizar. Para a mais elevada concentração de NPs, até houve um aumento da síntese de colágeno bem como uma diferença significativa em diversas citocinas, demonstrando que existiu uma resposta inflamatória. O aumento da produção de matriz orgânica óssea após exposição de alta concentração de NPs abre a possibilidade de uso deste sistema na aplicação de bioengenharia.

Suporte financeiro: CNPq, FAPERJ, Capes, Finep.



INCT – Instituto Nacional de Óptica Básica e Aplicada às Ciências da Vida - Desenvolvimento de padrões de frequência primários

Vinicius dos Santos Pereira , Luiz Vicente Gomes Tarelho

Contato: viniciussantos_28@hotmail.com

Laboratório de Comunicações Ópticas, Rádio Frequência e tempo e frequência, Dmtic – Inmetro

Palavras Chave: *Padronização primária de tempo e frequência, realização prática da unidade de tempo do SI, espectroscopia atômica, óptica não linear*

As tecnologias de informação e comunicações permearam grande parte das infraestruturas de sustentação das cidades em apoio às redes de distribuição de energia elétrica, redes de telefonia e telecomunicações em geral. O advento da internet tornou as comunicações cada vez mais dependentes de infraestrutura de troca de dados a velocidades cada vez maiores e tornando as tecnologias de informação e comunicação (TICs) numa presença ubíqua. Essa presença foi se tornando invisível, pois a população em geral não se conscientiza das tecnologias envolvidas em vários processos usados rotineiramente na área elétrica e comunicações. Esse tipo de situação torna essa tecnologia numa tecnologia pervasiva: ubíqua e invisível. Além de uma tecnologia pervasiva a metrologia de tempo e frequência é uma tecnologia portadora de futuro que permite gerar uma evolução nas atuais redes de infraestrutura de energia elétrica e telecomunicações. Uma das necessidades para dar apoio metrológico para essa tecnologia é o desenvolvimento de padrões de frequência, osciladores de alta precisão para uso em estações base, estações receptoras e inclusive padrões compactos para uso a bordo de equipamentos automotivos. Para o desenvolvimento de um padrão de frequência primário é necessária a operação simultânea de vários sistemas: sistema de vácuo para a cavidade ressonadora, sistema de aquecimento do forno de césio, sistema de bombeamento óptico, sistema de geração de micro-ondas em 9,19 GHz e sistema de servo controle. No desenvolvimento do trabalho foram realizadas: a instalação do sistema de refrigeração da bomba turbo molecular e do sistema de exaustão da bomba mecânica necessários para a operação do sistema de vácuo do padrão primário de césio contribuindo para a obtenção das condições de pressão e temperatura para geração do feixe atômico de césio com a qualidade necessária. Também foi realizado um controle e monitoramento do processo de “baking” da câmara do feixe atômico para eliminar os gases adsorvidos na parede metálica da câmara, permitindo a obtenção de alto vácuo nos experimentos realizados na câmara da ordem de 10^{-8} torr. Um outro aspecto importante para a operação de padrões de frequência é a preparação óptica do feixe atômico. O alinhamento do sistema óptico de excitação e medição da frequência atômica com uso do laser de diodo foi realizada e foi demonstrada boa capacidade de alinhamento óptico que auxiliou na obtenção de uma estabilização do laser para uso como excitação do sistema de feixe atômico de césio com uma frequência de 351,725 718 50 THz e uma largura de linha da ordem de 473 kHz.

Suporte financeiro: CNPq PIBIC, CNPq-FAPESP: INCT – Instituto Nacional de Óptica Básica e Aplicada às Ciências da Vida- Processo FAPESP: 2014/50858-8 e CNPq: 465360/2014-9





Estudo do impacto em saúde humana devido à utilização de diferentes agrotóxicos no trabalho agrícola pela comunidade do Caxambu-Petrópolis/RJ.

Juliana Medeiros de Oliva¹ e Costa, L.T.^{1,2}

Contato: lilian.t.costa@gmail.com

¹ Faculdade de Medicina de Petrópolis – FMP

² UFRJ - Campus Duque de Caxias

As doenças crônicas não-transmissíveis (DCNT) são hoje responsáveis pela maioria das doenças e mortes em muitos países, seja de alta, média ou baixa condição socioeconômica. Dados da OMS têm revelado, ainda, que é totalmente falsa a afirmativa de que as DCNT afetam apenas homens idosos em países ricos e homens ricos em países pobres. O número de mortes causadas por DCNT entre homens e mulheres é basicamente equivalente. Em todos os casos, com certeza, entre os menos favorecidos economicamente o acometimento é sempre desproporcional, em relação aos de renda mais alta. Os índices de morte por DCNT já estão mais elevados em países de baixa e média renda do que em países ricos. Quase dois terços das mortes prematuras em adultos (entre 15 e 69 anos) e três quartos de todas as mortes adultas são atribuíveis a tais condições. Pode-se dizer que em todos os países do mundo as DCNT constituem o principal problema de saúde pública, seja para homens ou para mulheres e, melhor dizendo, um grave problema para todos os sistemas de saúde pública. O trabalho agrícola é uma das mais perigosas ocupações na atualidade. Dentre os vários riscos ocupacionais, destacam-se os agrotóxicos que são relacionados a intoxicações agudas, doenças crônicas, problemas reprodutivos e danos ambientais. Dados recentes da Organização Internacional do Trabalho/Organização Mundial da Saúde (OIT/OMS) estimam que, entre trabalhadores de países em desenvolvimento, como o Brasil, os agrotóxicos causam anualmente 70 mil intoxicações agudas e crônicas que evoluem para óbito. Os agrotóxicos podem determinar efeitos sobre a saúde humana, sobretudo doenças crônicas dependendo da forma e tempo de exposição e do tipo de produto com sua toxicidade específica. Os agrotóxicos que mais causam preocupação em termos de saúde humana são os inseticidas organofosforados e carbamatos, os piretróides e os organoclorados, os fungicidas ditiocarbamatos e os herbicidas fenoxiacéticos, glifosato e paraquat. Desta forma, este projeto teve como objetivo estudar o impacto na saúde humana através de um estudo retrospectivo de levantamento de prontuários de uma comunidade agrícola. Neste estudo, foi observado uma alta incidência de doenças crônicas devido ao uso destas classes de agrotóxicos, como as doenças dermatológicas e do Sistema nervoso central: depressão, doença de Alzheimer e Parkinson.

Suporte financeiro: CNPq



Estudo da incidência de doenças inflamatórias intestinais e seu impacto na saúde humana devido à utilização de agrotóxicos

Marina Garani Ferreira¹; Fogel, B.F.² e Costa, L.T.^{1,3}

Contato: lilian.t.costa@gmail.com

¹ Faculdade de Medicina de Petrópolis – FMP

² Programa de Pós-Graduação em Biotecnologia – Inmetro

³ UFRJ – Campus Duque de Caxias

A crescente demanda de abastecimento alimentício para a população mundial gera um cenário propício para o desenvolvimento e utilização em larga escala de defensivos agrícolas. Entre os diversos problemas relacionados à exposição aos agrotóxicos, são notificados relatos de efeitos deletérios sobre o sistema nervoso, respiratório, cardiovascular, pele, olhos, alterações hematológicas e enfermidades relativas a problemas no trato gastrointestinal, como as doenças inflamatórias intestinais (IBD) - doença de Crohn e Retocolite Ulcerativa. Ambas vem apresentando um aumento significativo em sua incidência mundialmente. Diversos fatores se correlacionam com a ocorrência destas doenças, entre eles as condições ambientais e alterações da microbiota intestinal. Estudos atuais demonstram que alterar a composição microbiológica intestinal, torna o indivíduo suscetível a inúmeras doenças. Assim sendo, o estudo metagenômico dessas comunidades microbiológicas vem se intensificando na busca da compreensão de suas reais funções e relações de equilíbrio/disbiose. Através dessa abordagem, é possível acessar dados sobre genes prevalentes dentro de grupos de indivíduos, sejam eles saudáveis ou enfermos; Além de estabelecer quais colônias bacterianas se sobressaem em casos incidentes de IBD. Nesse contexto, o presente projeto avaliou se há um aumento da probabilidade da incidência de IBD devido aos efeitos da utilização/exposição aos defensivos agrícolas, através da determinação de um marcador epidemiológico que levou em consideração a incidência de quatro sintomas comuns: diarreia, constipação, dor abdominal e perda ponderal. De acordo com o novo marcador, encontramos um elevado grau de susceptibilidade para o desenvolvimento de IBD em uma comunidade agrícola, com diferença significativa para uma comunidade que não exerce atividades agrícolas ($p < 0,05$).

Suporte Financeiro: CNPq

Desenvolvimento de Material de Referência para Avaliação de Qualidade em Nanoespectroscopia Raman (TERS)

Helton Gonçalves de Medeiros^{1,2}, Bráulio Soares Archanjo¹, Thiago de Lourenço e Vasconcelos¹

Contato: hgmedeiros@inmetro.colaborador.gov.br

¹Divisão de Metrologia de Materiais (Dimat), Inmetro

²Universidade Federal do Rio de Janeiro, campus Duque de Caxias

Palavras Chave: *Nanoespectroscopia Raman, Microscopia de Feixe de Hélio, Função Transferência de Modulação, Amostra de Referência.*

A necessidade do desenvolvimento de técnicas de caracterização química em nanoescala cresce de acordo com a evolução dos métodos de produção de novos materiais nessa dimensão. No entanto, as técnicas convencionais que utilizam luz do espectro visível não são capazes de estudar nanomateriais de forma apropriada por apresentarem resolução espacial limitada pelo efeito de difração (aproximadamente $\lambda/2$). Uma das maneiras encontradas para superar esse limite de resolução consiste na utilização da informação do regime de campo próximo - ondas evanescentes que só existem próximo da amostra (<10 nm). A técnica que utiliza desta informação é conhecida como Microscopia Óptica de campo Próximo (SNOM da sigla em inglês). Mais especificamente, destaca-se a técnica de espectroscopia Raman por aumento de ponta (TERS - *Tip-Enhanced Raman Spectroscopy*).¹ Nesta técnica, o sistema de espectroscopia Raman é combinado ao sistema de Microscopia de Força Atômica (AFM), o qual posiciona uma sonda opticamente eficiente sobre a amostra. Assim, no TERS, o limite de resolução espacial está intrinsecamente ligado ao formato e ao diâmetro do ápice da ponta utilizada e sua eficiência óptica, ou a capacidade de gerar/detectar ondas evanescentes.² Devido a esse fato, diferentes tipos de pontas estão sendo desenvolvidas para esse sistema, mas nenhum desses trabalhos apresentam parâmetros metrológicos bem estabelecidos para confirmar a resolução espacial da imagem de TERS gerada. Algumas amostras utilizadas são nanotubos de carbono e bordas de grafeno. Essas amostras já foram utilizadas pelo nosso grupo de pesquisa, mas o método não mostrou ser eficaz.³ Desse modo, este projeto se propõe a apresentar uma nova maneira de determinar o limite de resolução espacial e eficiência óptica de sistemas TERS utilizando um padrão de linhas de defeitos em grafeno. Como material de partida, monocamadas de grafeno são obtidas por exfoliação mecânica e a sua caracterização se dá por microscopia óptica, espectroscopia Raman e por AFM. Em seguida, são introduzidas linhas de defeitos com diferentes frequências espaciais nas amostras de grafeno. Este procedimento é realizado utilizando a microscopia de feixe de hélio (HIM, *Helium Ion Microscopy*). O padrão de linhas de defeitos produzido é, por fim, analisado por TERS, a partir das imagens obtidas poderemos aplicar a função transferência de modulação (MTF - *Modulation Transfer Function*) e determinar a qualidade do sistema/sonda de TERS. Esta metodologia é utilizada para análises de qualidade de máquinas fotográficas.

¹ Bert Hecht, *et al.* Near-Field Optical Microscope, CA2170860C, 04 abril 1993

² Thiago L. Vasconcelos *et al.*, Tuning Localized Surface Plasmon Resonance in Scanning Near-Field Optical Microscopy Probes, *ACS Nano* 2015 9 (6), 6297-6304

³ Thiago L. Vasconcelos, Bráulio S. Archanjo, Bruno S. Oliveira, Rogério Valaski, Rafael C. Cordeiro, Helton G. Medeiros, *et al.*, Plasmon-Tunable Tip Pyramids: Monopole Nanoantennas for Near-Field Scanning Optical Microscopy. *Advanced Optical Materials*, v. 6, n. 20, p. 1800528, 2018.

Suporte Financeiro: FAPERJ, CNPq

Sensores eletroquímicos compostos por eletrodos de carbono vítreo modificados com nanotubos de carbono *multi-wall*

Letícia Alves da Silva^{1,2}, Wellerson Ramos³, Carlos Alberto Achete², Indhira Oliveira Maciel³, Joyce Rodrigues Araujo²

Contato: lasleticia16@gmail.com

¹Universidade Federal do Rio de Janeiro – Rod. Washington Luíz, KM 104 - 5 - Santo Antônio, Duque de Caxias/RJ

²Instituto Nacional de Metrologia, Qualidade e Tecnologia – Av. Nossa Sra. das Graças, 50 - Xerém, Duque de Caxias/RJ, Brasil.

³Universidade Federal de Juiz de Fora – Via Local, 880, Juiz de Fora/MG, Brasil.

Palavras chave: *Nanotubos de carbono, Métodos eletroanalíticos, Sensores.*

Métodos eletroquímicos de análise são uma alternativa aos métodos tradicionais utilizados para detecção de moléculas orgânicas, como por exemplo, o ácido ascórbico (AA). As vantagens dos métodos eletroanalíticos em relação aos métodos analíticos e cromatográficos são sua maior precisão, sensibilidade, simplicidade, baixo custo e, muitas vezes, menor tempo de análise. Neste trabalho, um eletrodo de carbono vítreo modificado por uma camada de nanotubos de carbono *multi-wall* (MWCNTs), sintetizados pelo método de deposição química em fase vapor, *chemical vapor deposition* (CVD), foi utilizado para a detecção de AA, na concentração de 5 mol L⁻¹ estando solubilizado em eletrólito de KCl 1 mol/L e solução tampão fosfato, pH=7. O principal objetivo deste trabalho consistiu em investigar o efeito da presença de carbono amorfo (CA), depositado concomitantemente aos nanotubos durante o processo de crescimento em CVD, na sensibilidade e seletividade dos eletrodos modificados. As amostras de MWCNTs foram coletadas em cinco regiões diferentes do forno de CVD – início, antes do meio, meio, depois do meio e final do forno pois acredita-se que a deposição do CA nestas regiões ocorreu de maneira diferente. Para a modificação do eletrodo de carbono vítreo, soluções dos MWCNTs foram preparadas, assim como de uma amostra contendo 100 % de CA, ambas em dimetil-formamida (DMF), em concentrações de 10 mg mL⁻¹. As soluções foram levadas ao ultrassom de ponta por 15 min, em amplitude de 20%, alternando ciclos de agitação e repouso, estando 50 s sob agitação e 10 s sob repouso. Em seguida, as soluções foram depositadas por *casting* sob o eletrodo de carbono vítreo e levadas à estufa até a evaporação completa do solvente. As medidas eletroquímicas para a detecção do AA foram coletadas por medidas de pulso diferencial, na faixa de potencial de -0,1 V a 0,6 V. A sensibilidade do eletrodo modificado por MWCNTs na detecção do AA pode ser estimada a partir do valor de sua corrente de pico, enquanto que a seletividade pode ser estimada pelo valor de sua largura à meia altura. Já o efeito de eletrocatalise é avaliado pelo potencial do pico, sendo que um deslocamento para menor valor de voltagem reflete em uma menor barreira energética para a reação de oxidação ocorrer. Em todos os casos estudados a amostra da região do forno denominada “depois do meio” obteve melhor resultado: corrente de pico 4,9x10⁻⁵ A, posição do pico anódico 0,09 V e largura a meia altura 0,14 V. Os efeitos de área superficial foram investigados pelo método de BET, apresentando um aumento proporcional de área superficial com o aumento da quantidade de CA nas amostras, indicando que o aumento de área superficial proporcionado pelo recobrimento da superfície dos nanotubos com carbono amorfo pode estar aumentando a seletividade do eletrodo.

Suporte financeiro: FAPERJ, FAPEMIG, SisNANO

Metanálise quantitativa de proteínas relacionadas ao Hepacivirus C

Maria Eduarda Alves Esteves^{1,2}, **Raissa Santos de Lima**¹, **Manuela Leal da Silva**^{1,3}

Contato: meduardae@gmail.com

¹*Diretoria de Metrologia Aplicada às Ciências da Vida – Dimav, Instituto Nacional de Metrologia, Qualidade e Tecnologia – Inmetro, Duque de Caxias/RJ – Brasil*
²*Biomedicina, Universidade Católica de Petrópolis-UCP, Petrópolis/RJ, Brasil.*
³*Universidade Federal do Rio de Janeiro-UFRJ, Macaé/RJ, Brasil.*

Palavras Chave: *Hepacivirus C, Proteína, NS3, Modelagem.*

A hepatite C é causada pelo Hepacivirus C (HCV-*Hepatitis C vírus*) e apresenta alto índice de cronicidade dentre as hepatites virais, podendo evoluir a hepatocarcinoma. A transmissão ocorre principalmente por via parenteral, mas também pode acontecer por via sexual, via vertical ou através de objetos perfurocortantes contaminados. A doença é geograficamente dispersa e estima-se a infecção de 71 milhões de pessoas por HCV em todo o mundo (WHO, 2017). Foram descritos, até os dias atuais, 7 genótipos e mais de 40 subtipos deste vírus. Dentre as proteínas do HCV encontram-se as estruturais, que participam diretamente na formação da estrutura viral, sendo elas: a C, E1, E2 e p7. As demais, tem função no metabolismo e são denominadas não estruturais, que são a NS2A, NS3, NS4A, NS4B, NS5A e NS5B. Devido à sua importância imunogênica, a proteína E2 é alvo no desenvolvimento de vacinas; por outro lado, NS3 age como uma serino protease e NS5B é uma RNA polimerase, e, devido a isto, são alvos de fármacos utilizados no tratamento da doença, como por exemplo, Glicaprevir e Pibrentasvir, respectivamente. Este trabalho tem como objetivo realizar a metanálise de proteínas relacionadas ao Hepacivirus C focando nas proteínas E2, NS3 e NSB devido a suas atividades metabólicas e na conformação viral. A primeira etapa do projeto consistiu em buscar no *Center for Biotechnology Information* (NCBI) informações sobre os genomas completamente sequenciados e as sequências das proteínas preditas, começando pela proteína NS3. Posteriormente, foi feito o alinhamento da proteína NS3 oriunda do genótipo 1 subtipo b com a estrutura tridimensional depositada no PDB similar a ela utilizando o BlastP e *Clustal Omega*. Na terceira etapa, através do *Protein Data Bank* (PDB), foram reunidas informações acerca das estruturas resolvidas experimentalmente à proteína citada. Candidatos a modelos tridimensionais para a proteína NS3 foram construídos com auxílio do programa Modeller. A validação destes candidatos a modelo ocorreu por meio do *Visual Molecular Dynamics* (VMD), obtendo dados como RMSD e gráfico de Ramachandran para que fosse selecionado o modelo que representaria a proteína alvo. Como resultado da etapa de alinhamento relacionadas à proteína NS3 1b com estrutura já resolvida, obteve-se valores de identidade e cobertura iguais a 98% com a proteína Uniprot (sp|P26663|1027-1657). Escolhido um molde, NS3 1b (PDBid 3O8B), foram gerados 100 candidatos a modelo da proteína utilizando Modeller, sendo selecionado o de número 41 com valor de RMSD 0,208 Å, DOPEscore de 144778.35938, 95.8% dos resíduos de aminoácidos na região favorável do gráfico de Ramachandran e 0% na região proibida. Como perspectiva do projeto, será realizado o *redocking* da proteína usando o programa Auto Dock Vina para a validação dos parâmetros necessários para o *docking* e, em seguida, a etapa de *Virtual Screening* visando a busca e o desenvolvimento de novos fármacos.

Suporte financeiro: CAPES-BioComputacional e Inmetro



Desenvolvimento do portal ASAProt: Sistema Computacional para Anotação Estrutural em Larga Escala

Ricardo Cardozo de Barros^{1,2}, Caio Bulgarelli¹ e Manuela Leal da Silva^{1,3}

Contato: rcbarrros@faeterj-petropolis.edu.br

¹*Diretoria de Metrologia Aplicada às Ciências da Vida – Dimav, Instituto Nacional de Metrologia, Qualidade e Tecnologia – Inmetro, Duque de Caxias/RJ – Brasil*

²*Tecnologia da Informação, Faeterj Petrópolis, Petrópolis/RJ, Brasil.*

³*Universidade Federal do Rio de Janeiro-UFRJ, Macaé/RJ, Brasil.*

Palavras-chave: ASAProt, *predição funcional de proteínas*, .NET, ASP.NET Core MVC

O ASAProt (*Automatic Structural Annotation of Proteins*), é uma ferramenta de alto rendimento desenvolvida para prever funções para proteínas através da análise de sua sequência de resíduos de aminoácidos e estrutura tridimensional de proteínas. A ferramenta usa vários bancos de dados como fonte de informação para anotar proteínas, dentre eles NCBI (NR), SwissProt, TrEMBL, COG e SMART para anotação sequencial e SCOPe e CATH para anotação estrutural. Seu portal atualmente encontra-se com uma divergência entre o estilo desenvolvido e as cores simbólicas do logo e sua manutenção fica à mercê do SINAPAD, onde terceiros que compõem esse centro ficam responsáveis pelas alterações e manutenções do site, fazendo com que algumas alterações demorem a serem feitas por causa da demanda de outros portais. Esse projeto tem como objetivo desenvolver um novo portal para o ASAProt a fim de corrigir erros, melhorar a disponibilidade de suas funcionalidades e centralizar toda parte da manutenção. Pensando nessa melhoria, optou-se por utilizar a linguagem ASP.NET Core MVC, baseada em .NET Core, uma versão multi-plataforma do .NET Framework. ASP.NET core é um framework mais simples, suportando outras plataformas e containers para o seu desenvolvimento. O padrão MVC (modelo-vista-controlador) é uma divisão em três princípios: Modelo, Exibição e Controlador, deixando assim aplicação mais fácil de manusear. Quando o usuário faz uma requisição ela é processada no controlador e o mesmo através do resultado devolve o melhor modelo e exibição. Além disso sua linguagem está disponível no Visual Studio. Atualmente foram melhoradas e implementadas novas páginas no portal tais como: index, manual, equipe, contato, login, área de submissão e pesquisa. Todas as páginas foram totalmente refeitas em um novo *layout* de cores e de organização de conteúdo. O novo portal está com cores mais representativas do seu símbolo e mais interativo com o usuário. Na aba de submeter o *Job* o usuário tem a opção de escolha dos bancos de dados que serão utilizados e ainda tem a opção de selecionar se quer aplicar os padrões do MHOLline em seu *Job*. Futuramente as partes faltantes serão integradas ao portal, como as que ficam responsáveis pelo controle dos *Jobs*, para que o usuário tenha maior entendimento sobre o andamento do mesmo, ou seja, se estão rodando, se foram cancelados, finalizados ou se algum erro por ventura tenha ocorrido. Feito isso a próxima compreende fazer os testes dos *Jobs*, para ver se está rodando todas as funcionalidades citadas, além de testes de interação com o banco de dados, que implica na parte de login, cadastro e pesquisa. Com todos os testes atendendo as expectativas o último passo é hospedar o portal em um container utilizando a ferramenta Docker.

Suporte financeiro: CAPES-BioComputacional e Inmetro.



Estudo da influência do substrato nas medidas nanotribológicas de materiais bidimensionais

Thiago G-L. Brito^{1,2}, Clara M. Almeida¹

Contato: thillbritt@gmail.com

¹ *Laboratório de Fenômenos de Superfície (LAFES), Divisão de Metrologia de Materiais (DIMAT), Instituto Nacional de Metrologia, Qualidade e Tecnologia (INMETRO) –*

² *Universidade Federal do Rio de Janeiro - UFRJ*

Palavras Chave: *Grafeno, Nanotribologia, AFM, Atrito*

Materiais bidimensionais (2D), como grafeno, tem atraído grande interesse da comunidade científica nos últimos anos, devido à possibilidade de usá-los em novos dispositivos nanoeletromecânicos. Nestes, o controle de movimento em nanoescala é influenciado pelas forças de atrito entre as partes componentes do dispositivo. Nosso objetivo neste trabalho é estudar essa interação do contato, conhecida como tribologia, desses materiais bidimensionais. O microscópio de força atômica operando em modo de força lateral (LFM) tem sido utilizado como principal ferramenta de investigação experimental de atrito em nanoescala. No LFM uma ponta de dimensões nanométricas, representando uma única aspereza, é colocada em contato com a superfície do material em análise, e movimentada de maneira controlada. Essa interação nos possibilita medir o atrito entre os materiais a partir da torção desta ponta. Em um estudo recente, foi observada uma grande anisotropia na força de fricção no grafeno multicamada em relação às direções armchair (AC) e zigzag (ZZ), com o atrito na direção AC podendo ser até 80% maior que na direção ZZ, dependendo da força normal aplicada. No grafeno monocamada, acredita-se que aconteça um enrugamento da folha durante o movimento relativo gerando uma 'onda' (puckering), ou deformação vertical, que acompanha o movimento da ponta e influencia fortemente as forças de atrito envolvidas. A possibilidade de ocorrer essa deformação vertical é extremamente dependente da interação do material com o substrato logo abaixo dele. Neste projeto, pretendemos contribuir para o entendimento desse processo de fricção estudando a influência do substrato na dinâmica do atrito de materiais 2D através do uso do LFM, principalmente grafeno. O grafeno foi esfoliado em diferentes substratos, como SiO₂ e mica e identificado através de microscopia ótica e espectroscopia Raman. O atrito e a rugosidade foram avaliados em função do substrato. Esperamos que os resultados obtidos neste projeto ajudem na compreensão do assunto, permitindo uma maior convergência entre as diferentes explicações propostas para os mecanismos de fricção em materiais 2D.

Suporte financeiro: FAPERJ

Modificação de Grafeno por Microscopia de Íons de Hélio e caracterização por TERS

William Ferreira da Silva¹, Helton Gonçalves¹, Braulio S. Archanjo¹, Thiago Vasconcelos¹

Contato: williamsilvakse@gmail.com

¹*Divisão de materiais(DIMAT), Inmetro, Av. Nossa Senhora das Graças, 50 – Xerém, Duque de Caxias – RJ – Brasil*

Palavras Chave: *HIM, Grafeno, TERS, modificação*

A pesquisa de materiais bidimensionais tem atraído atenção devido suas possíveis aplicações em eletrônica, spintrônica e diversas outras áreas. Com o objetivo de manipular de forma mais exata as propriedades de tais materiais, técnicas como a litografia de elétrons ou íons foi desenvolvida, possibilitando a criação de padrões e defeitos pontuais. Dentre tais técnicas de litografia, se destaca a Microscopia de íons de Hélio(HIM), técnica em que um gás de Hélio é ionizado por um tip de tungstênio e acelerado por uma diferença de potencial, possibilitando o corte do material a partir do foco desse feixe e controle de corrente e tempo de varredura em um determinado ponto de interesse. O Grafeno, material utilizado nesse trabalho, foi inicialmente feito pela técnica de esfoliação mecânica e posteriormente analisado por Espectroscopia Raman e Microscopia de Força Atômica para averiguação da existência de monocamada. Os cortes foram realizados em cima do grafeno e analisados pela técnica de Espectroscopia Raman por aumento de ponta(TERS - Tip Enhanced Raman Spectroscopy). Em tal técnica, utiliza-se uma ponta de AFM acoplada à um sistema de espectroscopia Raman para aumentar a eficiência do sistema possibilitando a coleta de ondas evanescentes. Tal melhora ocorre pelo fato do equipamento conseguir superar o limite de difração da luz fazendo com que a resolução do aparato deixe de depender do comprimento de onda e passe a depender do tamanho do ápice da probe utilizada. A partir de tais técnicas se tornou possível a criação de defeitos com resolução superior aos atualmente feitos, utilizando um Feixe de íons focalizados(FIB - Focused Ion Beam), atingindo larguras de aproximadamente 10 nm elucidando também a dose ideal e o padrão operacional para promover defeitos mantendo todo o resto da estrutura do material intacta.

Suporte financeiro: CNPq.

SASBT: Uma nova ferramenta para busca de alvos biológicos em amostras sequenciadas por métodos baseados em *shotgun*

Vinícius Santos de Pontes^{1,2}, Rafael Nicolay Baptista da Silva¹ e Manuela Leal da Silva^{1,3}

Contato: viniciuspontes.biotec@gmail.com

¹*Diretoria de Metrologia Aplicada às Ciências da Vida – Dimav, Instituto Nacional de Metrologia, Qualidade e Tecnologia – Inmetro, Duque de Caxias/RJ – Brasil*

²*Ciência da Computação, Universidade Federal Rural do Rio de Janeiro, Nova Iguaçu/RJ, Brasil.*

³*Universidade Federal do Rio de Janeiro-UFRJ, Macaé/RJ, Brasil.*

Palavras-chave: SASBT, busca de sequências, metagenômica, metaproteômica, biocombustíveis

Apesar do crescimento exponencial da quantidade de informações depositadas nos bancos de dados, estes são subutilizados devido à falta de ferramentas capazes de extrair informações úteis dos mesmos. Um exemplo disto é a carência de ferramentas capazes de lidar com os dados obtidos a partir de sequenciadores baseados no método de *shotgun*. Estas tecnologias permitem que sequências com mais de 1.000 nucleotídeos sejam sequenciadas de forma expressivamente mais rápida do que com o método de Sanger através da fragmentação das sequências originais em outras menores, as reads. Todavia, após o processo, têm-se apenas fragmentos da sequência submetida, exigindo *softwares* especializados para a sua análise. Assim, um dos desafios é a busca de alvos biológicos (sequências proteicas ou gênicas) em amostras sequenciadas por métodos baseados na técnica supracitada, devido ao grande número de reads geradas e o fato das mesmas representarem apenas fragmentos aleatórios das sequências originais. Para resolver este problema, desenvolvemos o *Software for Automated Search of Biological Targets* (SASBT), combinando técnicas da bioinformática como alinhamento local, alinhamento global e um algoritmo para a contiguação de sequências baseado em uma referência em um workflow automatizado através da linguagem de programação C. A aplicação será de grande ajuda nas mais diversas áreas, facilitando na identificação de antígenos, enzimas com atividades lignocelulolíticas e até mesmo o estudo de mutações de proteínas em amostras sequenciadas. A fim de testar o software, o mesmo foi empregado para tentar identificar a presença de 48 enzimas com atividades lignocelulolíticas na amostra sequenciada do suco gástrico do caracol *Achatina fulica*. Como resultado, foi possível inferir a presença de 23 das 48 sequências submetidas, permitindo o direcionamento de pesquisas da indústria de biocombustíveis de segunda geração a respeito deste organismo para estas enzimas.

Suporte financeiro: Inmetro e CAPES-BioComputacional.