



**CENTRO NACIONAL
DE PESQUISA EM
ENERGIA E MATERIAIS**

RELATÓRIO SEMESTRAL

PARTE 1



MINISTÉRIO DA
CIÊNCIA, TECNOLOGIA
E INOVAÇÃO



Este relatório foi aprovado pelo Conselho de Administração
em Reunião Ordinária realizada em

2023

RELATÓRIO SEMESTRAL

PARTE 1

**MINISTÉRIO DA CIÊNCIA,
TECNOLOGIA E INOVAÇÃO**

Luciana Barbosa de Oliveira Santos
Ministra de Estado
Luis Manuel Rebelo Fernandes
Secretário Executivo

CONSELHO DE ADMINISTRAÇÃO

Rogério Cezar de Cerqueira Leite (*Presidente*)
Reginaldo dos Santos (*Vice-Presidente*)
Antônio Rubens Britto de Castro
Elias Ramos de Souza
Jailson Bittencourt de Andrade
Júlio César Piffero de Siqueira
Marcela Chami Gentil Flores
Márcia Cristina Bernardes Barbosa
Maurilio Biagi Filho
Patrícia Rieken Macedo Rocco
Paulo Eduardo Artaxo Netto
Raphael Padula
Silvia Stanisçuaski Guterres
Virgínia Sampaio Teixeira Ciminelli

*Esta é a composição do Conselho de Administração
responsável pela aprovação do Relatório Semestral 2023*

DIRETORES

Antonio José Roque da Silva
Diretor-Geral

Harry Westfahl Jr.
Diretor do Laboratório Nacional de Luz Síncrotron - LNLS

Maria Augusta Borges Cursino de Freitas Arruda
Diretora do Laboratório Nacional de Biociências - LNBio

Eduardo do Couto e Silva
Diretor do Laboratório Nacional de Biorrenováveis – LNBR

Rodrigo Barbosa Capaz
Diretor do Laboratório Nacional de Nanotecnologia – LNNano

Adalberto Fazzio
Diretor da Ilum Escola de Ciência

Renata de Vasconcellos Aquino
Diretora de Serviços Compartilhados

James Francisco Citadini
Diretor-Adjunto de Tecnologia

O Centro Nacional de Pesquisa em Energia e Materiais – CNPEM, pessoa jurídica de Direito Privado sem fins lucrativos, é a nova denominação da Associação Brasileira de Tecnologia de Luz Síncrotron, qualificada como Organização Social pelo Decreto n. 2.405, de 26 de novembro de 1997. O CNPEM atua no desenvolvimento de ciência, tecnologia e inovação por meio de seus quatro Laboratórios Nacionais: Laboratório Nacional de Luz Síncrotron (LNLS); Laboratório Nacional de Biociências (LNBio); Laboratório Nacional de Biorrenováveis (LNBR) e Laboratório Nacional de Nanotecnologia (LNNano). O CNPEM também é sede da Ilum Escola de Ciência, que mantém o curso de Bacharelado em Ciência e Tecnologia. Todos os direitos reservados ao Centro Nacional de Pesquisa em Energia e Materiais (CNPEM). Os textos contidos nesta publicação podem ser reproduzidos, armazenados ou transmitidos desde que citada a fonte. O Relatório Semestral de 2023 é parte integrante das atividades desenvolvidas no âmbito do Contrato de Gestão MCTI/CNPEM.

SUMÁRIO

1		O CNPEM p. 8
2		Programa de Usuários Externos p. 36
3		Programas Estratégicos de Pesquisa e Desenvolvimento p. 42
4		Programa de Tecnologias Habilitadoras p. 78
5		Projetos Estruturantes p. 88
6		Apoio à Geração de Inovação p. 128
7		Treinamento, Educação e Extensão p. 138
8		ANEXO I - Indicadores de Desempenho p. 146

Palavras do diretor-geral

O primeiro semestre de 2023 marca o retorno de usuários regulares de síncrotron no país, o que é um marco muito importante para o CNPEM e o Sirius. No segundo semestre de 2022 foi realizado o primeiro processo de seleção regular de propostas de pesquisa para o Sirius, e neste primeiro semestre 436 pesquisadores do Brasil e do exterior se beneficiaram do uso das linhas de luz do Sirius através da realização de 111 propostas de pesquisa. Apesar da Fase I do Sirius ainda não estar totalmente concluída, o início da operação regular do Sirius para usuários em seis linhas de luz – das 14 previstas na Fase I – é um resultado importantíssimo para o Projeto. Esse retorno regular de usuários de síncrotron, associado à retomada plena das operações de todas as instalações após o período da pandemia, resultou em um crescimento de 48% no número total de pesquisadores externos beneficiados em comparação ao mesmo período do ano passado, permitindo que o CNPEM alcançasse números de atendimento de usuários externos em suas instalações abertas próximos aos do primeiro semestre de 2019, último período de operação regular do UVX.

Outro importante marco para o semestre, que também resulta do retorno às atividades regulares pós-pandemia, foi a volta do evento Ciência Aberta após um intervalo de três anos. A questão da comunicação sobre o fazer ciência e sobre o impacto científico para a sociedade

de forma ampla é uma atividade central não só no Brasil, mas no mundo todo. Dessa forma, no Ciência Aberta o CNPEM abriu as suas portas para a comunidade local, que pôde se informar sobre as pesquisas realizadas no Centro e conhecer de perto as dependências do Sirius. Cerca de 16 mil pessoas visitaram o CNPEM ao longo de um dia de evento, sendo recepcionadas por mais de 800 voluntários.

O CNPEM também deu continuidade às atividades de pesquisa e desenvolvimento internas, orientadas pelos seus seis Programas Estratégicos de P&D – Saúde, Energias Renováveis, Materiais Renováveis, Agroambiental, Tecnologias Quânticas e Ciência com Luz Síncrotron – e pelos Programas de Tecnologias Habilitadoras, com alguns destaques apresentados no Relatório. Ainda em relação ao Projeto Sirius, além do mencionado início de operação regular para usuários externos, destaca-se também o início da operação em modo top-up, que era uma das metas importantes do Projeto, bem como a operação da fonte de luz síncrotron em alta estabilidade, com parâmetros muito melhores que a meta usual de estabilidade de 10% do tamanho do feixe de elétrons estabelecida na maioria das novas fontes de luz síncrotron de 4ª geração. Isso traz um importante impacto para os experimentos realizados no Sirius.

Nos demais projetos estruturantes em curso no CNPEM, vale destacar as atividades para o

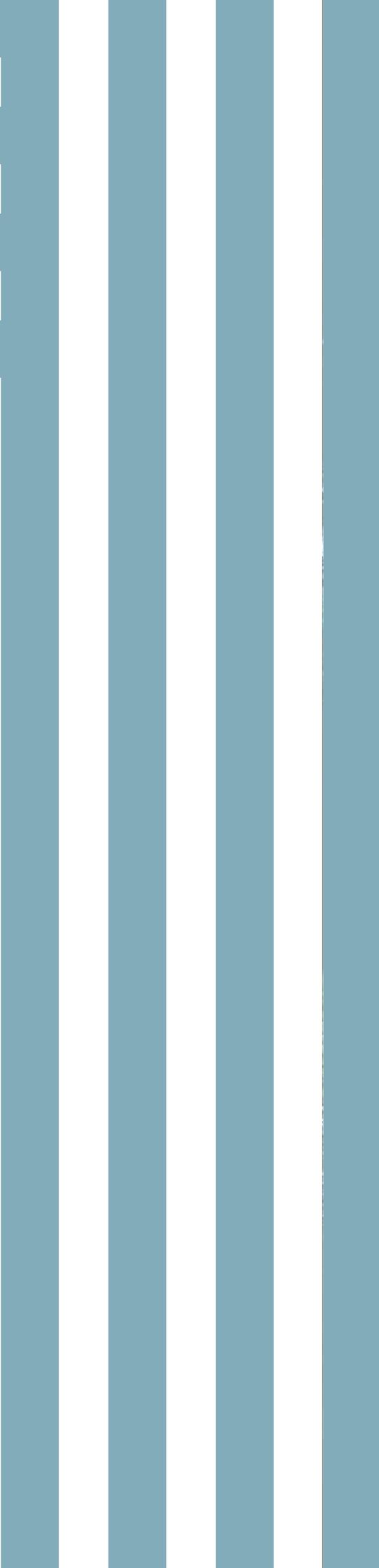
Laboratório Nacional de Máxima Contenção Biológica (LNMCB), para o qual se iniciaram as tratativas para implantação de um laboratório de treinamento NB4, além dos desenvolvimentos para linhas de luz que irão operar em ambiente de biocontenção, e o bom andamento das obras da Plataforma de Combate a Vírus Emergentes (PCVE), com previsão de conclusão do laboratório NB3 no início do segundo semestre de 2023. Neste semestre também ocorreu a finalização do segundo processo seletivo para o Bacharelado em Ciência e Tecnologia da Ilum Escola de Ciência, que recebeu um número expressivo de inscritos, com aprovados provenientes de 13 estados diferentes do País.

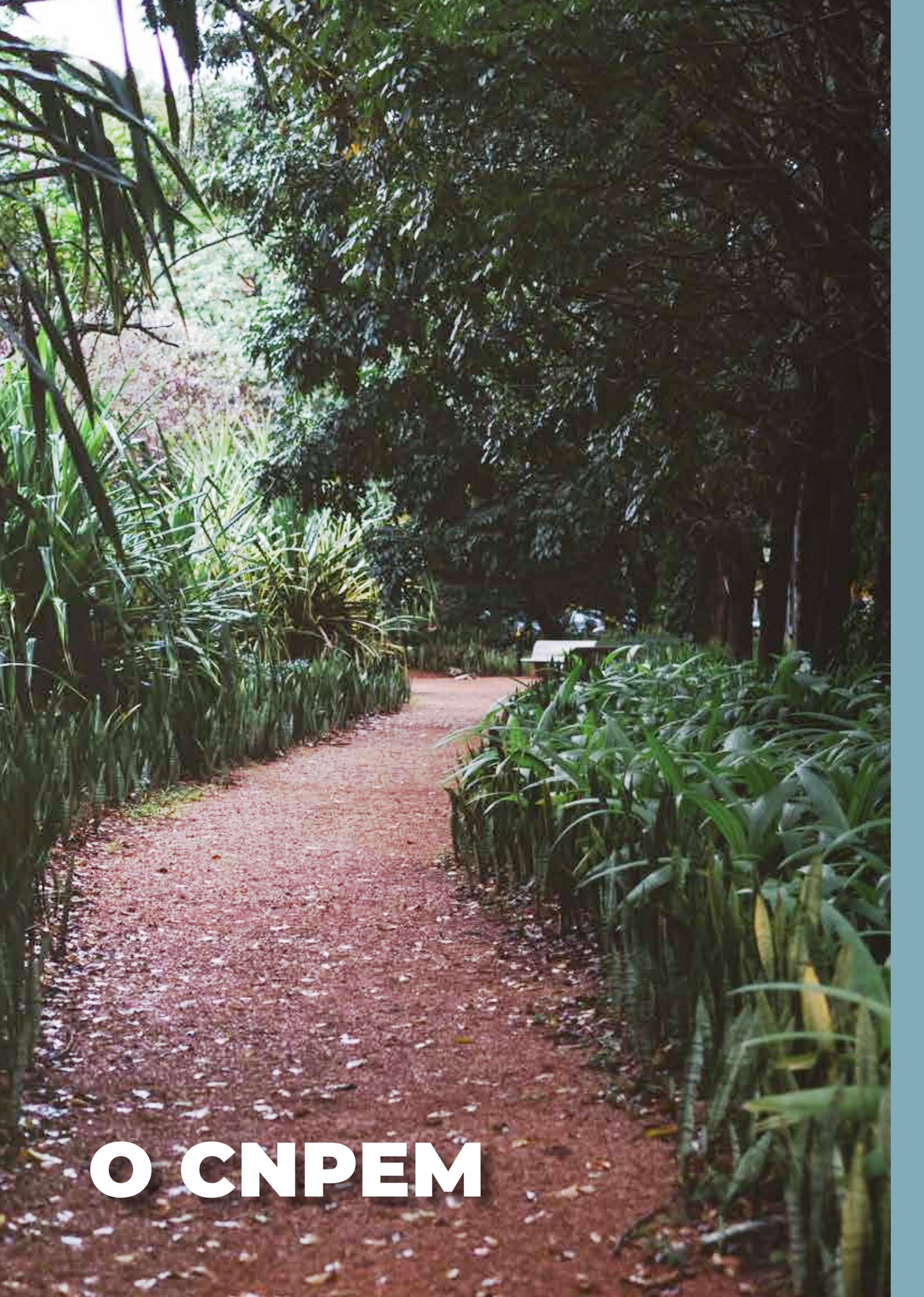
Este relatório apresenta esses e outros destaques do semestre, e está estruturado em duas partes: A parte I resume os resultados institucionais com os principais números do semestre, e a descrição de avanços qualitativos nos Programas Estratégicos e Projetos Estruturantes do Centro, além da apresentação das atividades desenvolvidas para o apoio à inovação, treinamento e capacitação de recursos humanos, destaques de comunicação, recursos humanos e gestão orçamentária e financeira, incluindo ainda o anexo que apresenta o resultado semestral do quadro de indicadores quantitativos do Contrato de Gestão. Na parte II do relatório consta um anexo relativo à ficha sumarizada e evidências

dos indicadores qualitativos específicos de projetos e programas de P&D.

Por fim, vale chamar atenção para os desafios impostos à sustentabilidade orçamentária do CNPEM. Os recursos contratados no 40º Termo Aditivo, no ano de 2022, ainda não foram repassados em sua totalidade, o que impactou no planejamento e execução das atividades do Centro, especialmente, na montagem das linhas de luz do Sirius. A contratação de novos recursos, em 2023, deu-se por meio da assinatura do 42º Termo Aditivo, em que foram contratados, majoritariamente, recursos para a Operação do CNPEM. Entretanto, o recurso contratado é pouco expressivo frente às necessidades orçamentárias para a manutenção de um Centro de pesquisa do porte do CNPEM. Esse tem sido um sério e recorrente risco para o funcionamento em alto padrão do Centro, influenciando diretamente o cronograma de execução de suas atividades, principalmente para o Projeto Sirius. Novamente, diante desses enormes desafios e incertezas, contamos com o apoio e as diretrizes do Conselho de Administração do CNPEM, do MCTI e da Comissão de Acompanhamento e Avaliação do Contrato de Gestão (CAA-CG).

Antonio José Roque da Silva
Diretor-Geral do CNPEM





O CNPEM

Este capítulo apresenta uma síntese dos principais resultados do Centro no primeiro semestre de 2023. São divulgados os números mais relevantes associados às atividades-fim da organização, além de informações sobre recursos humanos, comunicação e gestão orçamentária e financeira.



O **Centro Nacional de Pesquisa em Energia e Materiais (CNPEM)** é uma associação privada, sem fins lucrativos, qualificada como Organização Social pelo Poder Público Federal em 1997 e supervisionada pelo Ministério da Ciência, Tecnologia e Inovação (MCTI). O CNPEM opera quatro Laboratórios Nacionais – Laboratório Nacional de Luz Síncrotron (LNLS); Laboratório Nacional de Biociências (LNBio); Laboratório Nacional de Biorrenováveis (LNBR); e Laboratório Nacional de Nanotecnologia (LNNano) – e é responsável por um dos projetos mais complexos da ciência brasileira, o Sirius. Os Laboratórios Nacionais são singulares pela combinação de competências e instalações experimentais e por se caracterizarem como centros de pesquisa de referência abertos, multiusuários e interdisciplinares. O CNPEM, por meio de seus Laboratórios Nacionais, desempenha papel estratégico junto ao MCTI, como indutor e executor das políticas públicas de ciência, tecnologia e inovação, em particular nas áreas de aceleradores de partículas, instrumentação para uso de luz síncrotron, biotecnologia e fármacos, nanociência e nanotecnologia e pesquisa básica e aplicada relacionadas à bioenergia. Adicionalmente, o CNPEM busca manter forte interação com empresas dos setores de agricultura, indústria e serviços, contribuindo para o desenvolvimento tecnológico em áreas prioritárias para o País.

As atividades do CNPEM são organizadas

em quatro eixos de atuação. Estes eixos são dinâmicos, interconectados e se realimentam, viabilizando o êxito da missão institucional do Centro a partir execução adequada e balanceada de atividades nesses quatro eixos.

Os **Programas Estratégicos** descritos neste relatório contemplam atividades do Eixo 1, com o Programa de Usuários Externos, que visa o atendimento de usuários acadêmicos do Brasil e do exterior em instalações científicas de ponta, apoio na condução dos experimentos e no acesso ao Centro, especialmente daqueles usuários oriundos de localidades distantes. As atividades do Eixo 2 são descritas nos Programas Estratégicos de P&D, através da condução de pesquisa interna em temas estratégicos para o País. Atividades transversais a todos os eixos de atuação são empreendidas no Programa de Tecnologias Habilitadoras, que está relacionado ao desenvolvimento de técnicas e métodos de pesquisa, tecnologias e instrumentação científica que servem de apoio para os quatro Eixos de atuação.

Os **Projetos Estruturantes**, por sua vez, estão relacionados à implantação de infraestruturas de pesquisa e criação de competências científicas que servirão de forma transversal aos quatro eixos de atuação do Centro. Estes projetos exigem um amplo esforço de P&D interna para a criação de soluções aos desafios relacionados à construção de infraestruturas de alta complexidade.



MISSÃO Integrar competências singulares para o desenvolvimento científico e tecnológico e o apoio à inovação em energia, materiais e biociências.

VISÃO Ser reconhecido como um Centro Nacional de Pesquisas dotado de competências para criar conhecimento no estado da arte e desenvolver soluções criativas nas áreas de energia, materiais e biociências.

EIXOS DE ATUAÇÃO A atuação do CNPEM pode ser desdobrada em quatro eixos:

Eixo 1
Instalações abertas a usuários externos

Eixo 2
Pesquisa e Desenvolvimento *in-house*



Eixo 3
Apoio à geração de inovação

Eixo 4
Treinamento, Educação e Extensão

O CNPEM em números



TOTAL CNPEM

44.681

horas de uso das instalações

34%

dedicadas a propostas de pesquisas externas

404 propostas de pesquisas externas realizadas,

beneficiando

958

pesquisadores externos

LINHAS DE LUZ DO SIRIUS

12.833

horas de uso das linhas de luz

39%

dedicadas a propostas de pesquisas externas

111 propostas de pesquisas externas realizadas,

beneficiando

436

pesquisadores de

78

instituições

73%

instituições nacionais

27%

estrangeiras

DEMAIS INSTALAÇÕES

31.848

horas de uso das instalações

32%

dedicadas a propostas de pesquisas externas

293 propostas de pesquisas externas realizadas,

beneficiando

591

pesquisadores de

72

instituições

86%

instituições nacionais

14%

estrangeiras

95 publicações de pesquisadores externos	5,0 Mediana do Fator de Impacto
132 publicações de pesquisadores internos	5,4 Mediana do Fator de Impacto
50% em coautoria internacional	45% classificadas no primeiro quartil

296 pesquisadores colaboradores	Pós-Doutorado	71
	Doutorado	108
	Mestrado	40
	PCI	13
	IC	50
	Outras Modalidades *	26

*Outras modalidades: pesquisador visitante, bolsista técnico, bolsista Fundep e estagiário Serapilheira

176 estagiários contratados	Nível Superior	145
	Nível Técnico	31

30 projetos vigentes em parceria com empresas	Fármacos e medicamentos	6
	Petróleo e gás	6
	Energias renováveis	6
	Química verde	4
	Materiais avançados	3
	Métodos e dispositivos para a área da saúde	2
	Instrumentação avançada	2
	Agricultura e agropecuária	1

1 novo projeto em parceria com empresas contratado no ano

1835 visitantes vieram ao CNPEM no primeiro semestre de 2023

3 Eventos de Capacitação	2 Eventos Científicos	5 Outros eventos
74 participantes externos	149 participantes externos	16.125 participantes externos (cerca de 16 mil no Ciência Aberta)

Recursos humanos



No primeiro semestre de 2023, o CNPEM contou com um quadro de 881 funcionários em regime CLT ativos em 30/06/2023, distribuídos entre os quatro Laboratórios Nacionais, Diretoria Adjunta de Tecnologia (DAT), Ilum Escola de Ciência, Diretoria de Serviços Compartilhados (DSC) e Diretoria Geral (DG). Esse número representa um crescimento de cerca de 6% do quadro de funcionários em relação a dezembro/22, justificado pelos esforços voltados para a execução de projetos científicos e tecnológicos, distribuídos nos Programas do Fundo Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (FNDCT), projeto Sirius e outros projetos em colaboração com empresas privadas.

O quadro de funcionários esteve distribuído entre as unidades do CNPEM na seguinte proporção: 27% no LNLS; 13% no LNBio; 12% no LNBR; 9% no LNNano; 15% na DAT; 3% na Ilum; 15% na DSC; 6% na DG. Esse pessoal dedicou-se à realização das atividades finalísticas dos Laboratórios Nacionais, DAT e Ilum nos quatro eixos de atuação do CNPEM, bem como às atividades que dão suporte à gestão estratégica, operacional e administrativa do campus.

Considerando apenas os Laboratórios Nacionais e a Diretoria Adjunta de Tecnologia, 658 funcionários estiveram dedicados às atividades de pesquisa e desenvolvimento científico e tecnológico, o que representa 97,3% do pessoal; os 2,7% restantes são constituídos por 4 diretores e por 14 funcionários dedicados a atividades de apoio administrativo à gestão dos Laboratórios e

da DAT em junho/2023.

A Diretoria de Serviços Compartilhados foi estruturada em 4 divisões: Processos Administrativos (DPA); Recursos Humanos (DRH); Manutenção e Utilidades (DMU) e Tecnologia da Informação (DTI), com o objetivo de promover maior especialização e eficiência nos serviços prestados ao campus. A DPA ficou constituída por 48 funcionários responsáveis pelas aquisições de materiais e serviços nacionais e importados, assessoria de contratos, gestão de convênios e projetos e gestão de recursos financeiros e biblioteca; a DRH, constituída por 24 funcionários, compreende os processos de administração de pessoal, medicina do trabalho, recrutamento e seleção, treinamento, e desenvolvimento humano e organizacional; a DMU, com 33 funcionários, responde pelas atividades de suporte à operação e manutenção da infraestrutura do campus; e a DTI, com 19 funcionários, responde pelos sistemas de informação, infraestrutura de redes e cibersegurança e pelo suporte em TI oferecido ao campus do CNPEM.

Nas assessorias da Diretoria Geral, 54 funcionários dedicaram-se às atividades de comunicação institucional, planejamento e avaliação, apoio à inovação, auditoria interna, assessoria jurídica, de governança e compliance, assessoria institucional e proteção radiológica.

As atividades da Ilum Escola de Ciência foram conduzidas por 23 colaboradores ativos no final de junho de 2023.

Evolução do Quadro de Funcionários CLT 2011 a 2023 (1º semestre)

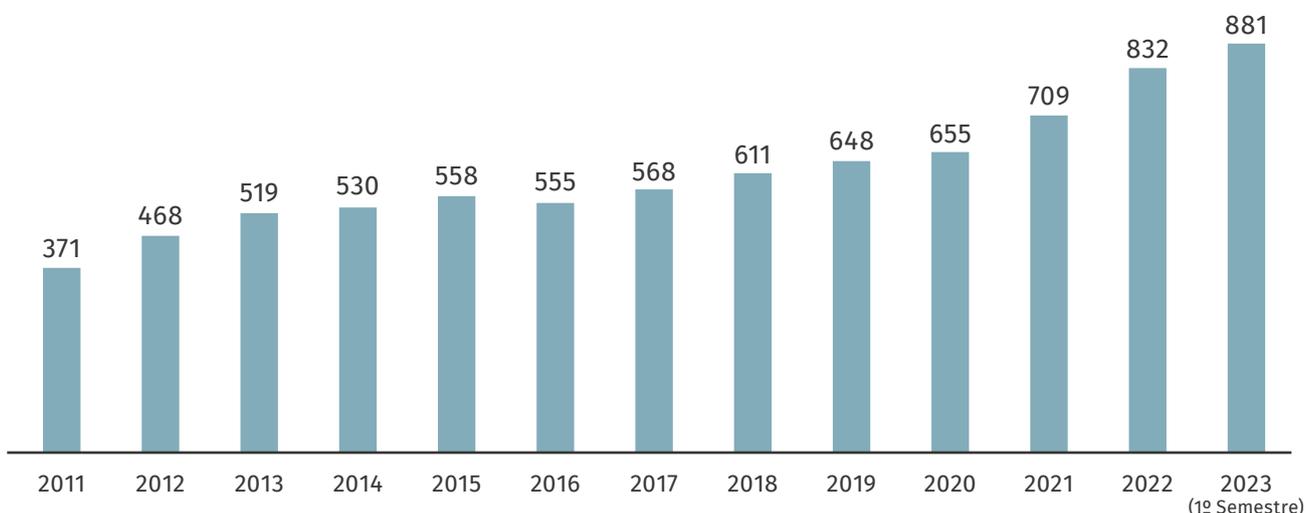


Tabela 1. Distribuição do quadro de funcionários CLT no primeiro semestre de 2023. Os números não incluem os diretores.

	LNLS	LNBio	LNBR	LNNano	DAT	Ilum	DSC	DG	Total
Científica	48	33	21	16	-	11	-	-	129
Especialista	55	38	30	21	37	2	10	9	202
Gerencial	1	3	4	2	6	-	12	10	38
Profissional	80	29	35	26	46	2	10	4	232
Técnica	52	7	16	12	40	2	30	1	160
Administrativa	3	3	2	2	4	5	65	29	113
Total	239	113	108	79	133	22	127	53	874



Comunicação e articulação institucional



O Ciência Aberta está de volta!

No dia 17 de junho, as portas do campus do CNPEM foram reabertas à comunidade para mais uma edição do Ciência Aberta, após um hiato de 3 anos causado pela pandemia, reunindo mais de 16 mil pessoas interessadas na atuação da instituição. Estudantes, grupos de aposentados, famílias e crianças de todas as idades tiveram a oportunidade de visitar o Sirius e interagir com mais de 85 atividades distribuídas por todo campus. O público foi recebido por mais de 800 voluntários, dentre funcionários, estagiários e bolsistas do Centro, que se organizaram para apresentar suas atividades, tirar dúvidas, traduzir conceitos da ciência, reproduzir experimentos e inspirar a curiosidade pelos mais diversos temas da ciência. Além de visitar o Sirius, o público pode interagir com diferentes estandes, participar

de oficinas, palestras e desfrutar de conversas informais com pesquisadores em áreas de descanso e praças de alimentação distribuídas pelo campus. A entrada foi gratuita, mas o público foi convidado a doar um quilo de alimento não perecível. Ao final, foram recebidas 5,4 toneladas de doativos, destinados a instituições de assistência social da região de Campinas. Com apoio da Prefeitura Municipal de Campinas, o evento recebeu mais de 30 ônibus com grupos de estudantes, principalmente do Ensino Fundamental II e Ensino Médio - fortalecendo a relação do CNPEM com jovens da rede pública de ensino. A avaliação do evento contou com 7.892 respostas que evidenciam o sucesso da iniciativa entre o público, uma vez que cerca de 85% dos participantes avaliaram o evento como excelente ou bom.

5. É a sua primeira vez no evento?



8. No geral, como você avalia o Ciência Aberta?



12. Qual a probabilidade de você recomendar o Ciência Aberta?



- @sal há 9 dias
Parabéns CNPEM pelo evento lindo! Que vídeo inspirador! Já ansiosa pelo próximo

Responder
- @fot há 10 dias
Dia inesquecível pra mim e minha família. Obrigada pela oportunidade em conhecer esse espaço incrível.

Responder

- adria 1sem · ❤️
Claro que já estou com saudades! Dia incrível! Foi um dia de VIVER O SABER.

1 curtida Responder Ver tradução
- apau ❤️
Muitas saudades 🍌🍌🍌 voltaria com certeza 🥰 Amei tudo

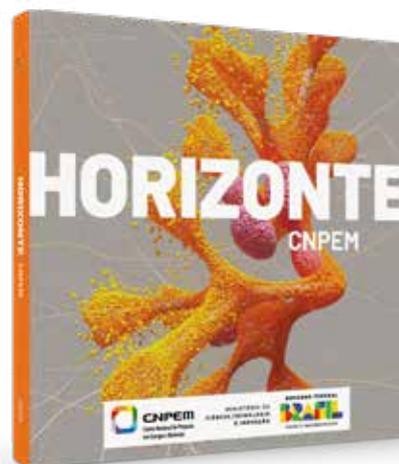
1 curtida Responder Ver tradução
- quelp 1sem · ❤️
Foi lindo!!! ❤️

2 curtidas Responder Ver tradução
- vania 4sem
Foi maravilhoso! Tanta coisa interessante pra ver! Tinha que ser um festival, um fim de semana inteiro! Parabéns a todos os voluntários, muito atenciosos, simpáticos e com aquele brilho nos olhos de quem faz o que ama! Demaaaais! Orgulho de ter o CNPEM fazendo ciência no país! 🍌🍌🍌
- dani 4sem
Foi incrível, agradeço o trabalho e a paixão de todos os envolvidos.
- maril 4sem · ❤️
Foi demais! Meus filhos falam até hoje desse dia. Já aguardamos ansiosamente o próximo! ❤️

7 curtidas Responder Ver tradução

Horizonte CNPEM

Um novo material impresso sobre o CNPEM foi produzido no primeiro semestre deste ano. A publicação apresenta a instituição, suas frentes de ação, principais resultados e destaca como suas atividades e singularidades dialogam com as necessidades do século XXI e privilegiam as vantagens comparativas do País, com foco em nanotecnologia, biociências, biotecnologia e biorrenováveis, educação e engenharia e instrumentação científica de ponta. O material Horizonte CNPEM foi distribuído para cerca de 1000 contatos com relevante atuação no cenário nacional de pesquisa, desenvolvimento e inovação.



Estreitar e ampliar laços

A base de contatos de assinantes de informativos do CNPEM foi revisada durante o primeiro semestre. Concomitantemente, estratégias de ampliação da base foram implementadas. Atualmente, inscritos em eventos, solicitantes de visitas, pessoas que circulam pelo campus, visitantes dos *websites* institucionais, seguidores de redes sociais e participantes do Ciência Aberta

encontram condições para ingressar de forma automatizada na base de contatos da instituição. Usuários, comunidades científicas, empresas e tomadores de decisão são atualizados de forma manual com apoio das áreas de interlocução. A base encerrou o primeiro semestre reunindo pouco mais de 49 mil contatos de diferentes perfis, destinatários da *newsletter* e boletins CNPEM.

Newsletter CNPEM



O CNPEM instituiu, em 2023, a *Newsletter* CNPEM. No primeiro semestre do ano, foram enviadas três edições. O objetivo da *Newsletter* é consolidar, bimestralmente, os principais destaques do Centro em um comunicado digital destinado a toda base de assinantes do CNPEM, composta por mais de 49 mil e-mails de pesquisadores usuários, inscritos em eventos, sociedades científicas, programas de pós-graduação, empresas, professores, tomadores de decisão e interessados nas atividades do Centro. O e-mail bimestral comunica os principais resultados empreendidos pela instituição nas suas diferentes frentes de atuação e estreita laços com diferentes perfis de público.

Boletim CNPEM

Lançado também em 2023, o Boletim CNPEM é um informativo eletrônico, disparado por e-mail, voltado principalmente à comunidade acadêmica e perfis que tem aderência com as atividades-fim do CNPEM. Os boletins focam, principalmente, em oportunidades de eventos, chamadas de instalações abertas e destaques de pesquisa e infraestrutura. Mais dinâmicos, os boletins respondem à frequência de novas oportunidades no CNPEM – no primeiro semestre deste ano 11 edições foram distribuídas.



Centro de Visitantes

Aproximar o fazer científico da sociedade, especialmente dos jovens, é uma pauta de extrema importância para o CNPEM. A popularização da ciência passa pela disponibilização democrática de espaços que estimulem a curiosidade científica e aproximem a população de temas presentes no dia a dia, “do laboratório para a vida”. Inspirado em exemplos nacionais e internacionais de sucesso e motivado pelo crescente interesse público pela atuação do CNPEM, a instituição está desenvolvendo o projeto do “Centro de Visitantes” que busca não só apresentar o CNPEM à sociedade, como instigar o pensamento crítico a respeito de pautas que delineiam o futuro. Entre elas, novas formas de energia, biocombustíveis, mudanças climáticas, conservação da biodiversidade, prevenção de novas epidemias e promoção da saúde.

O projeto almeja ainda despertar o encantamento no público, envolver a sociedade com o CNPEM, despertar o senso de orgulho pela ciência e tecnologia produzida no país e apoiar a formação continuada de professores.

Em 2023, o CNPEM deu o primeiro passo para concretizar seu centro de visitantes. A agência de design Atelier Brückner, com vasta experiência na concepção de espaços para esta finalidade, foi contratada para desenvolver a etapa conceitual do “Centro de Visitantes do CNPEM”. O conceito prevê galerias de exposição permanente, espaços dedicados ao público infantil, infraestrutura para exposições temporárias de parceiros do Brasil e do exterior, auditório, cinema, além de área de experimentação com bancadas de laboratórios voltados a grupos de estudantes e professores.



Visitas

O CNPEM retomou em 2023 as visitas presenciais, dedicadas principalmente a estudantes de nível Médio e Superior, que ocorrem tradicionalmente às quartas-feiras. Este retorno foi marcado pela implantação do sistema de agendamento automatizado no site, em que professores e coordenadores de grupos de visitas podem escolher o número de vagas e as datas pretendidas. Além disso, escolas também podem agendar visitas à Ilum às quintas-feiras. Em paralelo, a área de Comunicação mantém atualizada a lista de cadastros de solicitantes de visita para que eles sejam regularmente avisados sobre novas vagas e possam planejar melhor as visitas ao campus. No primeiro semestre, 1.823 visitantes foram recebidos no

CNPEM. Dentre os destaques, estão delegações e representantes do governo, empresas e participantes de eventos importantes, como: o conselheiro de Ciência e Inovação da Embaixada da Suécia, Jacob Paulsen; o gerente regional de programas do Departamento de Estado Norte-Americano, Claudio Lísias Mafra De Siqueira; o diretor do *Catalan Institute of Nanoscience and Nanotechnology* (ICN2), Pablo Ordejón; cerca de 40 diplomatas do Instituto Rio Branco; cerca de 100 meninas participantes do programa Meninas Super Cientistas, realizado anualmente pela Unicamp, e turmas de duas Escolas São Paulo de Ciência Avançada nos temas de Lógica Contemporânea e Astrofísica, com cerca de 90 visitantes de diferentes países.

Destaques de Imprensa

Equinor pesquisa biocombustíveis a partir de resíduos agroflorestais no Brasil

SÃO PAULO (Reuters) - A norueguesa Equinor e o Centro Nacional de Pesquisa em Energia e Materiais (CNPEM) firmaram uma parceria para o início de uma pesquisa para a produção de bio-hidrocarbonetos, como o diesel verde e o bioquerosene de aviação, a partir de resíduos agroflorestais.

O objetivo é contribuir para o refino de um hidrocarboneto de baixa emissão de carbono, em linha com as metas da Equinor de redução de emissões do escopo 1 nas operações da companhia, que investirá cerca de 8,5 milhões de reais no projeto pioneiro.

Em janeiro de 2023, o Portal UOL noticiou a parceria entre a Equinor, empresa global de energia com sede na Noruega, e o CNPEM. O acordo visa pesquisas para a produção de bio-hidrocarbonetos a partir de resíduos agroflorestais. O objetivo é contribuir para o refino de um hidrocarboneto de baixa emissão de carbono. As pesquisas contarão com grandes investimentos da Equinor e da Empresa Brasileira de Pesquisa e Inovação Industrial, a Embrapii.

O resultado da primeira chamada regular para propostas de pesquisas do Sirius foi destaque no G1, o portal digital de notícias da Globo, em fevereiro deste ano. A matéria falou sobre a diversidade de nacionalidades interessadas em avançar seus resultados de ciência, tecnologia e inovação a partir da parceria com esse importante complexo brasileiro.

Superlaboratório Sirius atrai atenção de cientistas da Argentina, Grã-Bretanha, Alemanha e EUA

Acelerador de partículas em Campinas (SP) recebeu propostas de pesquisa de diversas instituições brasileiras e internacionais. Trabalhos selecionados serão agendados a partir de março.

Por Fernando Evans, g1 Campinas e Região
17/02/2023 18h10 - Atualizado há 4 meses



VivaBem uol

ALIMENTAÇÃO | CARIÓTIPO | EQUILÍBRIO | LONGEVIDADE | MOVIMENTO | SAÚDE | REGRAS DE CONVÍVIO | WEB STORIES | NEWSLETTERS | COLUNAS | VÍDEOS | NOTÍCIAS

SAÚDE
Sintomas, prevenção e tratamentos para uma vida melhor

Marburg, ebola, sabiá: conheça os 14 vírus mais perigosos do mundo



Em março, a redação do VivaBem- UOL escreveu sobre as viroses mais letais e negligenciadas do mundo, e que carecem ainda de muita pesquisa científica. Tatiana Ometto, especialista em biossegurança científica do CNPEM, falou para a matéria fortalecendo publicamente a atuação do Centro na área de virologia.

A revista VEJA e a Agência FAPESP noticiaram em março de 2023 a descoberta por pesquisadores do CNPEM dos mecanismos moleculares usados por bactérias do trato intestinal de bebês, que persistem na microbiota do adulto com novas funções. O estudo foi publicado na *Nature Chemical Biology* e pode inspirar o desenvolvimento de produtos probióticos e alimentícios para humanos e animais.



Em março de 2023, o jornal Valor Econômico publicou uma matéria especial, expondo a trajetória do empresário brasileiro Peter Andersen. Ao fazê-lo, o CNPEM foi citado como o ator de peso na área de triagem de produtos naturais para a descoberta de fármacos. A Centroflora, empresa sob gestão de Andersen, é uma das parceiras do Centro na frente que investiga substâncias bioativas na biodiversidade brasileira.

A Forbes, conceituada revista norte-americana de economia e negócios com escritório no Brasil, destacou em abril o CNPEM e a empresa brasileira Natura, pela criação e uso da tecnologia "human-on-a-chip". O CNPEM vem desenvolvendo há anos a tecnologia que recria pele e fragmentos de órgãos humanos e simula, em laboratório, as reações a produtos e substâncias.



O CNPEM saiu novamente no Pesquisa para Inovação- FAPESP devido à fabricação de nanodispositivos que aumentam a eficiência de fotoeletrodos para a produção de hidrogênio verde. A conversão de energia solar em energia química depende da separação das moléculas de água em oxigênio e hidrogênio. O hidrogênio então pode ser utilizado como combustível não-poluente. Por não ter impacto ambiental significativo em nenhuma etapa da obtenção, esse caminho gera o chamado "Hidrogênio Verde".



A ESPEM, a Escola Sirius para Professores do Ensino Médio, a ser realizada em sua quinta edição entre os dias 17 e 21 de julho no Centro Nacional de Pesquisa em Energia e Materiais (CNPEM) foi anunciada em maio pelo G1, o portal virtual de notícias da Globo. O programa visa acolher e capacitar professores de Física, Química ou Biologia, da rede pública ou privada, com representantes de todos os estados do Brasil, em conceitos e práticas científicas relacionadas ao Centro e ao panorama nacional de Ciência, Tecnologia e Inovação.



Em abril, as colaborações na área de luz síncrotron entre Brasil e China integraram declaração conjunta dos dois Países, publicada ao final da viagem do Governo Federal ao território chinês. Soluções inovadoras utilizadas no Sirius motivaram a intenção de parceria, já que a China tem dois projetos de síncrotrons em andamento que visam atualizá-los para a mesma geração tecnológica do síncrotron brasileiro.

A pesquisa sobre uma proteína que o Sars-CoV-2, o vírus causador da Covid-19, utiliza em sua replicação ao se espalhar no organismo invadido foi divulgada em maio pela Agência Fapesp, com reprodução na revista Galileu, do grupo Globo. O estudo, desenvolvido a partir de resultados obtidos por pesquisadores da USP no Sirius, foi publicado na *Nature Communications*.

Em maio, o CNPEM e Instituto de Física de Alta Energia (IHEP, do inglês *Institute of High Energy Physics*), organização da Academia de Ciências da China, assinaram um Memorando de Entendimento com o objetivo de facilitar a cooperação científica no campo de tecnologias aplicadas ao uso de fontes de luz síncrotron. O acordo bilateral concretiza as intenções manifestadas pelos dois países um mês antes.



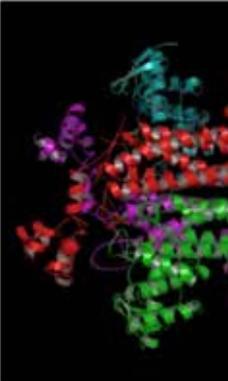
Agência **FAPESP** NOTÍCIAS AGENDA VÍDEOS ASSINE

Nova técnica pode facilitar a descoberta de alvos terapêuticos e mecanismos de doenças
05 de junho de 2023

[f](#) [t](#) [e](#) [w](#) [i](#)

André Julião | Agência FAPESP – Estudo **publicado** na revista *Science* descreve uma técnica que pode facilitar descobertas relacionadas tanto a mecanismos de doenças quanto a possíveis tratamentos.

Batzada de MIDAS (sigla em inglês para diálise acopiada a espectrometria de massas para a descoberta alostérica sistemática), a metodologia permitiu detectar 830 interações consideradas de baixa afinidade entre proteínas e metabólitos (produtos do metabolismo das células), que dificilmente poderiam ser descobertas pelos métodos até então existentes.



Em estudo publicado na *Science*, **liem** i descreve ferramenta que possibilitou em até então desconhecidas entre proteínas facilitar a busca de tratamentos para **di** Minuteman/Wikimedia Commons)

Um grupo de 44 pesquisadores de instituições de excelência ao redor do mundo desenvolveu, em conjunto, uma técnica bioquímica capaz de determinar a afinidade entre receptores e ligantes, apontando como sutis interações moleculares podem impactar o metabolismo humano. Essa pesquisa resultou em um trabalho que foi publicado na revista *Science* e conta com dados obtidos no Sirius por uma usuária pesquisadora da USP. As medidas foram obtidas no período em que a linha operava em condições de comissionamento científico, quando pesquisadores experientes testam os parâmetros da estação de pesquisa.

O maior e mais prestigiado órgão intergovernamental de física de partículas do mundo, o CERN -Organização Europeia para a Pesquisa Nuclear, recebeu em junho comitiva do Governo Federal, incluindo representante do CNPEM. O Centro marcou presença na visita que discutiu a entrada do Brasil como país membro do CERN, uma vez que mantém colaboração científica e tecnológica com a organização europeia desde 2020.

gov.br Ministério de Ciência, Tecnologia e Inovação

Em Genebra, ministra articula adesão do Brasil ao maior centro científico do mundo

Otimista, ministra acredita que Congresso aprovará entrada do Brasil no maior centro científico do mundo

Na Suíça, ministra diz que Brasil está perto de se associar ao CERN, maior centro de Física do mundo



Gestão Orçamentária e Financeira



Em junho de 2023, foi celebrada a assinatura do 42º Termo Aditivo ao Contrato de Gestão entre o CNPEM e o MCTI. Neste termo aditivo foram contratados recursos da Administração Direta, no valor total de R\$ 42 milhões, distribuídos entre as ações da seguinte maneira: R\$ 40 milhões para a operação do CNPEM (Ação 212H); R\$ 1 milhão para o Projeto Sirius (Ação 13CL); e R\$ 1 milhão para o Projeto SisNano (Ação 14XT).

Neste semestre, destaca-se o recebimento de parte dos recursos oriundos do Fundo Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (FNDCT) contratados por meio do 40º Termo Aditivo. Vale relembrar que o 40º TA foi assinado em dezembro de 2022 sem nota de empenho e, portanto, impactou a Lei Orçamentária Anual (LOA) 2023. Do valor total contratado de R\$ 467 milhões, apenas R\$ 112,9 milhões destinados à continuidade do Projeto Sirius foram empenhados e pagos em junho de 2023. Cabe destacar que, novamente, a morosidade no recebimento dos recursos do FNDCT deverá impactar no avanço físico dos indicadores e metas dos projetos contratados neste TA – de forma análoga ao ocorrido com os recursos do 37º Termo Aditivo.

Além deste recurso, o primeiro semestre deste ano é marcado pelo recebimento dos recursos da Administração Direta contratados em 2022, por meio do 41º Termo Aditivo, no valor de R\$ 2 milhões e que são destinados à operação do CNPEM (Ação 212H). Tais recursos constituem restos a pagar da LOA 2022 pagos ao CNPEM em 2023.

No âmbito da intervenção do Ministério da Educação (MEC) no Contrato de Gestão, os recursos contratados via 39º Termo Aditivo, assinado em dezembro de 2022, também foram repassados na forma de restos a pagar da LOA 2022. Assim, em junho de 2023, foram recebidos R\$ 9,7 milhões destinados a operação da Ilum – Escola de Ciência.

Valores contratados por meio dos Termos Aditivos (TA) em 2023 (R\$)

LOA	TA	DA	FR	Operação 212H	Sirius 13CL	LNMCB 15XQ	SISNANO 14XT
2023	40	14/12/2022	FNDCT	116.084.260	220.000.000		
2023	42	02/06/2023	Adm Direta	40.000.000	1.063.376		1.000.000

*LOA: Ano da Lei Orçamentária Anual (LOA) | TA: Termo Aditivo | DA: Data Assinatura | FR: Fonte de Recurso

Vale ressaltar que todos os recursos empenhados pelo MCTI foram devidamente repassados, o que representa um avanço significativo. Contudo, é de suma importância reconhecer que a manutenção, operação e continuidade dos projetos acordados com o MCTI exigem uma sólida estabilidade orçamentária proveniente do âmbito federal, uma vez que mais de 90% da execução orçamentária anual do Centro está concentrada nessa fonte de recursos. O CNPEM já se empenha em diversificar as fontes orçamentárias e adotar práticas para alavancar recursos de outras origens, entretanto, tais iniciativas vinculadas à missão do CNPEM têm uma capacidade limitada de adição ao orçamento, o que representa um desafio para um centro de pesquisa de grande porte.

Execução Orçamentária do Contrato de Gestão CNPEM (Ação Orçamentária 212H PO.003)

A execução orçamentária da operação do CNPEM na Ação 212H, no total de R\$ 90 milhões, foi viabilizada pela reprogramação do saldo financeiro apurado em dezembro de 2022, no valor de R\$89 milhões, e pelo recebimento dos recursos do 42º Termo Aditivo ao Contrato de Gestão e os restos a pagar do 41º TA, no total de R\$ 42 milhões. Abaixo o detalhamento dos valores da execução orçamentária do semestre por natureza de despesa:

Orçamento 2023: valores executados por natureza de despesa, exceto projetos (em R\$)

Natureza da Despesa	Realizado	Comprometido*	Executado
Pessoal	29.116.077	33.490.589	62.606.666
Custeio	11.721.356	14.459.740	26.181.096
<i>Destaque: Energia Elétrica</i>	<i>2.401.421</i>	<i>2.694.233</i>	<i>5.095.654</i>
Investimento	401.106	377.286	778.392
Total	41.238.539	48.327.615	89.566.154

*O valor comprometido refere-se a pedidos de compras, contratos e demais despesas aprovadas no ano vigente, ou seja, compromissos firmados e ainda não liquidados.

Posição Financeira do Contrato de Gestão CNPEM (Ação Orçamentária 212H PO003)

Em 2023, o CNPEM recebeu, por meio do Contrato de Gestão destinado a Ação 212H, o montante de R\$ 42 milhões. O fluxo financeiro do primeiro semestre de 2023 é apresentado na tabela a seguir.

Fluxo Financeiro do Contrato de Gestão em 2023 Ação 212H PO003 (em R\$)

Saldo Inicial	99.341.485
Entradas de Recursos	46.388.679
Contrato de Gestão 2023	40.000.000
Restos a Pagar 2022	2.000.000
Rendimentos Financeiros	4.340.071
Outras Entradas	48.608
Saída de Recursos	63.142.427
Saldo Financeiro em 30.06.2023	82.587.737

O saldo financeiro, no montante de R\$ 82,6 milhões, é composto pela Reserva Operacional do Centro (64%) e Reserva Técnica do Conselho de Administração (35%). Esta última é destinada a passivos contingentes do Contrato de Gestão, enquanto a Reserva Operacional visa honrar compromissos assumidos e ainda não pagos, além de garantir a operação do Centro por até oito meses, constituindo, dessa forma, um mecanismo de proteção da Organização.

Detalhamento do saldo financeiro do Contrato de Gestão em 2023, exceto projetos (em R\$)

Saldo Financeiro em 30/06/2023	82.587.737
Reserva Técnica do Conselho de Administração	29.185.315
Reserva Operacional CNPEM	53.402.422

Projeto Sirius

Durante o primeiro semestre de 2023, o Projeto Sirius enfrentou significativos desafios financeiros decorrentes da morosidade no repasse dos recursos do 40º Termo Aditivo, assinado em dezembro do ano anterior. A execução do projeto foi viabilizada, principalmente, pela reprogramação do saldo financeiro de 2022, no valor de R\$ 85,9 milhões, e por estratégias financeiras adotadas pelo Centro, como a postergação de novos investimentos e priorização da continuidade das atividades em andamento. Em junho de 2023, houve o empenho e recebimento dos recursos do 42º Termo Aditivo e de parte do 40º TA, no montante de R\$114 milhões. Cumpre chamar atenção que o atraso no repasse dos recursos contratados para a Ação 13CL pode trazer riscos para o orçamento e cronograma projeto, comprometendo o ritmo de execução das atividades.

Projeto Sirius - Orçamento 2023: valores executados por natureza de despesa (em R\$)

Natureza da Despesa	Realizado	Comprometido*	Executado
Pessoal	36.776.144	40.420.251	77.196.395
Custeio	21.036.384	25.613.541	46.649.925
<i>Destaque: Energia Elétrica</i>	<i>8.780.268</i>	<i>9.706.126</i>	<i>18.486.394</i>
Investimento	38.462.449	74.644.546	113.106.995
Total	96.274.977	140.678.338	236.953.315

**O valor comprometido refere-se a pedidos de compras, contratos e demais despesas aprovadas no projeto, ou seja, compromissos firmados e ainda não liquidados.*

Projeto Sirius – Fluxo financeiro em 2023 (Em R\$)

Saldo Inicial	85.875.328
Entradas de Recursos	119.193.373
Contrato de Gestão 2023	1.063.376
Restos a Pagar 2022	112.922.901
Rendimentos Financeiros	1.881.579
Outras Entradas	3.325.516
Saída de Recursos	75.683.652
Saldo Financeiro em 30.06.2023	129.385.049

Os destaques de execução do Projeto Sirius para este semestre foram as contratações dos onduladores das linhas Cateretê e Carnaúba e a prestação de serviços para instalação e testes de controle de dispositivos das linhas de luz.

Projeto SisNano

O Projeto SisNano de expansão das áreas de nanotecnologia do CNPEM executou no primeiro semestre de 2023 um total de R\$ 1,9 milhões. Tal execução foi possibilitada reprogramação do saldo financeiro de 2022, no valor de R\$1,9 milhões, e pelos recursos recebidos do 42º Termo Aditivo ao Contrato de Gestão, no total de R\$ 1 milhão. Os dados orçamentários e financeiros estão discriminados abaixo.

Projeto SisNano - Orçamento 2023: valores executados por natureza de despesa (em R\$)

Natureza da Despesa	Realizado	Comprometido*	Executado
Custeio	152.268	493.587	645.855
Investimento	961.527	381.120	1.342.647
Total	1.113.795	874.707	1.988.502

*O valor comprometido refere-se a pedidos de compras, contratos e demais despesas aprovadas no projeto, ou seja, compromissos firmados e ainda não liquidados.

Projeto SisNano – Fluxo financeiro em 2023 (em R\$)

Saldo Inicial	1.981.742
Entradas de Recursos	1.066.190
Contrato de Gestão 2023	1.000.000
Rendimentos Financeiros	66.190
Outras Entradas	-
Saída de Recursos	785.282
Saldo Financeiro em 30.06.2023	2.262.650

Os destaques da execução do projeto são a aquisição do tanque de alta tensão para alimentação do microscópio Titan Krios, além da contratação de manutenções corretivas e preventivas para equipamentos adquiridos em anos anteriores do projeto, como o sistema de litografia por feixe de elétrons.

Plataformas de Combate a Víruses Emergentes – PCVE

O projeto Plataformas de Combate a Víruses Emergentes é financiado por recursos do Programa de Trabalho Enfrentamento da Emergência de Saúde Pública de Importância Internacional Decorrente do Coronavírus (Ação 21C0). Esta ação foi de ordem específica e extraordinária, o que significa que não há previsão de novos empenhos. Como resultado, a execução do projeto foi viabilizada pela reprogramação do saldo financeiro de 2022, no total de R\$ 16 milhões, que possibilitou o avanço das obras para implementação do laboratório de Nível de Biossegurança 3 (NB3).

Projeto PCVE - Orçamento 2023: valores executados por natureza de despesa (em R\$)

Natureza da Despesa	Realizado	Comprometido*	Executado
Pessoal	961.873	544.083	1.505.956
Custeio	587.936	219.995	807.931
Investimento	12.243.712	-3.743.577	8.500.135
Total	13.793.521	-2.979.499	10.814.022

*O valor comprometido refere-se a pedidos de compras, contratos e demais despesas aprovadas no projeto, ou seja, compromissos firmados e ainda não liquidados.

Projeto PCVE – Fluxo financeiro em 2023 (em R\$)

Saldo Inicial	16.113.251
Entradas de Recursos	513.449
Contrato de Gestão 2023	-
Restos a Pagar 2022	-
Rendimentos Financeiros	502.222
Outras Entradas	11.226
Saída de Recursos	11.839.108
Saldo Financeiro em 30.06.2023	4.787.592

Além das obras, houve aquisições de equipamentos laboratoriais e infraestrutura, como o tanque criogênico, equipamento para plataforma de nanobiologia e dispositivos diagnósticos-PNDD, além das despesas de manutenção da equipe dedicada ao projeto.

Linhas Longas e Ambiente de Biocontenção (212H LLABC) & Laboratório Nacional de Máxima Contenção Biológica (15XQ LNMCB)

O Projeto de Implantação do Laboratório de Máxima Contenção Biológica (LNMCB) é um projeto estruturante CNPEM, que corresponde à implantação de uma nova infraestrutura científica de alta complexidade de segurança biológica de nível 4.

A viabilidade do projeto no primeiro semestre de 2023 ocorreu por meio da reprogramação do saldo financeiro de 2022, no valor de R\$ 45 milhões. O montante de R\$ 131 milhões contratados via 40º Termo Aditivo ao Contrato de Gestão, oriundos do Fundo Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (FNDCT), não foi empenhado pelo MCTI até a elaboração deste relatório.

As tabelas a seguir detalham, respectivamente, os valores executados por natureza de despesa e o fluxo financeiro específico do Projeto.

Projeto LLABC/LNMCB - Orçamento 2023: valores executados por natureza de despesa (em R\$)

Natureza da Despesa	Realizado	Comprometido*	Executado
Pessoal	2.650.344	2.337.970	4.988.314
Custeio	505.132	1.785.767	2.290.899
Investimento	1.072.353	5.184.951	6.257.304
Total	4.227.829	9.308.688	13.536.517

**O valor comprometido refere-se a pedidos de compras, contratos e demais despesas aprovadas no projeto, ou seja, compromissos firmados e ainda não liquidados.*

Projeto LLABC/LNMCB – Fluxo financeiro em 2023 (em R\$)

Saldo Inicial	45.553.007
Entradas de Recursos	2.325.184
Contrato de Gestão 2023	-
Rendimentos Financeiros	2.325.184
Outras Entradas	-
Saída de Recursos	4.207.632
Saldo Financeiro em 30.06.2023	43.670.559

O Projeto está em fase planejamento interno e estruturação da equipe, o que justifica o ainda baixo dispêndio nos investimentos de infraestrutura necessária. Os destaques para a execução deste semestre foi as contratações do serviço de gerenciamento da pré-construção, terraplanagem do terreno destinado ao LNMCB e execução do laboratório de treinamento NB4.

Centro de Tecnologias para Saúde (CT Saúde)

O projeto de Centro de Tecnologias para Saúde concentra esforços de implementação de infraestrutura de pesquisa e desenvolvimento que atendam demandas do sistema de saúde do País. Esta iniciativa foi viabilizada via Ação 212H por meio de recursos oriundos do Fundo Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (FNDCT). A continuidade do projeto neste semestre foi assegurada pela reprogramação do saldo financeiro, de R\$ 60,9 milhões.

As tabelas a seguir detalham, respectivamente, os valores executados por natureza de despesa e o fluxo financeiro específico do Projeto.

Projeto CT Saúde - Orçamento 2023: valores executados por natureza de despesa (em R\$)

Natureza da Despesa	Realizado	Comprometido*	Executado
Pessoal	3.198.214	3.517.748	6.715.962
Custeio	1.575.599	1.249.521	2.825.120
Investimento	4.722.606	14.967.213	19.689.818
Total	9.496.419	19.734.482	29.230.900

*O valor comprometido refere-se a pedidos de compras, contratos e demais despesas aprovadas no projeto, ou seja, compromissos firmados e ainda não liquidados.

Projeto CT Saúde – Fluxo financeiro em 2023 (em R\$)

Saldo Inicial	60.984.525
Entradas de Recursos	2.407.394
Contrato de Gestão 2023	-
Restos a Pagar 2022	-
Rendimentos Financeiros	2.407.274
Outras Entradas	120
Saída de Recursos	8.881.000
Saldo Financeiro em 30.06.2023	54.510.919

Os destaques de execução para o primeiro semestre de 2023 no projeto CT Saúde estão na aquisição de equipamentos laboratoriais, como a bioimpressora 3D, própria para imprimir células vivas através de biotintas, e microscópios óptico para fotomicrografia, além da continuação das obras para implantação da primeira fase do Centro de Saúde.

Plataforma de Biotecnologia Industrial

No primeiro semestre de 2023, o projeto Plataforma de Biotecnologia Industrial (PlatBiotec) foi viabilizado através da reprogramação do saldo financeiro de 2022, que totalizou R\$ 13,2 milhões, mas sem novos empenhos para o projeto no período. É relevante mencionar que no 40º Termo Aditivo (TA) assinado em 2022, foram destinados R\$ 30 milhões adicionais ao projeto, porém, até o momento da publicação deste relatório, esses recursos ainda não foram empenhados.

A execução deste projeto foi viabilizada pela reprogramação do saldo financeiro de R\$ 13,2 milhões, oriundo dos recursos do 37º TA. Neste semestre, o saldo financeiro permitiu a realização de compromissos assumidos com fornecedores, em 2022, para aquisição de equipamentos laboratoriais, incluindo sistema de separação e caracterização de proteínas e ligninas, plataforma robótica para pipetagem, microbiorreator para laboratório de bioprocessos, entre outros. Além disso, os recursos garantiram a manutenção da equipe dedicada ao projeto e cobertura de custos relacionados.

As tabelas a seguir detalham, respectivamente, os valores executados por natureza de despesa e o fluxo financeiro específico do Projeto.

Projeto PlatBiotec - Orçamento 2023: valores executados por natureza de despesa (em R\$)

Natureza da Despesa	Realizado	Comprometido*	Executado
Pessoal	1.531.710	1.856.102	3.387.812
Custeio	399.229	590.116	989.345
Investimento	8.580.930	485.449	9.066.379
Total	10.511.868	2.931.667	13.443.535

*O valor comprometido refere-se a pedidos de compras, contratos e demais despesas aprovadas no projeto, ou seja, compromissos firmados e ainda não liquidados.

Projeto PlatBiotec – Fluxo financeiro em 2023 (em R\$)

Saldo Inicial	13.209.920
Entradas de Recursos	398.839
Contrato de Gestão 2023	-
Restos a Pagar 2022	-
Rendimentos Financeiros	398.839
Outras Entradas	-
Saída de Recursos	8.592.699
Saldo Financeiro em 30.06.2023	5.016.060

Centro de Visitantes

projeto do Centro de Visitantes tem como objetivo a popularização e divulgação da ciência e o estímulo à educação em nível local, regional e nacional, a partir das áreas de pesquisa desenvolvidas pelo CNPEM. O projeto foi viabilizado no 37º TA de 2021, no valor de R\$ 15 milhões, recursos que foram recebidos em maio de 2022 e possibilitou seu desenvolvimento.

O destaque deste semestre foi a execução do evento institucional Ciência Aberta, que promoveu a visita da comunidade local ao Campus para divulgação das pesquisas realizadas no Centro. Destaca-se também a realização das últimas despesas da exposição Cápsula da Ciência, que ocorreu durante 2022 e percorreu diversas cidades do Brasil, e manutenção da equipe dedicada ao projeto e cobertura de custos relacionados.

As tabelas a seguir detalham, respectivamente, os valores executados por natureza de despesa e o fluxo financeiro específico do Projeto:

Projeto Centro de Visitantes - Orçamento 2023: valores executados por natureza de despesa (em R\$)

Natureza da Despesa	Realizado	Comprometido*	Executado
Pessoal	217.259	241.774	459.034
Custeio	809.476	359.519	1.168.994
Investimento	-	445.189	445.189
Total	1.026.735	1.046.482	2.073.218

**O valor comprometido refere-se a pedidos de compras, contratos e demais despesas aprovadas no projeto, ou seja, compromissos firmados e ainda não liquidados.*

Projeto Centro de Visitantes – Fluxo financeiro em 2023 (em R\$)

Saldo Inicial	14.263.597
Entradas de Recursos	704.570
Contrato de Gestão 2023	-
Restos a Pagar 2022	-
Rendimentos Financeiros	704.570
Outras Entradas	-
Saída de Recursos	1.152.882
Saldo Financeiro em 30.06.2023	13.815.285

ILUM – Escola de Ciência

Em 2023, a ILUM Escola Ciência recebeu o recurso contratado via 39º Termo Aditivo ao Contrato de Gestão, com a interveniência do Ministério da Educação (MEC), de R\$ 9,7 milhões para garantir a operação e manutenção das atividades da Escola, que recebeu a segunda turma de Bacharelado em Ciência e Tecnologia. A operação e manutenção, demandas dos estudantes e o quadro de colaboradores da ILUM foram viabilizados principalmente pela reprogramação do saldo financeiro de 2022, de R\$11,6 milhões. As tabelas a seguir apresentam detalhes sobre os valores executados e o fluxo financeiro específico da ILUM.

ILUM - Orçamento 2023: valores executados por natureza de despesa (em R\$)

Natureza da Despesa	Realizado	Comprometido*	Executado
Pessoal	2.393.384	2.513.344	4.906.728
Custeio	1.960.839	2.672.432	4.633.270
<i>Destaque: Apoio aos Estudantes</i>	<i>1.049.976</i>	<i>1.555.394</i>	<i>2.605.370</i>
Investimento	191.388	410.523	601.910
Total	4.642.998	5.802.204	10.445.202

*O valor comprometido refere-se a pedidos de compras, contratos e demais despesas aprovadas no projeto, ou seja, compromissos firmados e ainda não liquidados.

ILUM – Fluxo financeiro em 2023 (em R\$)

Saldo Inicial	11.635.864
Entradas de Recursos	10.216.801
Contrato de Gestão 2023	-
Restos a Pagar 2022	9.757.736
Rendimentos Financeiros	453.902
Outras Entradas	5.163
Saída de Recursos	4.615.251
Saldo Financeiro em 30.06.2023	17.237.414

No primeiro semestre de 2023, foi realizada a segregação dos recursos de operação da ILUM e do Centro de Vivência. Assim, a visão aqui apresentada difere daquela contida no Relatório Anual 2022. A execução do Projeto do Centro de Vivência foi viabilizada pela reprogramação do saldo financeiro de 2022, de R\$ 8,5 milhões. Tais recursos foram utilizados para a efetivação dos projetos básicos e executivos, a preparação legal para habilitar o Centro as novas construções e a contratação da WME Engenharia para executar as obras.

As tabelas a seguir apresentam detalhes sobre os valores executados e o fluxo financeiro específico do projeto.

Projeto Centro de Vivência - Orçamento 2023: valores executados por natureza de despesa (em R\$)

Natureza da Despesa	Realizado	Comprometido*	Executado
Custeio	26.663	11.312	37.975
Investimento	58.070	11.539.348	11.597.418
Total	84.733	11.550.661	11.635.394

*O valor comprometido refere-se a pedidos de compras, contratos e demais despesas aprovadas no projeto, ou seja, compromissos firmados e ainda não liquidados.

Fluxo financeiro do Projeto Centro de Vivência em 2023 (Em R\$)

Saldo Inicial	8.492.488
Entradas de Recursos	456.701
Contrato de Gestão 2023	-
Rendimentos Financeiros	456.701
Saída de Recursos	198.666
Saldo Financeiro em 30.06.2023	8.750.523

** O saldo inicial corresponde ao saldo financeiro apurado em 31/12/2022 para esta iniciativa, conforme apresentado no Relatório Anual 2022. Este saldo foi composto pelo recebimento de recursos do 37º Termo Aditivo e os rendimentos financeiros oriundos deste recurso.*





PROGRAMA DE USUÁRIOS EXTERNOS

Neste capítulo são apresentados os resultados relacionados ao atendimento de usuários externos nas instalações abertas do CNPEM, correspondentes às atividades do Eixo 1, que contribuem para a produção de resultados técnico-científicos de alta qualidade.



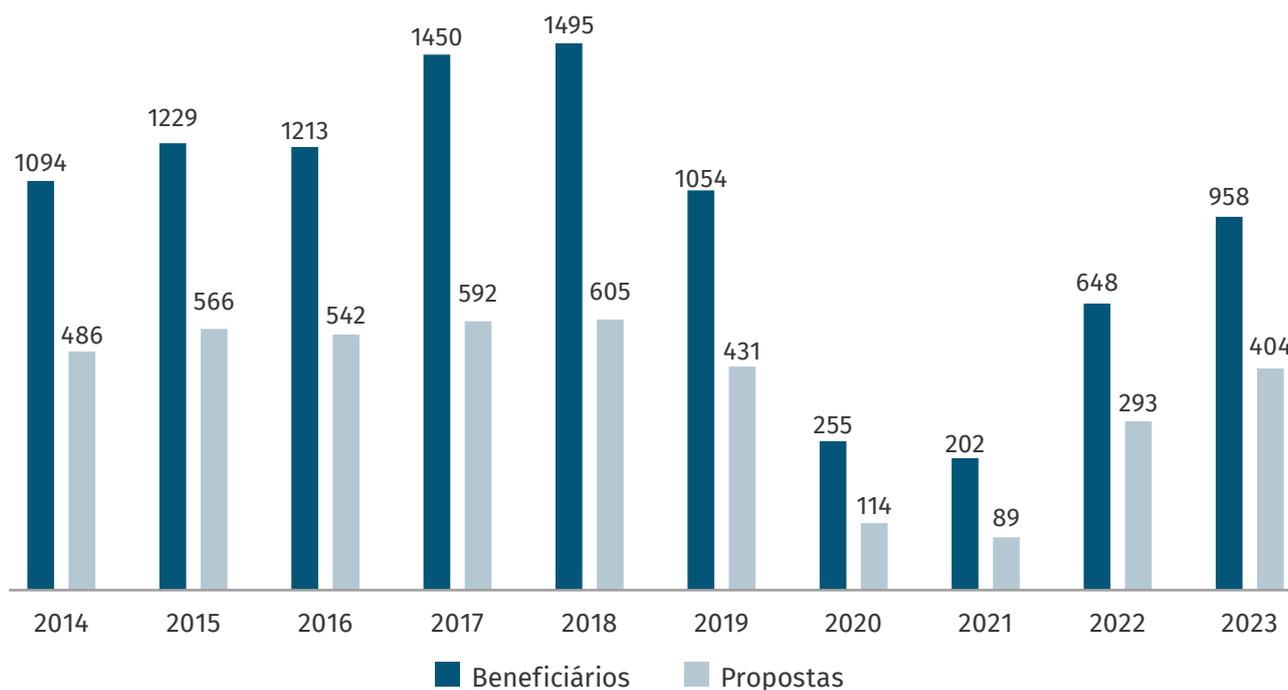
No primeiro semestre de 2023 foram atendidas 404 propostas de pesquisa externas que beneficiaram 958 pesquisadores, totalizando mais de 15 mil horas de uso dos equipamentos. Estas propostas foram atendidas em 15 instalações abertas e 8 linhas de luz do Sirius. Em comparação aos resultados do primeiro semestre de 2022, neste ano houve um aumento de 38% no número de propostas de pesquisas atendidas que beneficiaram um número 48% maior de pesquisadores.

Os resultados do primeiro semestre relacionados ao Eixo 1 se devem à retomada plena dos atendimentos em 2022 após o período da pandemia de Covid-19 e, sobretudo, à primeira chamada regular para submissão de propostas para linhas de luz do Sirius no segundo semestre de 2022, cujas propostas foram atendidas no primeiro semestre deste ano.

No primeiro semestre de 2023, 15 instalações do CNPEM estiveram abertas para o recebimento de propostas de usuários externos para desenvolvimento de atividades do Eixo 1: Espectrometria e Calorimetria (LEC); Espectrometria de Massas

(MAS); Cristalização de Macromoléculas (ROBOLAB); Ressonância Magnética Nuclear (RMN); Biofísica de Macromoléculas (BFM); Sequenciamento de Alto Desempenho (SEQ); Desenvolvimento e Escalonamento de Processos (DEB); Espectroscopia e Espalhamento (EE); Microscopia Eletrônica de Transmissão (TEM); Criomicroscopia Eletrônica (CME); Microscopia Eletrônica de Varredura e Duplo Feixe (SEM-FIB); Microscopia de Força Atômica (AFM); Microfabricação e Microfluídica (LMF); Nanofabricação (NFB); Nanotoxicologia (NANOTOX). Além destas instalações, 8 linhas de luz recebem usuários externos no semestre: Carnáuba (Nanoscopia de Raios X); Cateretê (Espalhamento Coerente de Raios X); Ema (Espectroscopia e Difração de Raios X em Condições Extremas); Imbuia (Micro e Nanoespectroscopia de Infravermelho); Ipê (Espalhamento Inelástico ressonante de raios X e Espectroscopia de Fotoelétrons); Manacá (Micro e Nanocristalografia Macromolecular); Cedro (Dicroísmo Circular) e Mogno (Micro e Nanotomografia de Raios X).

Gráfico 1 - Evolução do número de propostas e beneficiários externos nos 1º semestres de 2014 a 2023*



* Incluindo Sirius.

Usuários externos atendidos no Sirius no 1º semestre de 2023

111

Propostas atendidas

436

Pesquisadores beneficiados

78

Instituições

Do total de 404 propostas atendidas pelo CNPEM no primeiro semestre do ano, 111 foram realizadas nas linhas de luz do Sirius, beneficiando 436 pesquisadores de 78 instituições do Brasil e do exterior.

A maior parte das propostas atendidas foram resultado da primeira chamada regular do Sirius, realizada entre novembro e dezembro de 2022 para as linhas Carnaúba, Cateretê, Ema, Imbuia, Ipê. A primeira chamada oficial para a realização de experimentos no Sirius recebeu 334 propostas de instituições e universidades da América Latina, América do Norte, Europa e Ásia. Cerca de 25% das propostas recebidas foram submetidas por

novos usuários, ou seja, por pesquisadores que nunca haviam utilizado as instalações abertas disponíveis em nenhum dos quatro Laboratórios Nacionais que fazem parte do CNPEM. Dentre as propostas recebidas, 125 foram selecionadas: 108 submetidas por pesquisadores brasileiros, e 17 por pesquisadores de instituições estrangeiras.

Além dos atendimentos oriundos da primeira chamada regular, a linha Manacá atendeu propostas em 2023 decorrentes de submissão na modalidade *fast-track*. Neste semestre também foram atendidas algumas propostas externas nas linhas Cedro e Mogno, para fins de comissionamento científico.

Reformulação do Escritório de Usuários do CNPEM



**TRAGA SUA
PESQUISA
PARA O CNPEM**

No primeiro semestre de 2023, a área de recepção e atendimento aos usuários das instalações do CNPEM passou por reformulações que incluíram uma nova nomenclatura e missão. O antigo Serviço de Apoio aos Usuários (SAU) foi renomeado para Escritório de Usuários (EdU), e a nova missão contempla ações para divulgação das instalações abertas do Centro e a prospecção ativa de novos usuários.

As atividades desenvolvidas em conjunto com a Assessoria de Comunicação (ACO) contemplam a participação em eventos científicos para a divulgação das instalações científicas e técnicas oferecidas pelo CNPEM à comunidade de pesquisa, além dos auxílios financeiros e outros apoios fornecidos pelo Centro aos usuários externos para condução dos experimentos. No primeiro semestre deste ano, o EdU juntamente com a ACO e pesquisadores do Centro, participaram de dois eventos importantes: o Encontro de Outono da Sociedade Brasileira de Física (EOSBF-2023), realizado entre os dias 21 e 25 de maio em Ouro Preto- MG; e a 46ª Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química (46ª RASBQ), ocorrida entre os dias 27 e 31 de maio em Águas de Lindóia-SP. O CNPEM atuou nesses eventos por meio de palestras técnicas, estande de divulgação e distribuição de materiais impressos. Estas ações combinadas atingiram centenas de pessoas que participavam dos eventos e são potenciais usuários do Centro.

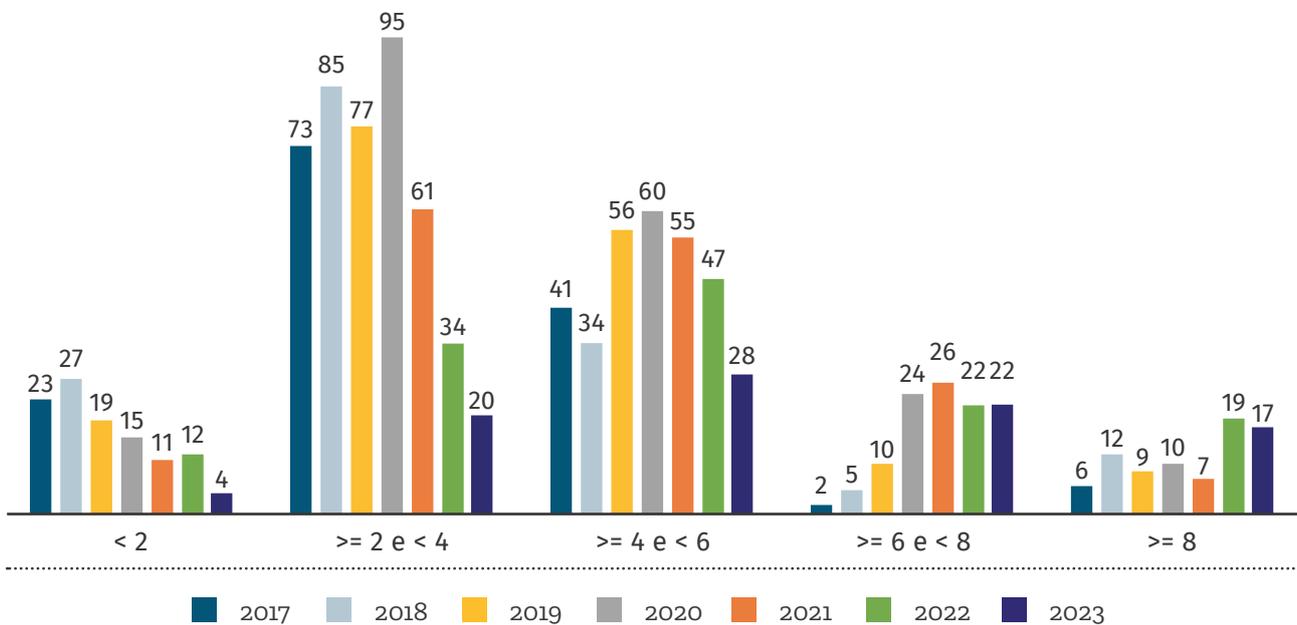
Produção Científica

No primeiro semestre de 2023, foram publicados 95 artigos resultados das pesquisas dos usuários externos das instalações do CNPEM, indexados na base da Web of Science. Em todos esses artigos há menção ao uso das instalações do CNPEM. Neste semestre houve uma diminuição do número de publicações de pesquisadores usuários das instalações em comparação a anos anteriores. Este resultado se deve à diminuição no atendimento de

propostas desde 2019 em função do descomissionamento do U VX, e do fechamento das instalações em 2020 e 2021, devido à pandemia de Covid-19, que impactou o cronograma das pesquisas.

Do ponto de vista do Fator de Impacto (FI) dos periódicos nos quais as publicações foram realizadas no semestre, verifica-se que 39 (41%) delas estiveram em periódicos com FI acima de 6.

Figura 2 - Publicações de usuários externos por faixa de Fator de Impacto (1º semestres 2017-2023)







An aerial photograph of a city with a 3D bar chart overlay. The bars are colored in shades of green and yellow, representing data points across the city's layout. The text is overlaid on the bottom left of the image.

PROGRAMAS ESTRATÉGICOS DE PESQUISA E DESENVOLVIMENTO

Neste capítulo estão descritas as atividades relacionadas à execução de Programas Estratégicos e de fronteira, de caráter multidisciplinar, que refletem as atividades do Eixo 2 de atuação do CNPEM, com o envolvimento de pesquisadores internos em investigações para a execução de programas de pesquisa básica, aplicada e de desenvolvimento experimental.



Programa de Pesquisa e Desenvolvimento em Saúde

O Programa de Pesquisa e Desenvolvimento em saúde conduz pesquisas que estimulam o domínio, produção e incorporação de tecnologias essenciais para a sustentabilidade e segurança do sistema de saúde. A estratégia do CNPEM

em Saúde engloba seguintes subprogramas: (i) Alvos e Marcadores Terapêuticos; (ii) Engenharia de Tecidos; (iii) Fármacos e Biofármacos; (iv) Diagnóstico; (v) Desenvolvimento Pré-Clínico; e (vi) Terapia gênica e celular.

Subprograma de Alvos terapêuticos

Os alvos moleculares referem-se a proteínas, enzimas, receptores ou outros componentes celulares que desempenham um papel fundamental no desenvolvimento ou progressão de uma determinada doença. A descoberta de novos alvos moleculares envolve uma combinação de abordagens, incluindo estudos genéticos, biologia celular, análise de vias metabólicas e de sinalização, além de estudos clínicos e epidemiológicos. Através dessas abordagens, os pesquisadores procuram identificar moléculas ou mecanismos específicos que possam ser direcionados por tratamentos terapêuticos. No CNPEM, há mais de uma década são realizados estudos das bases moleculares, celulares e fisiológicas de doenças cardiovasculares, neurodegenerativas e do neurodesenvolvimento, câncer, viroses, doenças bacterianas e parasitárias, empregando conhecimentos e técnicas em biologia, química e competências únicas da instituição como linhas de luz síncrotron e microscópios eletrônicos avançados. Abaixo estão elencados os principais achados científicos destas linhas de pesquisa no primeiro semestre de 2023:

Doenças Cardiovasculares: Mecanismos de sinalização em insuficiência cardíaca

O projeto **“Identificação de alvos para desenvolvimento de novas terapias para o tratamento de doenças cardiovasculares”**, tem por objetivo a identificação de potenciais alvos terapêuticos capazes de promover um papel cardioprotetor e/ou regenerativo no coração adulto. Após lesão no coração, seja por infarto do miocárdio, ou em algumas quimioterapias como a Doxorrubicina, espécies reativas de oxigênio são produzidas em altas taxas, levando a um estado de estresse oxidativo e dano ao DNA, desencadeando efeitos deletérios, como a morte e distúrbios de função dos miócitos cardíacos. Essas alterações levam a um remodelamento patológico do coração que desencadeia um quadro de insuficiência cardíaca. O projeto implementou metodologias de triagem de moléculas visando a busca por novas classes terapêuticas para reduzir os danos oxidativos ao DNA, promovendo, portanto, a ativação de vias intracelulares de reparo e sobrevivência celular. Nesse sentido, a busca de moléculas com potencial de modular o metabolismo cardíaco são críticos para aumentar a expectativa de vida de pacientes acometidos por insuficiência cardíaca pós-infarto ou em decorrência de efeitos colaterais de quimioterápicos.

Outro projeto de destaque na área cardiovascular envolve uma parceria entre o CNPEM e o Instituto Dante Pazzanese de Cardiologia (IDPC), e tem como objetivo identificar e caracterizar perfis séricos preditivos da evolução da insuficiência cardíaca com fração de ejeção preservada, da sigla em inglês HFpEF. No LNBio, foram processadas amostras de soro de 215 pacientes em diferentes estágios da doença. O projeto multidisciplinar, utilizando dados clínicos, laboratoriais, metabólica por Ressonância Magnética Nuclear associado a algoritmos de análise de agrupamento hierárquico não supervisionado e aprendizado de máquina automatizado revelou perfis metabólitos séricos significativamente distintos com potencial poder preditivo da evolução da doença. Paralelo aos dados em pacientes, foi estabelecido um modelo em camundongos para recapitular os achados ecocardiográficos e metabólicos em humanos. Com isso, mecanismos de sinalização, perfis bioquímicos e moleculares poderão ser desvendados a fim de identificar potenciais alvos terapêuticos para o tratamento da doença.

Câncer oral - descoberta de alvos e biomarcadores

O CNPEM deu continuidade ao projeto de **“Proteômica aplicada ao Câncer Oral”** que tem o objetivo de indicar potenciais biomarcadores e alvos terapêuticos para câncer oral por meio do uso de estratégias de análise de proteômica baseada em espectrometria de massas. No primeiro semestre, pode-se destacar um estudo que, além de mapear o proteoma, também caracterizou o glicoma e o glicoproteoma de tumores primários de pacientes com câncer oral, a fim de explorar as glicosilações presentes nessas amostras e comparar os perfis entre pacientes com ou sem metástase linfonodal, o principal fator prognóstico na doença. A partir da análise dos espectros de glicanos, foi possível determinar a composição e as características estruturais desses açúcares, apontando a presença de isômeros e, coletivamente, demonstrando a heterogeneidade do glicoma de tumores orais. Por meio de uma estratégia integrada, na qual utilizamos as identificações da glicômica para guiar a busca dos glicopeptídeos de forma mais precisa, mais de três mil glicopeptídeos foram identificados. Comparando os tumores de pacientes com ou sem metástase linfonodal, identificamos glicanos e glicopeptídeos com diferentes níveis de abundância, os quais também apresentaram alto desempenho em estratificar esses grupos de pacientes. Finalmente, alguns desses açúcares e glicopeptídeos foram identificados em associação a importantes características clínicas, destacando-se dois glicanos e três glicopeptídeos associados à sobrevida desses pacientes com câncer oral. Os resultados desse estudo aprofundam o conhecimento sobre a biologia do câncer de boca, bem como constituem um rico repositório para a explorar mecanismos de glicosilação associados à doença e à metástase linfonodal (Figura 3).

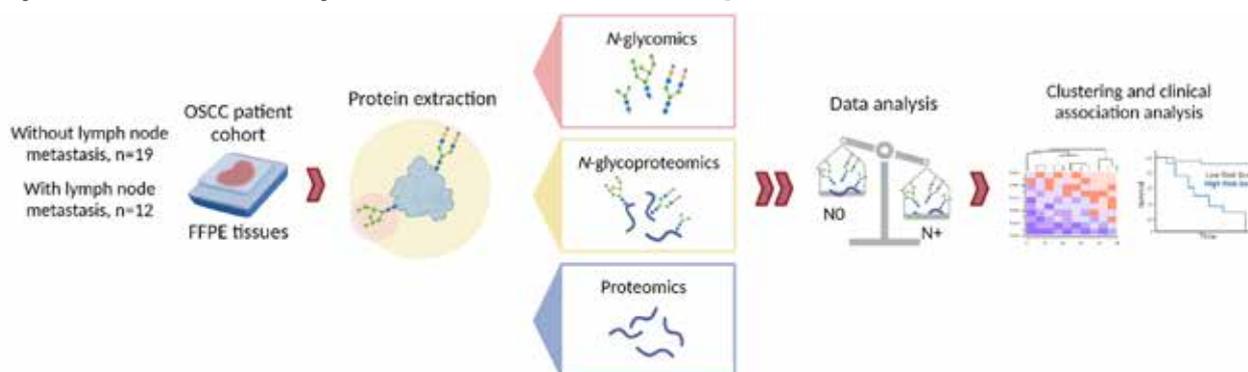


Figura 3. Visão geral do delineamento experimental do manuscrito *“Comprehensive glycoprofiling of oral tumours associates N-glycosylation with lymph node metastasis and patient survival”*¹

Câncer e microambiente - descoberta e validação de alvos e terapias

Dentro do projeto Temático Fapesp (21/05726-6) **“Metabolismo no microambiente e o papel das trocas metabólicas na progressão tumoral”**, foram realizados estudos *in vivo* de modelos de implantes singênicos ortotópicos de células tumorais de mama para avaliar o papel de glutaminase 1 (GLS) e glutaminase 2 (GLS2) no perfil de células imunes infiltradas. Os resultados confirmam a hipótese de que células com expressão de GLS2 (mesmo mutante cataliticamente inativo) promovem menor infiltrado de células Th17 e aumentam a taxa de macrófagos M2/M1, indicando ambiente imunossupressivo; curiosamente, tumores são maiores e apresentam histologia indicativa de fibrose intensa e vascularização. Estão sendo realizados estudos de metabolismo celular utilizando dois equipamentos recém adquiridos, Seahorse e Oroboros, para caracterizar o impacto da expressão de GLS2 no consumo de oxigênio, dependência de glutamina e acidificação extracelular para buscar hipóteses sobre o envolvimento de GLS2 nas trocas metabólicas para modulação do microambiente imune. Inibição de GLS por pequena molécula (Telaglenastae, em estudos clínicos Fase I) levou a aumento das taxas Th1/Th2 e M1/M2, revelando que inibição de glutaminase pode propiciar ambiente imunorreativo com potencial de sinergizar com terapias de bloqueio de ponto de checagem (como uso de anticorpo anti-PD-1). Curiosamente, o estudo *in vivo* mostrou que co-tratamento com inibidor de glutaminase e anti-PD1 não levou a diminuição da massa tumoral. No momento, está sendo empregado transcriptômica e qPCR para levantar hipóteses sobre a falha no tratamento e procurar orientar sobre marcadores de resposta a telaglenaste combinado com anti-PD1. Este projeto também aborda a descoberta de enzimas

1. Carnielli, C.M.et al. (2023) Comprehensive glycoprofiling of oral tumours associates N-glycosylation with lymph node metastasis and patient survival. *Molecular & Cellular Proteomics*. <https://doi.org/10.1016/j.mcpro.2023.100586>.

com capacidade de polimerização sob estresse nutricional e, neste escopo, um artigo foi pré-aceito e está em fase de editoração para os padrões da revista e resposta na *Nature Structure e Molecular Biology*. Neste artigo é descrita a estrutura por Cryo-EM de partículas únicas e *Cryo-Focused Ion Beam Electron Tomography (Cryo-FIB ET) in situ* de filamentos da enzima GLS. Neste trabalho também é demonstrado o papel inédito dos filamentos de GLS em promover proteção mitofágica em situação de estresse nutricional. Outros dois projetos aprovados dentro desta temática de pesquisa foram: o “Plataforma de testes terapêuticos personalizados em tumores de mama” em parcerias com o hospital ACCamargo e o Instituto do Câncer do Estado de São Paulo, na linha de fomento PRONON do Ministério da Saúde (com o CNPEM como instituição responsável); e o “INCT em Modelagem de Doenças Humanas Complexas com Plataformas 3D (Model3D)” do MCTI (com a UNIFESP como instituição responsável). Foram desenvolvidos protocolos para a produção de organoides a partir de tumores de mama (26 organoides de maneira bem-sucedida, com biorrepositório de cerca de 15 organoides) e será desenvolvida uma plataforma de testes terapêuticos personalizados em tumores de mama. Por fim, está sendo desenvolvido um sistema de microfluídica para estudar metástase cerebral de câncer de mama, com o intuito de revelar os determinantes moleculares para fixação e nucleação cerebral de *circulating tumor cells* (CTCs). Com relação a este projeto, foram obtidos organoides de câncer de mama com manifestação clínica de metástase cerebral, e está se estabelecendo o cultivo 2D de endotélio da barreira hematoencefálica, o qual será aprimorado com adição de astrócitos.

Víroses Emergentes e doenças parasitárias: Imunopatogênese de doenças arbovirais

Neste primeiro semestre foi publicado artigo que descreve como a infecção por vírus Mayaro (MAYV) leva ao desenvolvimento de doença em camundongos imunossuprimidos, deficientes na resposta de Interferons do tipo I, na revista *International Journal of Molecular Science*². Dentre os achados, foi reportada a correlação entre a replicação viral, indução da expressão de citocinas e quimiocinas, recrutamento de leucócitos e desenvolvimento de edema, especialmente na pata, com o uso de microtomografia de raios X.

Ainda, no âmbito da colaboração internacional com colaboradores da USP Ribeirão Preto e da KU Leuven, Bélgica, apoiada pela parceria *Research Foundation – Flanders* (FWO) e a Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de São Paulo (FAPESP), avançou-se na caracterização da infecção por vírus usutu (USUV) em camundongos. Foram identificados tipos celulares que participam no processo inflamatório desencadeado pela infecção no cérebro, incluindo neutrófilos, monócitos e linfócitos T fenotipados por citometria de fluxo e análise histológica de cérebros infectados. A infecção para o USUV também induz expressão de mediadores pró-inflamatórios que estão associados à manifestação de doença neurológica e eventual morte dos animais. Atualmente está em investigação a inibição do recrutamento de cada população leucocitária para identificar quais leucócitos contribuem para resistência ou para o desenvolvimento de doença.

Doenças neurodegenerativas e do neurodesenvolvimento:

Avanços científicos foram obtidos neste primeiro semestre de 2023, no âmbito do projeto **“Investigação de mecanismos celulares e moleculares associados à deficiência da enzima conjugadora de ubiquitina UBE2A”**. A atividade de enzimas da via de ubiquitinação de proteínas é fundamental para o desenvolvimento e função sináptica, e a desregulação dessas enzimas tem sido cada vez mais associada às doenças do neurodesenvolvimento e neurodegenerativas. UBE2A é uma enzima conjugadora de ubiquitina (E2) e mutações em seu gene estão associadas à síndrome de Deficiência Intelectual (DI) ligada ao X. Previamente, foram identificados candidatos a alvos de ubiquitinação por UBE2A (proteoma de ubiquitinação-sítios GlyGly(K)) no cérebro do modelo animal UBE2A portador de mutação brasileira no gene em questão. No primeiro semestre de 2023, foram confirmados a relação de três proteínas sinápticas como substratos de UBE2A através de experimentos de ubiquitinação *in vitro* e imunoprecipitação do alvo com anticorpos específicos direto do córtex cerebral de camundongos.

Adicionalmente, dentre as proteínas identificadas no ubiquitinoma encontram-se proteínas moduladoras da via de ubiquitinação, dentre elas a UCH-L1, também associada a doenças neurológicas. A UCH-L1 é altamente expressa em neurônios e atua não apenas como uma enzima de ubiquitinase, como também já foi reportada apresentar atividade de ubiquitina-ligase, indicando um papel central na regulação da via de ubiquitinação neuronal. No período, foram iniciados experimentos de clonagem,

2. Carvalho, A.C. et al. (2023) Characterization of Systemic Disease Development and Paw Inflammation in a Susceptible Mouse Model of Mayaro Virus Infection and Validation Using X-ray Synchrotron Microtomography. *Int. J. Mol. Sci.*, 24(5), 4799; <https://doi.org/10.3390/ijms24054799>

expressão e purificação de UCH-L1 para estudos funcionais e estruturais visando elucidar o efeito de mutações de UBE2A, associadas a DI, na interação com a UCH-L1 e regulação de sua atividade.

Para identificação, por espectrometria de massas, de E3 ligases parceiras de interação e moduladoras da atividade de UBE2A no contexto neural, foram realizados os primeiros testes de validação de expressão e de função da construção FLAG-TurboID-UBE2A em células de neuroblastoma SH-SY5Y tratadas com biotina. Os procedimentos estão em fase final de padronização para que as amostras sejam enviadas à espectrometria de massas.

Em adição, foram iniciados os testes de crescimento de neurônios hipocámpais primários murinos em grades de ouro e congelamento rápido em etano líquido para visualização subsequente de neuritos do modelo animal UBE2A mutante, bem como de complexo de liberação de neurotransmissores e cristas mitocondriais por criotomografia de elétrons (Cryo-ET).

Por fim, foram conduzidos experimentos em neurônios diferenciados de células-tronco pluripotentes induzidas (hiPSCs) derivadas dos pacientes brasileiros portadores da mutação no gene UBE2A. Os experimentos incluem validações da maturidade das sinapses em modelos 2D e 3D, via microscopia eletrônica e testes funcionais com marcadores; em adição aos primeiros ensaios com a sonda genética sinapto-pHluorina em neurônios de hiPSCs. Esta sonda permite avaliar a dinâmica de reciclagem de vesículas sinápticas através de expressão no lúmen das vesículas sinápticas e emissão da fluorescência de GFP quando há exocitose e exposição do repórter ao pH fisiológico. Portanto, será possível avaliar se os neurônios de pacientes UBE2A apresentam deficiência na transmissão sináptica, assim como foi observado previamente nos neurônios do modelo animal.

Como parte do projeto “Neurobiologia molecular – desvendando os mecanismos moleculares de transtornos do neurodesenvolvimento” está sendo investigado uma proteína humana altamente associada a transtornos de neurodesenvolvimento: DDX3X. Esta proteína é um RNA helicase da família DEAD-box com papel fundamental em diversas etapas do metabolismo de RNA. Estudos recentes têm mostrado que DDX3X também participa de processos de separação de fase líquido-líquido (LLPS) dentro das células, principalmente em grânulos de estresse. O DDX3X foi produzido e purificado no laboratório e foram realizados experimentos de LLPS *in vitro*, caracterizando tal processo por meio de microscopia confocal, ensaios de turbidez e espalhamento de luz dinâmico (DLS). Verificou-se que a DDX3X recombinante é capaz de formar condensados *in vitro*, mesmo na ausência de RNA, quando em baixo pH (Figura 4A,B) ou em altas temperaturas (Figura 4C), semelhante ao descrito para sua ortóloga de levedura, Ded1. Quando na presença de RNA, a proteína forma condensados em pH fisiológico (Figura 4A), que contêm RNA (Figura 4D) e em temperaturas menores (Figura 4C). Também foram iniciados estudos da dinâmica dos condensados de DDX3X, utilizando a técnica de espectroscopia de correlação de fótons de raios X (XPCS) na linha de luz Cateretê do Sirius. Os resultados iniciais indicam que a dinâmica de separação de fase de DDX3X após 1 h de incubação com RNA é super difusiva, com formação de uma fase tipo gel (Figura 4 E). Os próximos passos buscam caracterizar os condensados de DDX3X a partir de diagramas de fase frente a diferentes aditivos e explorar por XPCS o comportamento dinâmico do processo. Posteriormente, será estudado o impacto de mutações identificadas em pacientes com transtornos de neurodesenvolvimento, com o intuito de aumentar a compreensão a respeito dos mecanismos moleculares associados a esses transtornos.

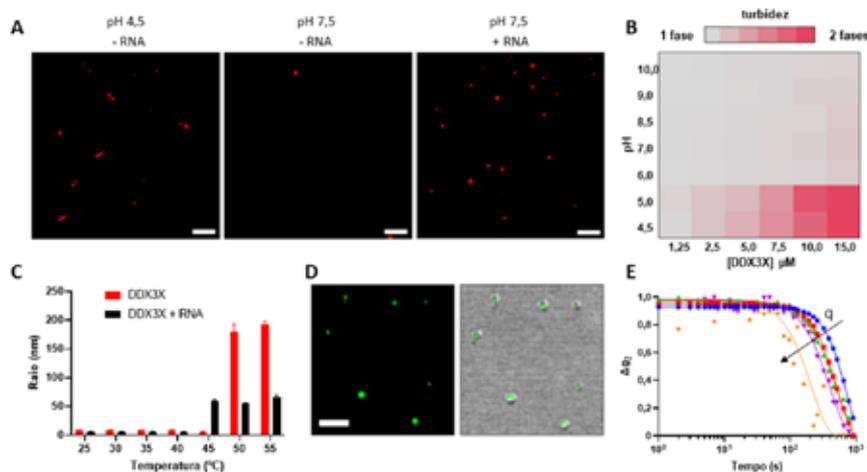


Figura 4. Estudo da separação de fase líquido-líquido (LLPS) da proteína DDX3X. (A) Imagens representativas de microscopia confocal de DDX3X em fusão com a proteína fluorescente mCherry, em pH 4,5 ou 7,5, na ausência (-) ou na presença (+) de RNA, mostrando a formação de condensados de DDX3X em baixo pH ou do complexo DDX3X:RNA em pH fisiológico. A barra de escala corresponde a 10 μ M; (B) Diagrama de fases de DDX3X variando-se o pH e a concentração de proteína, medido por ensaio de turbidez (absorbância a 600 nm); (C) Experimento de DLS da proteína em função do aumento da temperatura, na ausência e na presença de RNA, indicando a formação de espécies de tamanhos maiores com o aumento da temperatura; (D) Imagem por microscopia confocal da proteína DDX3X (sem fusão com mCherry) na presença de RNA marcado com FAM, mostrando que o RNA está presente nos condensados. A barra de escala corresponde a 5 μ M; (E) Curvas de autocorrelação de XPCS.

Subprograma Engenharia de Tecidos

O subprograma é destinado ao uso da engenharia de tecidos para construção de culturas celulares tridimensionais (3D) e de tecidos por bioimpressão 3D, com aplicações terapêuticas e para o desenvolvimento de ensaios robustos e miméticos a ensaios *in vivo*, porém sem uso de experimentação animal. Vislumbra como principal entrega modelos de pele e modelos de curativo para aplicação em medicina regenerativa cardíaca, além de modelos celulares tridimensionais e de tecidos.

Neste semestre avançou o desenvolvimento de um novo modelo de pele que contém derme, epiderme e hipoderme através da incorporação do tecido adiposo no processo de biofabricação, dentro do projeto **Desenvolvimento de curativos dermatológicos utilizando tecidos biofabricados** (Figura 5). Além disso, foi finalizado o desenho experimental dos testes de cicatrização de ferida utilizando o protótipo de curativo de pele em modelos animais de camundongos, que deverão ser realizados no próximo semestre.



Figura 5. Modelo de pele bioimpresso com derme e epiderme. Foto do inserto e microscopia óptica evidenciando as 3 camadas da pele. A direita estão os marcadores de diferenciação observados por microscopia de fluorescência apresentando a expressão de ácido hialurônico sintetase (HAS 2), citoqueratina 10, filigrana e invólucros, demonstrando que o modelo atingiu os níveis de diferenciação esperados para a pele. Abaixo, está o modelo de pele humana reconstituída (HSE) com a adição da camada da hipoderme. A. HSE, B. Epiderme, C. Hipoderme com a gordura evidenciada em verde.

Com relação ao projeto **Desenvolvimento de curativos cardíacos utilizando tecidos biofabricados**, foram desenvolvidos 3 biomateriais compostos por Gelma, matriz de fábrica e por uma bela de Gelma- PEGTA. Após estes desenvolvimentos, foram formadas biotintas através da mistura destes materiais com fibroblastos e com células mesenquimais. Estas biotintas foram caracterizadas em termos de estabilidade, estruturação, relógio e ensaios de life and dead. Os resultados demonstraram que as biotintas compostas por Gelma e matriz de fábrica, com células mesenquimais foram as mais viáveis e que proporcionaram melhor estruturação dos construtos bioimpressos, além de melhor viabilidade celular. Com isso, foi desenvolvido um protótipo inicial para ser trabalhado no curativo cardíaco.

No âmbito do projeto de **Desenvolvimento de modelos de culturas 3D para screening de fármacos**, foram desenvolvidos e caracterizados modelos de fígado formados por células HepaRG em mono e co-cultura com células estreladas hepáticas HHSTec em relação à capacidade de diferenciação em hepatócitos maduros e ductos biliares em presença de 2%, v/v de DMSO. Também foi desenvolvido e caracterizado um modelo hepático com as células HepaRG e HHSTec com capacidade de indução de esteatose (acúmulo de gordura) após incubação com meio condicionado de adipócitos previamente diferenciados a partir de células 3T3-L1 (meio condicionado I e II) durante 14 dias. Diferentes ensaios foram realizados para avaliar a efetiva utilização de meios condicionados para indução da esteatose nos modelos de fígado desenvolvidos. O objetivo foi desenvolver e caracterizar um modelo hepático complexo que pudesse ser induzido ao acúmulo de gordura como um futuro modelo para a doenças hepáticas. Por fim, concluiu-se a capacidade de indução da esteatose no modelo desenvolvido em esferoides 3D de fígado em co-cultura HepaR:HHSTec, com meio condicionado de adipócitos I após 14 dias. Este desenvolvimento foi importante para obtenção e caracterização de um modelo de fígado esteatótico para futuros ensaios para a engenharia tecidual. (Figura 6).

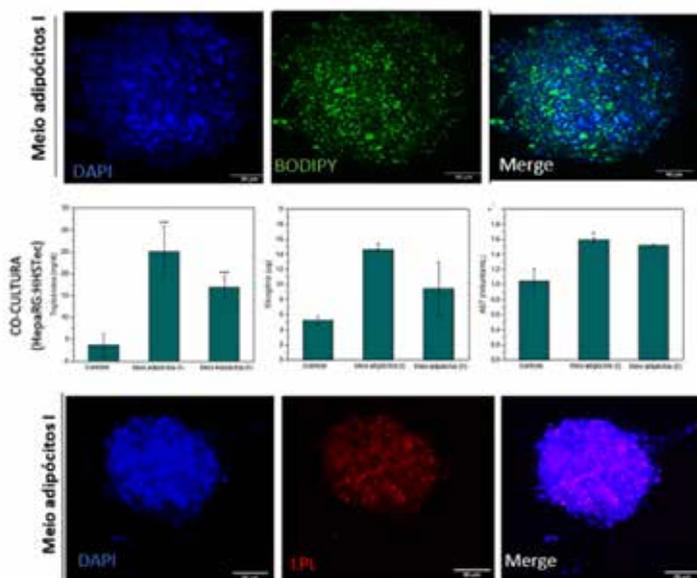


Figura 6. Esferóide de fígado esteatótico, com os lipídeos marcados em verde, medidas de triglicérides, glicogênio e AST em diferentes meios de diferenciação e dosagem de LPL que indica captação de lipídeos.

Subprograma Fármacos e Biofármacos

Subprograma composto pelas plataformas de Biofármacos e de Descoberta de Fármacos, possui como principal missão contribuir para o desenvolvimento de tecnologias que viabilizem a produção de medicamentos biológicos biossimilares, e alavancar a inovação farmacêutica no Brasil unindo ciência de ponta e a biodiversidade brasileira. A plataforma vem desenvolvendo e implementando métodos inovadores para vencer as barreiras tecnológicas para a descoberta de novos produtos naturais bioativos da biodiversidade, usando métodos robotizados, tecnologias de última geração (como a disponibilizada no Sirius) e computação avançada.

Desenvolvimento de linhagem celular biossimilar do nivolumabe

Um dos objetivos do projeto **“Desenvolvimento de uma linhagem celular produtora de um anticorpo monoclonal anti-PD1, biossimilar do nivolumabe, utilizado para imunoterapia de câncer”** é estabelecer uma plataforma automatizada para produção de linhagens de banco de célula de pesquisa, que é o insu- mo básico para geração do banco mestre e produção de biossimilares pela indústria. Para isso, foram adquiridos e instalados equipamentos de seleção e isolamento de clones de células produtoras de anti- corpos de forma automatizada, além de equipamentos para estudos analíticos e de atividade biológica.

Neste semestre foi realizada a instalação e efetuados ensaios piloto em equipamentos essen- ciais para etapas de automatização no processo de seleção de clones celulares e para carac- terização de moléculas produzidas pelos clones. Dois destes equipamentos, que compõem o laboratório de linhagens, são o Clonepix2 e o LABCHIP, descritos a seguir.

A plataforma de seleção em larga escala é baseada no equipamento Clonepix2, que faz a seleção de clones a partir de placas de ágar semi-sólido. Neste equipamento, uma placa de cultura contendo clones marcados com anticorpos fluorescentes são analisados, selecionados e transferidos individualmente para poços de placas de 96 poços. Este equipamento foi instalado no laboratório de anticorpos monoclo- nais para execução dos testes de funcionamento e treinamento. Ele será transferido para o Laboratório de linhagens celulares no momento da entrega da instalação, que deverá ocorrer no segundo semestre de 2023. A mudança do equipamento é simples e não implicará em nenhum processo de calibração.

A eletroforese capilar é uma técnica utilizada para caracterizar proteínas e ácidos nucleicos, empregando diversos parâmetros. Em maio de 2023, o equipamento LABCHIP foi instalado e um trei- namento de dois dias foi ministrado. O objetivo do treinamento foi realizar a instalação do *hardware* e *software*, verificar a funcionalidade do equipamento e conduzir um ensaio piloto utilizando um kit de análise de proteínas por eletroforese capilar. Esses kits permitem determinar de forma quan- titativa o tamanho e a concentração das amostras. Para o treinamento foram utilizadas amostras já existentes e caracterizadas no Centro, sendo do anticorpo referência Nivolumabe, do anticorpo produzido no LNBio purificado, sobrenadante de cultura de células (clones) produtores do anticorpo do LNBio e sobrenadantes de células controle, que não produzem o anticorpo.

Descoberta e desenvolvimento de fármacos

No âmbito dos métodos aplicados à descoberta de fármacos, foram realizados mais alguns avanços neste primeiro semestre de 2023. No contexto das bibliotecas químicas inovadoras, foi preparada mais uma placa da biblioteca pré-fracionada de plantas brasileiras (320 amostras) e trabalhados 10 clusters gênicos biossintéticos escolhidos a partir da mineração genômica e metagenômica.

Na parte de química sintética, foi concluído e publicado artigo científico reportando a síntese de um antiviral de difícil acesso comercial e importante às pesquisas do grupo de virologia do LNBio. No trabalho, a equipe apresenta nova rota de síntese e um achado intrigante sobre um composto intermediário formado no processo, que pôde ser elucidado com o auxílio da cristalografia de pequenas moléculas realizada na Linha Manacá do Sirius.³

Dois *softwares* para descoberta de fármacos a partir de produtos naturais foram também concluídos no período e registrados no Instituto Nacional da Propriedade Industrial (INPI): i) o Pipeline Krill⁴ para mineração de dados metagenômicos, desenvolvido em parceria com a Univali; e ii) o *software* NP3 Blob Label (BR512023001444-3), que realiza a interpretação semântica de imagens de ligantes em cristais de proteínas usando modelos de aprendizado profundo treinados pelo CNPEM, em parceria com o IC-Unicamp.

Os ensaios Multiplex, desenvolvidos em 2022, foram otimizados para automação e extração dos 7 parâmetros fenotípicos em 2 ensaios (em vez de 3) e já disponibilizados para uso nos projetos do CNPEM, que estão sendo empregados em projetos de Descoberta de Fármacos e de Pesquisa.

Subprograma Diagnóstico

O objetivo do subprograma Diagnóstico do Programa de P&D em Saúde do CNPEM é a realização de análises clínicas acuradas fora do laboratório, conhecido como *point-of-care* (POC), visando o desenvolvimento de dispositivos POC elétricos/eletroquímicos para aplicações em 2 frentes: a detecção de biomarcadores corporais como soro e saliva e o monitoramento *in-situ* e em tempo real de espécies químicas usando sensores vestíveis sobre a pele humana. As suas áreas de atuação são (i) a mineração de biomoléculas como biomarcadores para fins de diagnóstico e de prognóstico, (ii) o desenvolvimento de dispositivos usando métodos de micro/nanofabricação avançados ou métodos verdes, e estudo/uso (iii) de materiais (suas propriedades, desempenho e nanotoxicidade) e (iv) de modelos de machine learning para o aumento da acurácia dos dados.

As plataformas POC devem ser portáteis, simples e rápidas, além de gerar sensibilidade e especificidade altas (acurácia clínica) e possuir compatibilidade de produção em larga escala de maneira a possibilitar o seu uso em massa pela população. Os avanços obtidos ao longo do primeiro semestre de 2023 dizem respeito (1) à fabricação de sensores reprodutíveis e de baixo custo final, (2) ao monitoramento de múltiplas amostras ou doenças de modo mais rápido, (3) à determinação de ácido hipúrico, (4) à funcionalização controlada de dispositivos eletroquímicos à base de papel com nanopartículas visando obter biossensores mais sensíveis e seletivos, (5) o prognóstico para câncer de cabeça e pescoço e (6) estudos da estabilidade coloidal e toxicidade de um nanomaterial promissor para uso como eletrodo em diagnósticos.

Chips eletroquímicos ultradensos

Visando a obtenção de sensores escalonáveis, reprodutíveis e de baixo custo para análises eletroquímicas, foi desenvolvida uma estratégia de fabricação baseada em técnicas tradicionais (fotolitografia e deposição de filmes finos) e engenharia de filmes finos verticais que permite a fabricação de sensores ultradensos (diversos por lâmina de substrato), cujo alguns resultados de caracterização podem ser vistos na Figura 7.

Com o uso de microeletrodos como eletrodos de trabalho (WE), as baixas correntes geradas (da ordem de nA) não perturbam a estabilidade do potencial do eletrodo quase referência (QRE), o que dispensou o emprego do eletrodo auxiliar (usualmente empregado para medidas eletroquímicas), o que contribui para integração dos sensores por *wafer* e simplifica as análises. O processo de fabricação pode produzir até cerca de 830 sensores em um único *wafer* de vidro (35 mm × 75 mm), o que leva a uma redução significativa do custo dos sensores. O custo unitário foi estimado em R\$0,21 para 830 sensores por *wafer* de vidro considerando uma infraestrutura industrial. Desde que envolvem o uso de métodos de fotolitografia e deposição de filmes finos, os quais podem gerar

3. Naciuk, F. F. et al. (2023) Competing interests during the key N-glycosylation of 6-chloro-7-deaza-7-iodopurine for the synthesis of 7-deaza-2'-methyladenosine using Vorbrüggen conditions. *Front. Chem.*, <https://doi.org/10.3389/fchem.2023.1163486>. 4. <https://github.com/LGM-Bioinfo-UNIVALI/Krill>

estruturas com alta resolução e são escalonáveis e já bem estabelecidos na indústria. Assim, os dispositivos combinam custo reduzido com compatibilidade de produção em larga escala, garantindo reprodutibilidade elevada.

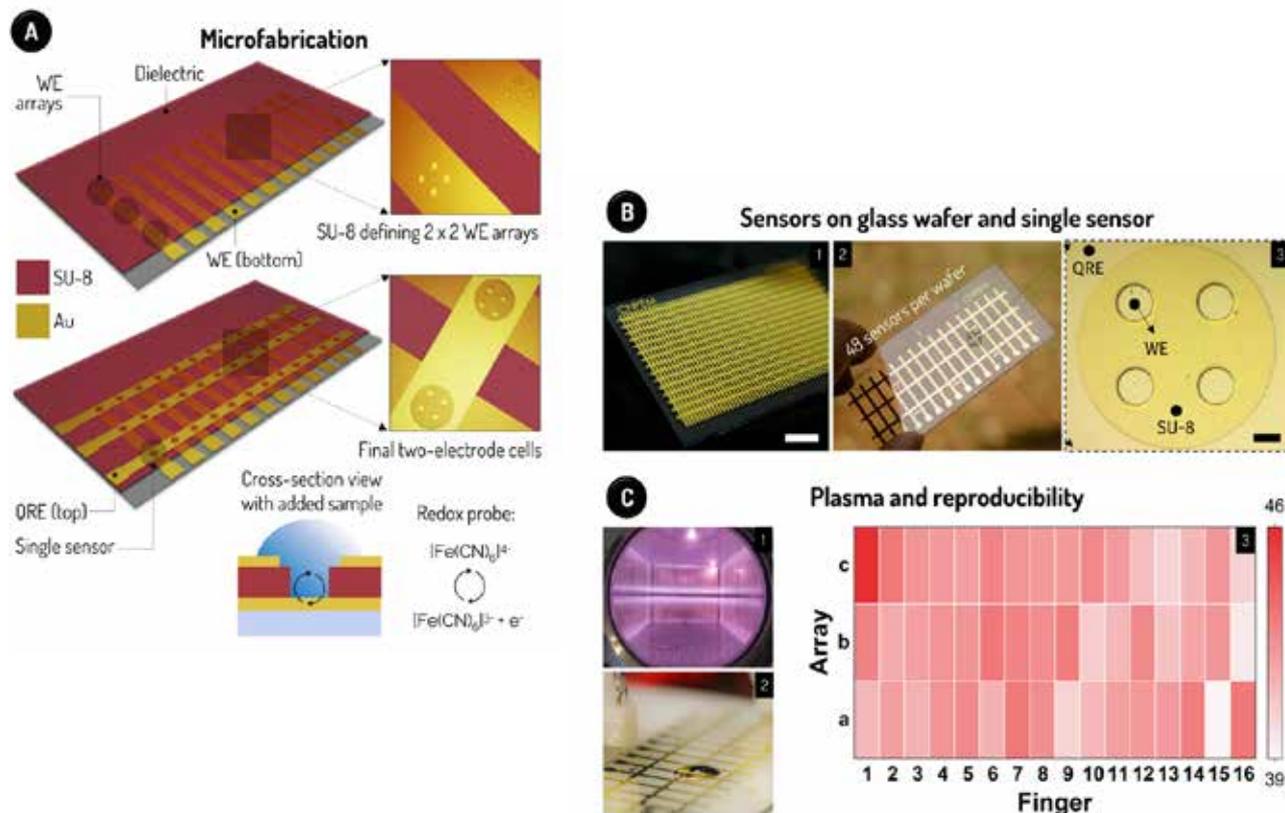


Figura 7. Sensores eletroquímicos ultrasensíveis. (A) Etapas de fabricação para deposição do WE, SU-8 e QRE. O SU-8 atua como meio isolante entre WE e QRE e para a definição das áreas de detecção. São gerados 3 sensores para cada finger atuando como WE. (B) Fotos de dispositivos com 830 (1) e 48 (2) sensores por wafer e imagem de estereoscopia da área de detecção (3). As barras de dimensão equivalem a 20 mm (1) e 40 μm (3). (C) Imagens relativas à etapa de exposição a plasma em Argônio, realizada para limpeza do WE e aumento da hidrofiliabilidade do sensor (1), e ao baixo ângulo de contato entre uma gota d'água e o sensor (2), o que se deve ao aumento da hidrofiliabilidade da sua superfície. São apresentados também dados de corrente de pico média considerando as correntes de oxidação e de redução obtidas por voltametria cíclica da sonda redox reversível $\text{Fe}(\text{CN})_6^{3-/4-}$ a 2,0 mmol L^{-1} (3). Esses dados foram medidos para os 48 sensores de um wafer de vidro. WE e QRE seguem identificados por números (1 a 16) e letras ('a', 'b' e 'c'), respectivamente.

Diagnósticos multiplexados a partir de uma única resposta

A partir das reflexões sobre o uso dos sensores verticais (ver Figura 7), houve um avanço inédito na eletroquímica: a análise simultânea e independente de reações redox distintas. Essa descoberta permite a detecção simultânea de múltiplos biomarcadores e/ou amostras a partir de um único eletrodo de trabalho (WE), simplificando e barateando os diagnósticos multiplexados. Esse tipo de teste é crucial para elevar a capacidade de análise de um número maior de amostras e a acurácia clínica.

Abreviada de SERM (*single-response multiplexed*) essa estratégia é apresentada na Figura 8A. Uma vez que um mesmo *finger* de eletrodo de trabalho (WE) contempla 3 sensores, podemos usá-los como áreas de detecção separadas fisicamente em um mesmo experimento de SWV após o curto-circuito dos 3 QREs. A adição de sondas redox diferentes sobre cada uma dessas áreas, possibilita diferenciar os sinais derivados de cada espécie eletroativa em função dos seus potenciais de pico, sem interações entre as sondas como mostra a Figura 8B. Em análises com biossensores do tipo label-free, os dados de supressão de corrente faradaica têm permitido o monitoramento de até 3 amostras de COVID-19 a partir de um único scan de SWV. Em contraste aos sistemas convencionais, o biossensor SERM é capaz de fornecer diagnósticos multiplexados usando um único eletrodo, simplificando seu uso, reduzindo o tempo de medida e permitindo o uso de potenciostatos de baixo custo e portáteis de um único canal. Um vídeo mostrando uma análise de voltametria no dispositivo pode ser acessado pelo QR Code apresentado na Figura 8C.

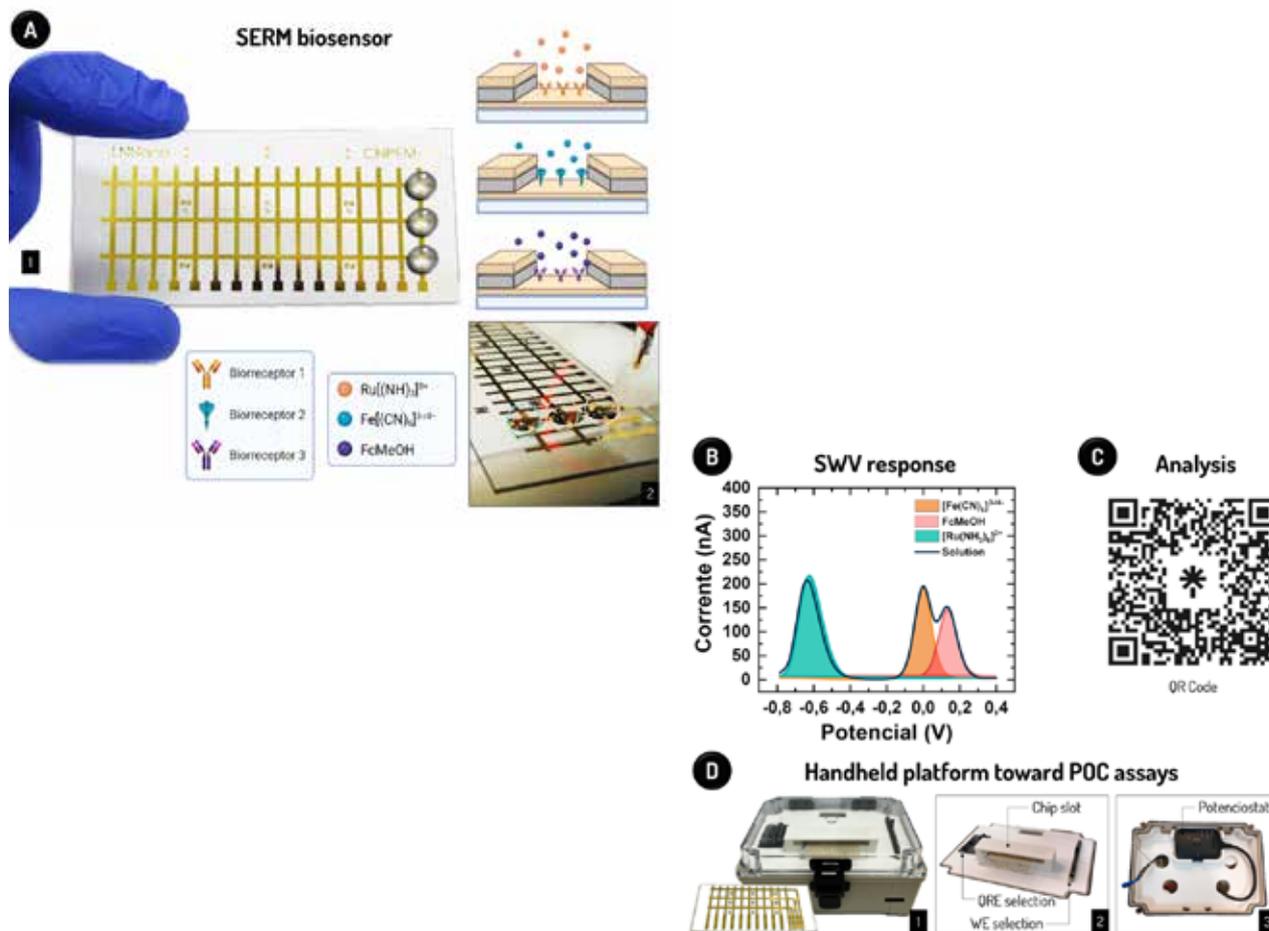


Figura 8. Biossensor SERM. (A) Ilustração da estratégia para análises multiplexadas de resposta única (1) e uma foto do chip com 3 gotas contendo $[\text{Ru}(\text{NH}_3)_6]^{3+}$, $[\text{Fe}(\text{CN})_6]^{3-/4-}$ e FcMeOH sobre áreas de detecção independentes de um mesmo *finger* de WE (2). (B) Análise das três espécies eletroativas. O voltamograma de SWV mostrado (1) foi obtido para análise das sondas $[\text{Ru}(\text{NH}_3)_6]^{3+}$ 3,0 mmol L⁻¹, $[\text{Fe}(\text{CN})_6]^{3-/4-}$ 2,0 mmol L⁻¹ e FcMeOH 3,0 mmol L⁻¹, com a linha azul indicando as correntes na condição SERM e as áreas coloridas sendo referentes a medidas individuais de cada sonda conforme destacadas. (C) QR code para visualização de um vídeo que demonstra uma análise de CV realizada com o dispositivo. (D) Protótipo de um equipamento para realização de medidas em campo (1). As demais imagens destacam as partes externa (4) e interna (5) desse protótipo. A barra de dimensão em (1) representa 10 mm.

Em paralelo, para garantir a portabilidade e a simplicidade do método de modo a possibilitar a realização de medidas em campo, foi construído um protótipo com conectores elétricos de encaixe a um potenciostato portátil (Sensit BT - PalmSens), acoplado internamente ao protótipo como mostra a Figura 8D. O seu uso será explorado ao longo dos próximos meses, mas já demonstra o potencial de adaptação, modulação e portabilidade do dispositivo, fatores essenciais para sua aplicação de rotina. Outras aplicações usando o biossensor SERM seguem em andamento, como o diagnóstico multiplexado de Zika e Dengue e a detecção da viabilidade celular de múltiplas células tumorais para a análise da eficácia de medicamentos contra o câncer. Pedidos de patente referentes à microfabricação dos *chips* verticais em malha e ao método SERM seguem em fase de depósito.

Transistores baseados em materiais 2D para a determinação de ácido hipúrico

O ácido hipúrico (AH) é um metabólico excretado na urina e está relacionado com intoxicações por solventes orgânicos e algumas doenças como as renais, gastrointestinais, aterosclerose e infecções por parasitas. Diante disso, foi desenvolvido um transistor eletrolítico fabricado com óxido de grafeno reduzido para a detecção desse ácido visando o diagnóstico dessas doenças. Para isso, o dispositivo foi modificado com um polímero molecularmente impresso (MIP) sintetizado para a interação seletiva com ácido hipúrico. Os resultados obtidos pelos dispositivos modificados demonstram que o sensor desenvolvido com o polímero molecularmente impresso é promissor para a detecção rápida e acurada de ácido hipúrico em urina possibilitando o diagnóstico de doenças de forma simples, rápida, com baixo custo, pouco consumo de amostra e sem a geração de resíduos tóxicos. Estudos posteriores serão realizados em amostras de urina a fim de avaliar o desempenho analítico do sensor.

Dispositivos eletroquímicos nanoestruturados à base de papel pirolisado

Dispositivos eletroquímicos baseados em papel são promissores para aplicações na área da saúde em análises de alta sensibilidade, além de serem verdes, de baixo custo, acessíveis, miniaturizados, fáceis de usar e descentralizados. A funcionalização química com nanopartículas de ouro (AuNPs) é fundamental para ajustar a sensibilidade e seletividade dos eletrodos, proporcionando um ambiente favorável para imobilização de uma série de espécies de reconhecimento biológico. Para superar o desafio de controlar diferentes propriedades de superfície com uma única rota de funcionalização, foi ajustada a área dos eletrodos, o tamanho e a concentração das nanopartículas de ouro a partir de uma funcionalização com polidopamina (PDA). Os eletrodos modificados com PDA capturam íons AuCl_4^- que são, em seguida, reduzidos eletroquimicamente. Para ajustar a composição química dos eletrodos modificados, foram realizados tratamentos térmicos. Sem o tratamento térmico, a polidopamina depositada torna a superfície superhidrofílica e proporciona um aumento de corrente devido ao preenchimento do eletrólito nos poros do papel. Já o aumento de temperatura proporcionado pelo tratamento térmico reduz a espessura do filme de polidopamina devido à perda de grupos funcionais nitrogenados. Estudos posteriores serão feitos visando compreender a formação da polidopamina em nanoescala e como as nanopartículas de ouro afetam o processo de transferência de carga visando o preparo de novos biossensores eletroquímicos.

Prognóstico para câncer de cabeça e pescoço

O câncer de cabeça e pescoço é a oitava principal causa de câncer em todo o mundo e 90% desses tumores são carcinoma espinocelular oral (CEC). Até o momento, não há marcadores robustos ou alvos terapêuticos disponíveis na prática clínica para esse tipo de câncer. Por meio da proteômica baseada em espectrometria de massas, foi revelada uma assinatura de marcadores prognósticos que permite a classificação de pacientes com (N+) e sem (NO) metástase linfonodal, que é o principal fator prognóstico desse tipo de carcinoma. Para avançar na tradução desse conhecimento, foram propostas duas abordagens principais para avaliar os marcadores de assinatura prognóstica em um fluido não invasivo, a saliva. A primeira consiste em método de proteômica dirigida para quantificação de peptídeos para determinar faixas de concentração que determinem a presença ou ausência de metástase linfonodal. A segunda estratégia compreende o reconhecimento de proteínas alvos, validados pela proteômica dirigida, em um biossensor eletroquímico baseado em ZIF-8, usando anticorpos imobilizados. Os resultados mostram que o biossensor foi capaz de determinar a faixa de concentração das proteínas-alvo, indicando diferenças entre a saliva de pacientes com (N+) e sem (NO) metástase linfonodal, resultados que concordaram com aqueles obtidos por proteômica. Posteriormente, será realizada a estratégia SERM para esses biomarcadores a fim de avaliar a resposta do painel de assinatura prognóstica em uma única etapa. Em conjunto, essas iniciativas são promissoras para melhorar o tratamento da doença e a qualidade de vida dos pacientes.

Influência da concentração de proteínas plasmáticas na formação da biocorona e da toxicidade a eritrócitos de GO-AgNPs

O nanomaterial (NM) híbrido composto por óxido de grafeno decorado com nanopartículas de prata (GO-AgNPs) é um material de grande potencial para inovação tecnológica, possuindo aplicações nos setores agroindustrial, farmacêutico, ambiental e biomédico, incluindo o seu uso na fabricação de biossensores eletroquímicos para o aumento da acurácia de diagnósticos. Em meio biológico, os NMs podem interagir com proteínas e outras biomoléculas formando um revestimento em sua superfície denominado biocorona, ou corona proteica (termo usado com foco nas proteínas do meio), o qual confere ao material uma identidade biológica, modulando sua resposta e interação celular. Assim, é fundamental avaliar as mudanças físico-químicas de superfície após formação da corona proteica e sua influência na toxicidade dos NMs.

De acordo com a ASTM E2524-08⁵, um material é considerado potencialmente tóxico aos eritrócitos quando há hemólise, isso é o rompimento da membrana celular pela liberação de hemácias, maior que 20%. Neste contexto, foi analisada a toxicidade de nanopartículas de prata aos eritrócitos por ensaio de hemólise, bem como a influência da formação da corona proteica formada pela interação dos nanomateriais com proteínas plasmáticas. A estabilidade das nanopartículas de prata e do nanomaterial na presença da corona proteica de plasma (GO-AgNPs@P) foi avaliada por espectroscopia de UV-vis. Os dados preliminares mostraram que, na exposição com GO-AgNPs, houve deformação dos eritrócitos. Posteriormente, será avaliada a interação com o material revestido e mapear por EDS de modo a confirmar a localização da prata na membrana eritrocitária.

5. Standard Test Method for Analysis of Hemolytic Properties of Nanoparticles.

Subprograma em Desenvolvimento Pré-Clínico

Edição do genoma para criação de camundongos modelos de doenças humanas

A instalação de uma plataforma de desenvolvimento pré-clínico, no contexto de Edição do Genoma para criação de camundongos modelos de doenças humanas, apresenta infraestrutura e equipes competentes em produção de modelos murinos geneticamente modificados utilizando ferramentas clássicas de transgenia e tecnologias modernas de edição do genoma, como CRISPR/Cas9. O CRISPR tem sido empregado com sucesso para produção de modelos *knockouts* e *knockins*, para fins de inativação gênica ou perda de função, bem como para inserção de mutações pontuais oriundas de pacientes com doenças humanas, respectivamente. No primeiro semestre de 2023, a equipe do CNPEM concluiu com sucesso três projetos provenientes de usuários externos que visam a produção de animais CRISPR *knockouts*, totalizando a entrega de 19 novos camundongos mutantes produzidos na instalação.

Subprograma Terapia Gênica e Celular

Desenvolvimento de plataforma de terapia gênica e celular

A Mucopolissacaridose do tipo I grave ou Síndrome de Hurler (MPSI-H) é uma doença monogênica autossômica recessiva, associada a mutação no gene IDUA, o qual codifica a enzima α -L-Iduronidase, envolvida na degradação glicosaminoglicanos constituintes fundamentais da matriz extracelular dos tecidos conjuntivos que conectam células e órgãos do corpo. Logo, é uma condição multissistêmica grave, com acometimento frequente durante a infância e evolução clínica neurodegenerativa progressiva. A única terapia curativa disponível é o transplante de células tronco hematopoiéticas (HSPCs), porém a falta de doadores compatíveis é um grande entrave à sua disponibilidade. Este projeto visa o desenvolvimento e validação de um protocolo para correção da mutação mais frequente do gene IDUA, por meio do transplante autólogo de HSPCs editadas utilizando a tecnologia *CRISPR Prime Editing*.

No primeiro semestre de 2023, o projeto avançou em direção à produção de modelo celular para MPSI-H em linhagem THP-1 utilizando CRISPR/Cas9 e um DNA molde simples fita para recombinação homóloga. Foi realizada também a produção e controle de qualidade da enzima Cas9 de alta fidelidade (3xNLS-SpCas9 HiFi), cuja mutação descrita previamente reduz a clivagem de DNA fora do sítio alvo (*off-targets*), aumenta a edição na região alvo (efeito *on-target*) e as taxas de recombinação homóloga⁶. A caracterização funcional da proteína incluiu eletroforese em gel de agarose, dicróismo circular, dispersão dinâmica de luz (DLS), e ensaio de clivagem *in vitro* e *in vivo*. A enzima apresenta alta taxa de clivagem *in vitro* nas concentrações de 90-300 nM (Figura 9 A), com parâmetros de EC50 de 54,97 nM e Emax de 84,94% de clivagem (Figura 9 B). A proteína produzida no CNPEM foi comparada com uma enzima comercial sintetizada para uso em pesquisa (RUO) e para uso clínico (GMP ou BPF). A eletroforese de gel de acrilamida dessas enzimas revelou bandas acima do peso molecular esperado (166 kDa) para as amostras comerciais, o que não foi observado para a proteína produzida pelo CNPEM (Figura 9 C). Também foram observadas bandas abaixo do peso molecular esperado em todas as produções da endonuclease, que podem ter sido geradas por auto-clivagem e serão investigadas por espectrometria de massas. O ensaio de DLS demonstrou que as endonucleases avaliadas possuem o mesmo raio hidrodinâmico (Cas9 LNBio; $5,848 \pm 1,553$; Cas9 Aldevron RUO: $5,848 \pm 1,473$; Cas9 Aldevron GMP: $5,848 \pm 1,560$) (Figura 9 D). A validação de clivagem *in vivo*, realizada através da nucleofecção de sgRNA para o gene IDUA em complexo com uma das endonucleases descritas em células THP-1 revelou alelos editados com uma maior taxa de indels (inserções e deleções) utilizando a 3xNLS-Cas9 HiFi produzida no CNPEM em comparação às comerciais (Figura 9 E).

Para estabelecer o modelo celular para MPSI-H, quatro sgRNAs distintos para o gene alvo foram desenhados pelos critérios de scores de eficiência *on-target*, probabilidade de gerar *off-targets*, e proximidade com códon a ser mutado. Estes sgRNAs foram nucleoporados em complexo com a 3xNLS-Cas9 HiFi do LNBio em células THP-1. A análise de viabilidade celular não foi afetada utilizando todos os sgRNAs na proporção 1:2,5 de sgRNA:Cas9. O ensaio com a T7 endonuclease I

6. Vakulskas, C. A. et al. (2018) A high-fidelity Cas9 mutant delivered as a ribonucleoprotein complex enables efficient gene editing in human hematopoietic stem and progenitor cells. Nat Med DOI: 10.1038/s41591-018-0137-0

revelou que três sgRNAs foram eficientes em gerar indels 24h e 48h após a nucleofecção. Por fim, o sequenciamento Sanger e decodificação do eletroferograma demonstrou que dois desses sgRNAs produziram cerca de 70 % de indels. Diante deste resultado e pela sua maior proximidade com o nucleotídeo a ser editado, o sgRNA 265 foi escolhido para a próxima etapa de inserção da mutação alvo para obtenção do modelo celular de MPSI-H, o qual será utilizado para padronizar a ferramenta de CRISPR Prime Editing para fins de correção desta mutação.

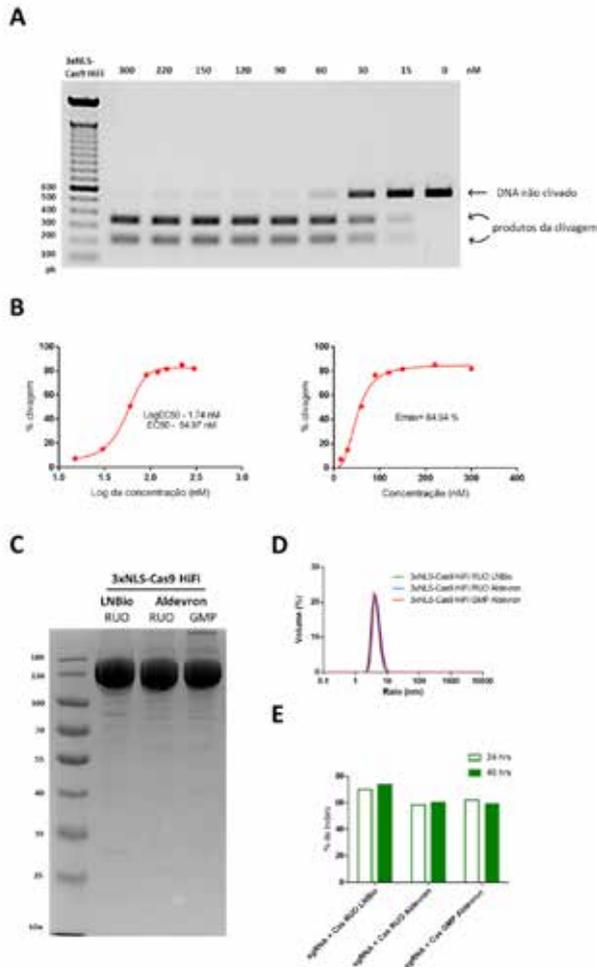


Figura 9. Caracterização da 3xNLS-SpCas9 HiFi produzida no LNBio. A. Ensaio de clivagem *in vitro* em diferentes concentrações (15-300 nM) da enzima após formação do complexo com um sgRNA (300 nM) e 30 nM de amplicon do DNA alvo (556 pb). B. Análise do EC50 (concentração que produz metade do efeito máximo) e do Emax (Efeito máximo ou clivagem máxima) após densitometria das bandas obtidas no gel de agarose do ensaio de clivagem. C. Eletroforese em gel de acrilamida corado com azul de Comassie para avaliação da pureza das proteínas 3xNLS-Cas9 HiFi obtidas do LNBio em relação às comerciais da Aldevron RUO (*Research Use Only*) e GMP (*Good Manufacturing Practice*). D. Análise do raio hidrodinâmico das 3xNLS-Cas9 RUO e GMP por dispersão dinâmica de luz (DLS). E. Porcentagem de Indels (inserções ou deleções) após 24 e 48 horas da nucleofecção das células THP-1 com um sgRNA para o gene IDUA e as 3xNLS-SpCas9 HiFi do LNBio ou comerciais. Os dados do sequenciamento Sanger foram decodificados utilizando o software DECODR v3.0 (*Deconvolution of Complex DNA Repair - Gene editing Institute*).

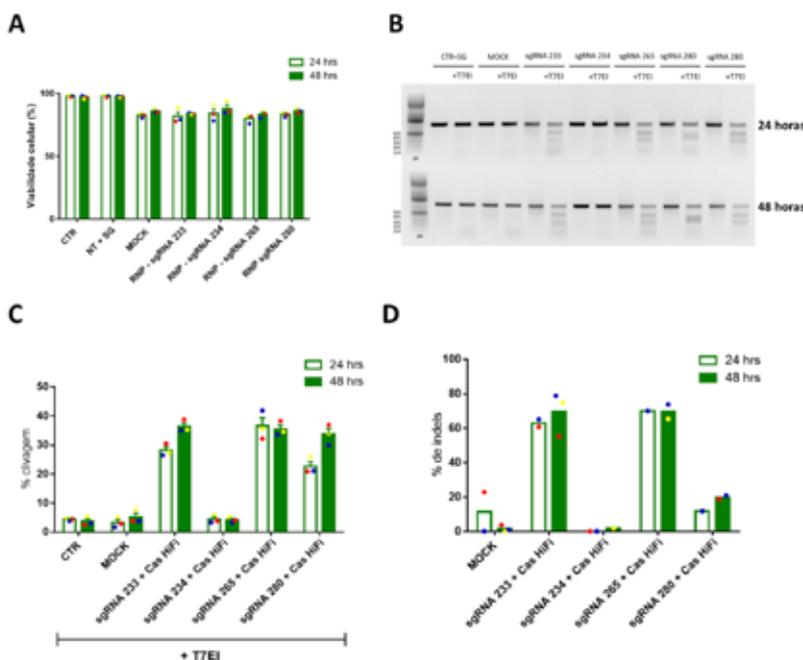


Figura 10. Edição do gene IDUA em células THP-1 utilizando o sistema CRISPR/Cas9. A. Viabilidade celular após nucleofecção do complexo RNP, composto pela proteína 3xNLS-SpCas9 HiFi e o sgRNA. Quatro sgRNAs foram testados: 233, 234, 265 e 280. B. Análise dos eventos de edição do genoma após nucleofecção com os 4 sgRNAs utilizando o ensaio de T7 Endonuclease I (T7EI), seguido de eletroforese em gel de agarose 1%. C. Porcentagem de clivagem do gene IDUA obtida pela densitometria das bandas do gel de agarose após o ensaio de T7EI. D. Percentual de alelos editados por reparo não homólogo (NHEJ)/ Indels após 24 e 48 horas da nucleofecção. As replicatas biológicas estão representadas pelos pontos vermelho, azul e amarelo.

Programa de P&D em Energias Renováveis

O CNPEM atua para viabilizar uma trajetória de diversificação e descarbonização dos sistemas energéticos. A estratégia do CNPEM em Energia Renovável engloba duas principais iniciativas: (i) biotecnologia aplicada ao desenvolvimento de biocombustíveis líquidos e a (ii) busca por soluções aos desafios de desenvolvimento de plataforma energética baseada em hidrogênio.

Subprograma de Biocombustíveis Líquidos

Atualmente o setor de transporte é um dos maiores contribuintes para as emissões de gases de efeito estufa (GEE) e os biocombustíveis avançados são a principal alternativa para a redução dessas emissões. No caso do etanol como biocombustível, a expectativa é que a demanda aumente em cerca de 50% na próxima década devido às leis de incentivo como o Renovabio, e o Brasil continuará se destacando como um dos maiores produtores mundiais. Além disso, a partir de 2027 haverá um aumento considerável na demanda por bioquerosene de aviação, impulsionado por um acordo entre vários países no setor da aviação civil (CORSIA). Todavia, ainda há desafios de P&D para viabilizar estas tecnologias no país. A expansão de área para produção de biocombustíveis deve ser feita de maneira sustentável para reduzir a possível competição com a produção de alimentos e mitigar os impactos causados pela mudança de uso da terra. Dentro desse contexto, estratégias sustentáveis podem se beneficiar da integração de cadeias produtivas. É nesse contexto que o CNPEM desenvolve tecnologias de biocombustíveis avançados nas seguintes frentes: (i) enzimas e leveduras para produção de etanol a partir de materiais lignocelulósicos da cana-de-açúcar, (ii) sistemas enzimáticos com potencial de produção de cadeias de hidrocarbonetos relevantes para bioquerosene de aviação e (iii) avaliações técnico-econômica e de ecossistemas para produção sustentável de etanol de segunda-geração e hidrocarbonetos renováveis.

Neste semestre destaca-se a descoberta de uma nova enzima, denominada “OleTP_{RN}” (Figura 11), para produzir hidrocarbonetos renováveis de vários comprimentos de cadeias de carbono, promissora para o uso em processos industriais que buscam substituir o petróleo por matérias-primas de origem vegetal. A enzima “OleTP_{RN}” é capaz de converter ácidos graxos em alcenos (olefinas), um importante intermediário químico que corresponde à aproximadamente 70% do setor de petroquímicos⁷, com potencial impacto em diferentes áreas industriais como alimentícia, cosmética e farmacêutica.

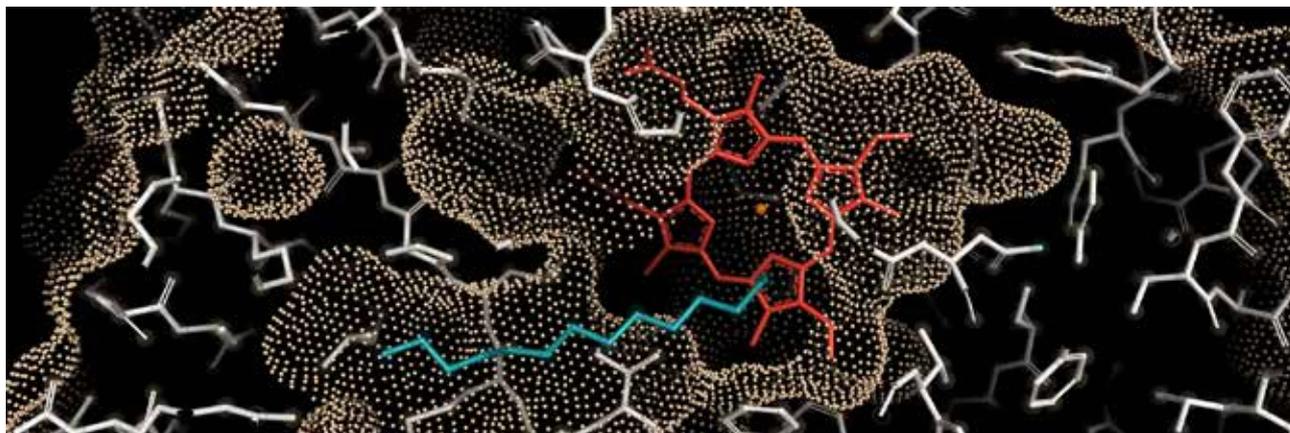


Figura 11. Sítio ativo da enzima descarboxilase descoberta pelo LNBR/CNPEM que teve sua estrutura elucidada no Sirius, o síncrotron brasileiro de última geração.

A enzima identificada abre um leque de oportunidades pela sua compatibilidade com microrganismos industrialmente relevantes e por possibilitar o uso de uma ampla faixa de matérias-primas como aquelas ricas em ácido oleico, um dos mais abundantes ácidos graxos da natureza. Vale ressaltar que essa descoberta representa um novo paradigma na produção biológica de hidrocarbonetos, pois os sistemas enzimáticos existentes são inibidos pelo ácido oleico, além de requererem condições funcionais não compatíveis com os microrganismos tipicamente utilizados em biotecnologia industrial. O trabalho utilizou uma abordagem interdisciplinar desde o estudo genômico de bactérias produtoras de hidrocarbonetos até a obtenção de estruturas tridimensionais com resolução atômica utilizando feixes de luz síncrotron (Sirius) e supercomputadores brasileiros

7. The Future of Petrochemicals © OECD/IEA 2018 Towards more sustainable plastics and fertilizers.

instalados no Laboratório Nacional de Computação Científica (LNCC). Esta abordagem permitiu elucidar um novo mecanismo biocatalítico para produção de hidrocarbonetos de diferentes tamanhos de cadeia. Os resultados obtidos na estação experimental Manacá do Sirius permitiu compreender as interações moleculares fundamentais envolvidas entre substrato e enzima, o que levou a descoberta de aspectos inéditos que governam a reação de descarboxilação do ácido graxo para produção de alcenos.

O impacto desta descoberta pode ser ainda maior, uma vez que a enzima “OleTP_{RN}” recém-descoberta, tem um potencial para o desenvolvimento de biocombustíveis e bioprodutos “drop-in”, como são chamados aqueles que apresentam composições químicas e características físicas semelhantes aos dos derivados de petróleo, podendo ser utilizados diretamente, sem exigir a adaptação das máquinas e da infraestrutura existente. Por exemplo, um dos grandes desafios para a produção de combustíveis drop-in para a aviação, é obter moléculas não-oxigenadas na constituição do biocombustível, o que exclui a utilização de etanol e biodiesel com biocombustíveis para a aviação. A enzima descoberta pelo CNPEM é capaz de desoxigenar matérias-primas por meio de uma reação de descarboxilação, produzindo hidrocarbonetos, o que contribuiria para solucionar esse problema. Este seria o primeiro passo para o desenvolvimento de uma nova rota biotecnológica para a produção de bioquerosene de aviação. Os resultados desta enzima foram descritos em uma publicação intitulada “Dimer-assisted mechanism of (un)saturated fatty acid decarboxylation for alkene production⁸” no periódico da *Proceedings of the National Academy of Sciences* (PNAS) e contou com a colaboração de pesquisadores da Universidade da Carolina do Norte, Universidade Federal do Rio de Janeiro (UFRJ) e uso de recursos do Laboratório Nacional de Computação Científica (LNCC).

Dentro da mesma temática foram avaliados os impactos econômicos e ambientais de rotas biológicas, envolvendo tal enzima, para a produção de biocombustíveis visando o transporte de longa distância. Neste caso, foram considerados processos fermentativos e enzimáticos contemplando as duas biomassas mais utilizadas para a produção de biocombustíveis em larga escala no Brasil, cana-de-açúcar e óleo de soja.

A avaliação destas rotas, ainda em estágio inicial de desenvolvimento, bem como sua comparação com tecnologias convencionais e mais maduras, permite identificar oportunidades para engenharia metabólica e melhorias de processo para torná-las mais competitivas e sustentáveis. Para isso, foram realizadas avaliações técnico-econômicas e do ciclo de vida, bem como análises de sensibilidade e de incertezas, mostrando como as diferentes configurações de processo e variações nos parâmetros técnicos influenciam os resultados econômicos (como o preço mínimo de venda) e ambientais (como a intensidade de carbono e a demanda cumulativa de energia) dos biocombustíveis.

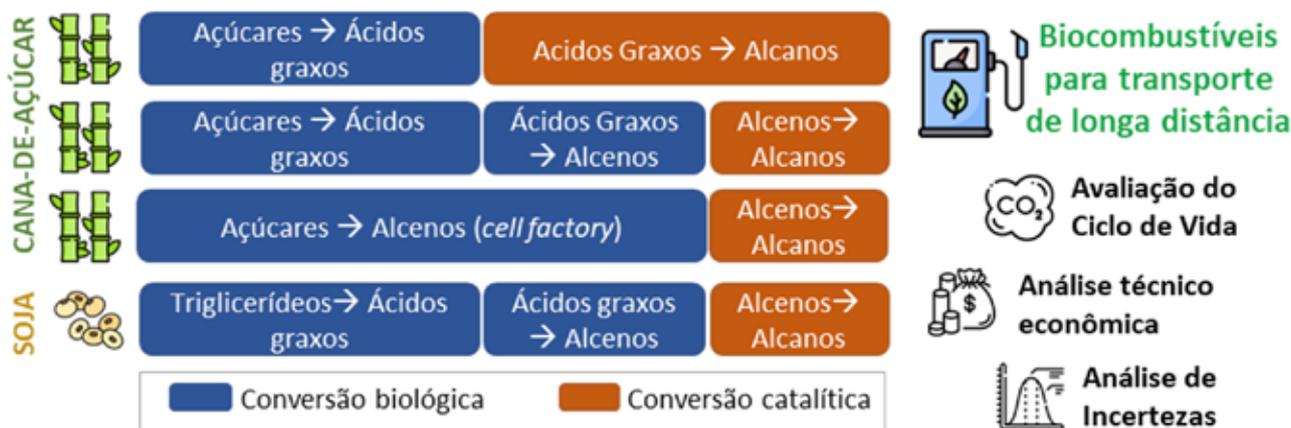


Figura 12. Cenários propostos para a avaliação da sustentabilidade da produção de biocombustíveis a partir de matérias-primas renováveis.

Nesse estudo, foram propostos cenários tecnológicos para identificar o potencial dessas rotas alternativas baseadas na conversão biológica (Figura 12). Os cenários consideraram a utilização de açúcares como matéria-prima para obtenção de ácidos graxos (intermediários para a produção de biocombustíveis), o que poderia ser realizado por microrganismos geneticamente modificados, como *Escherichia coli* ou *Saccharomyces cerevisiae*. Em seguida, estes intermediários são convertidos por reações catalíticas ou enzimáticas para produzir alcenos ou alcanos. Para a conversão enzimática, foram incluídos os dados da recém-descoberta enzima “OleTPRN”, que é capaz de converter ácidos graxos em alcenos. Também foi considerado um cenário em que estas enzimas convertem ácidos

8. Rade, L. L. et al. (2023). Dimer-assisted mechanism of (un) saturated fatty acid decarboxylation for alkene production. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, 120(22), e2221483120. <https://doi.org/10.1073/pnas.2221483120>.

graxos derivados de oleaginosas. Por fim, foram avaliadas modificações-alvo para direcionar a engenharia metabólica, mostrando que estas possibilitariam alcançar métricas de sustentabilidade semelhantes às do etanol de primeira geração de cana-de-açúcar, que é o caso mais bem-sucedido de produção de biocombustíveis em larga escala no mundo. Estes resultados foram compilados em um artigo intitulado “*From enzyme to cell-factory: Economic and environmental assessment of biobased pathways to unlock the potential of long-haul transportation biofuels*”, publicado no periódico *Chemical Engineering Journal* (CEJ).

Subprograma Hidrogênio

A descarbonização ou *net zero* têm como objetivos mitigar os problemas ambientais e buscar soluções para a produção de energia sustentável. Neste sentido, o subprograma de hidrogênio busca produzir hidrogênio verde a partir da tecnologia de fotoeletrolisadores.

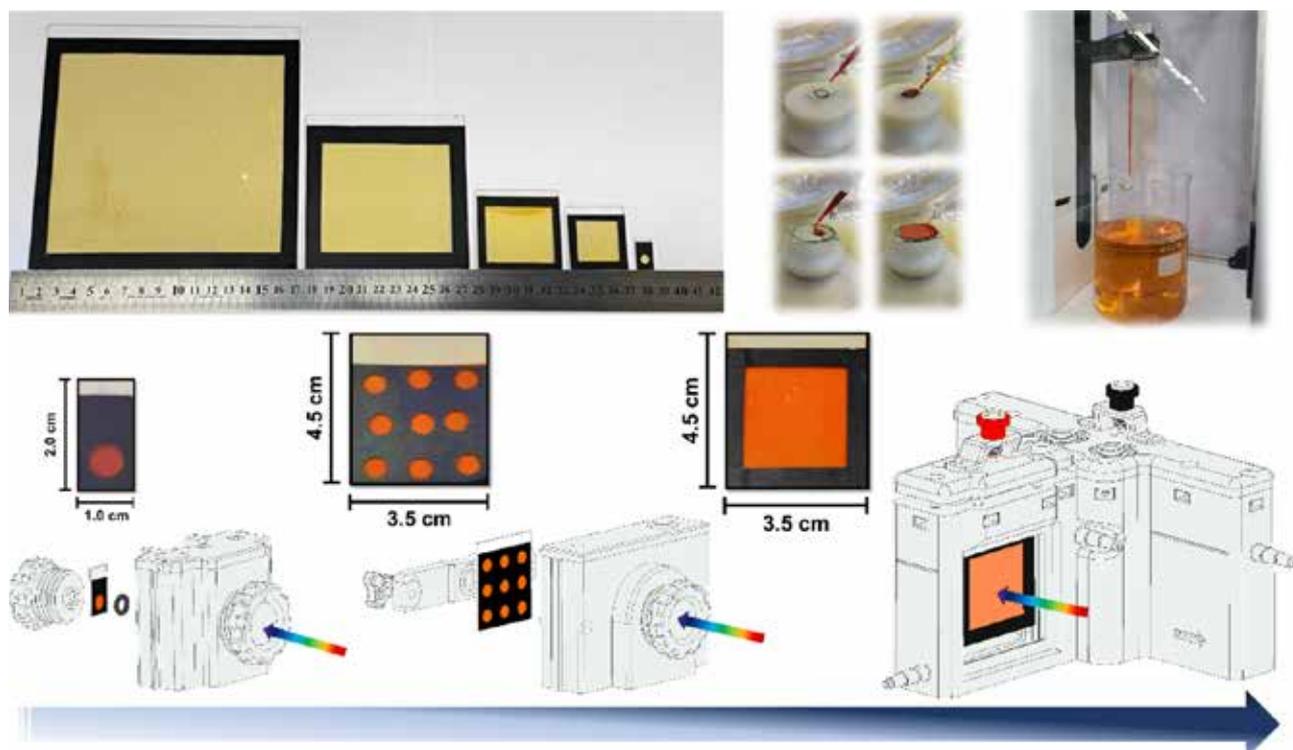


Figura 13. (Topo-Esquerda) Imagem que representa a versatilidade do método para fabricação de materiais com diferentes dimensões, (Central) Foto ilustrando o sistema de deposição por rotação e a (Direita) deposição de soluções por imersão, (Baixo) Imagem que ilustra a evolução do dispositivo de escala de laboratório a protótipo com área de até 5 cm².

Nesse semestre aspectos importantes no desenvolvimento dessa tecnologia tiveram avanços, como a avaliação técnico-econômica e viabilidade de produção de tecnologia e os riscos de toxicidade dos nanomateriais utilizados para fabricação e modificação dos ânodos/cátodos. Está em estágio inicial a construção da primeira versão do protótipo de um fotoeletrolisador que terá eletrodos com 100 cm² de área com objetivo de certificação e validação. Para esse protótipo estão sendo analisados detalhes como a vedação, janela de análise, fluxo de gases e pressão. Ao final do ano de 2023 espera-se ter finalizado as primeiras baterias de testes já utilizando os protótipos, podendo indicar a estabilidade, problemas com os componentes do reator em ambiente real de aplicação, bem como viabilidade técnico-econômica e aspectos relacionados a toxicidade dos componentes envolvidos na construção e análise. Por fim, durante os primeiros meses de 2023 foram depositadas três patentes vinculadas a esse subprograma: (i) uma vinculada ao processo de fabricação dos eletrodos que permite recobrimento de superfícies na escala de milímetros a dezenas de metros quadrados, (ii) a segunda patente relacionada ao avanço das células fotoeletroquímicas que auxiliam na avaliação da eficiência dos eletrodos construídos (iii) a terceira patente está vinculada ao processo de deposição dessa solução.

Programa de P&D em Materiais Renováveis

O CNPEM atua em questões fundamentais e complexas associadas à conversão de matérias-primas da biodiversidade, tipicamente resíduos agroindustriais, em moléculas de alto valor agregado. A estratégia do CNPEM em Materiais Renováveis engloba duas principais iniciativas: (i) desenvolvimento de rotas de biotransformação e (ii) funcionalização de biopolímeros.

Subprograma Biotransformação

A transição de uma economia baseada em matérias-primas fósseis para uma economia que privilegie matérias primas renováveis e sustentáveis requer o desenvolvimento científico e tecnológico de processos de conversão em moléculas de maior valor agregado. A biotecnologia pode desempenhar um papel importante nesta transição, quando alicerçada por meio de abordagens multidisciplinares e integradas de técnicas no estado-da-arte como radiação síncrotron, simulações quânticas, multi-ômicas, inteligência artificial, engenharia metabólica de sistemas, engenharia enzimática, biologia molecular estrutural e escalonamento de processos em escala piloto. As linhas de atuação do CNPEM para 2023 incluem o desenvolvimento de sistemas enzimáticos para despolimerização e conversão de matérias-primas de relevância industrial e de cepas microbianas engenheiradas para produção de intermediários químicos e enzimas de interesse biotecnológico, incluindo: (i) sistema de assimilação e bioconversão de aromáticos; (ii) enzimas para desconstrução de polissacarídeos vegetais; (iii) enzimas para biossíntese de hidrocarbonetos renováveis, (iv) sistema de assimilação e bioconversão de pentoses, (v) chassi microbiano fúngico para sacarificação de biomassas lignocelulósicas e (vi) cepa microbiana para produção de ácidos orgânicos em escala laboratorial.

Este subprograma caracteriza-se pelo foco na obtenção de monômeros renováveis por processos biocatalíticos. As glicosidases são enzimas cruciais para a despolimerização de polissacarídeos complexos e possuem papel fundamental em uma série de processos biológicos e biotecnológicos que envolvem a biomassa vegetal. Compreender os itinerários catalíticos das glicosidases e a contribuição das partículas carregadas na estabilização das cadeias poliméricas é essencial para possibilitar a engenharia do sítio ativo visando diminuir a barreira energética para que ocorra a biocatálise. Via de regra, as informações experimentais sobre a estrutura tridimensional das enzimas são obtidas antes e depois da biocatálise, sendo que enzimas que cristalizaram não necessariamente a fazem em um estado catalítico. Portanto, as simulações computacionais complementam o entendimento da biocatálise, uma vez que mapeiam os itinerários catalíticos possíveis.

Neste semestre foram realizadas simulações computacionais para determinar como a topologia do sítio ativo e o modo de ação influenciam as rotas catalíticas adotadas pelas glicosidases, guiando o uso racional desses biocatalisadores para processos industriais a partir de açúcares (monômeros renováveis).

No trabalho desenvolvido juntamente com a Universidade de Barcelona, foi realizada uma extensiva análise de dados de simulações computacionais quânticas e híbridas (QM/MM) para entender os mecanismos moleculares e parâmetros energéticos envolvidos no processamento de carboidratos pelas glicosidases. Foi verificado que, enzimas que reconhecem as extremidades dos sacarídeos (conhecidas como glicosidases de ação “exo”) são susceptíveis a adotarem mais de uma via catalítica para a clivagem de um mesmo substrato, pois possuem vários graus de liberdade como ponto de partida. Já nas glicosidases que reconhecem o meio da cadeia de um sacarídeo (classificadas como “endo”), apenas uma rota catalítica mostra-se energeticamente favorável.

As conclusões deste trabalho impactam diretamente o desenho racional de inibidores ou sondas para glicosidases, uma vez que ter duas (ou mais) rotas catalíticas associadas a uma mesma enzima oferece uma oportunidade para se evitar seletividade cruzada com outras enzimas que atuem no mesmo substrato. Além da parceria com a Universidade de Barcelona também houve uso de recursos de supercomputadores do Laboratório Nacional de Computação Científica (LNCC) e Barcelona supercomputing Center (BSC). Também, contou com o financiamento de fundações europeias e da FAPESP¹⁰. Estes resultados foram compilados no artigo “*Glycosidase mechanisms: Sugar conformations and reactivity in endo- and exo-acting enzymes*”¹¹, publicado na *Current Opinion in Chemical Biology*.

10. FAPESP 18/22138-8. Desvendando o papel do cálcio na catálise de beta-xilosidases / alfa-L-arabinofuranosidases da família GH43 através de métodos de dinâmica molecular "QM / MM". 11. Morais, M. A. B. et al. (2023). Glycosidase mechanisms: Sugar conformations and reactivity in endo- and exo-acting enzymes. *Current Opinion in Chemical Biology*, 74, 102282. <http://dx.doi.org/10.1016/j.cbpa.2023.102282>.

Subprograma Funcionalização de Biopolímeros

Neste primeiro semestre de 2023 interações eletrostáticas entre biopolímeros foram controladas com o objetivo de preparar bioadesivos, espumas e peças unidimensionais com propriedades mecânicas competitivas. Foram investigados alguns sistemas de forma a ampliar a pluralidade de aplicação da nanocelulose no desenvolvimento de novos materiais funcionais, são eles: OCNF (nanofibra oxidada) e LBN (látex de borracha natural); OCNF e CCNF (nanofibra catiônica) e (iii) CCNF e AlgNa (alginato de sódio).

No sistema OCNF e LBN o potencial ζ (zeta) da OCNF ($\sim -60\text{mV}$) proporcionou uma suspensão coloidal estável e a estabilidade foi mantida quando as OCNFs foram combinadas com LBN ($\zeta = -40\text{mV}$). Dessa forma, produzindo suspensões coloidais estáveis adequadas para a produção de espumas para remediação ambiental¹². Já os resultados da investigação do sistema CCNF e LBN indicam que a interação é grande o suficiente para impedir a coalescência das partículas de LBN, o que é favorável ao desenvolvimento de materiais redispersíveis. Além disso, o material preparado possui interessantes características adesivas¹³. Por fim, foi estudado o sistema de CNFs funcionalizadas com cargas opostas: oxidadas (OCNF) e cationizadas (CCNF). Os complexos OCNF-CCNF apresentaram valores de potencial ζ (zeta) intermediários (Figura 14g) em relação às CNF isoladas, com excesso de cargas positivas ou negativas dependente da fração mássica OCNF/CCNF. Com a formação dos complexos, o aspecto visual das suspensões foi alterado. As suspensões CCNFs ou OCNFs eram inicialmente translúcidas e, quando os coloides foram combinados, observou-se a presença de floculados, um indicativo da agregação entre OCNFs e CCNFs. As imagens de topografia de AFM evidenciaram a presença de aglomerados de nanofibrilas com diâmetro de até 50 nm no sistema OCNF-CCNF, como esquematizado na Figura 14d, algo não observado para as CCNFs ou OCNFs isoladas, onde os nanomateriais estavam individualmente distribuídos. Os resultados indicaram a possibilidade de estruturas nanométricas organizadas (fibrilas) a partir da complexação OCNF-CCNF, o que permitirá o desenvolvimento de espumas a base de nanocelulose com alta resistência mecânica e resiliência estrutural em meio aquoso.

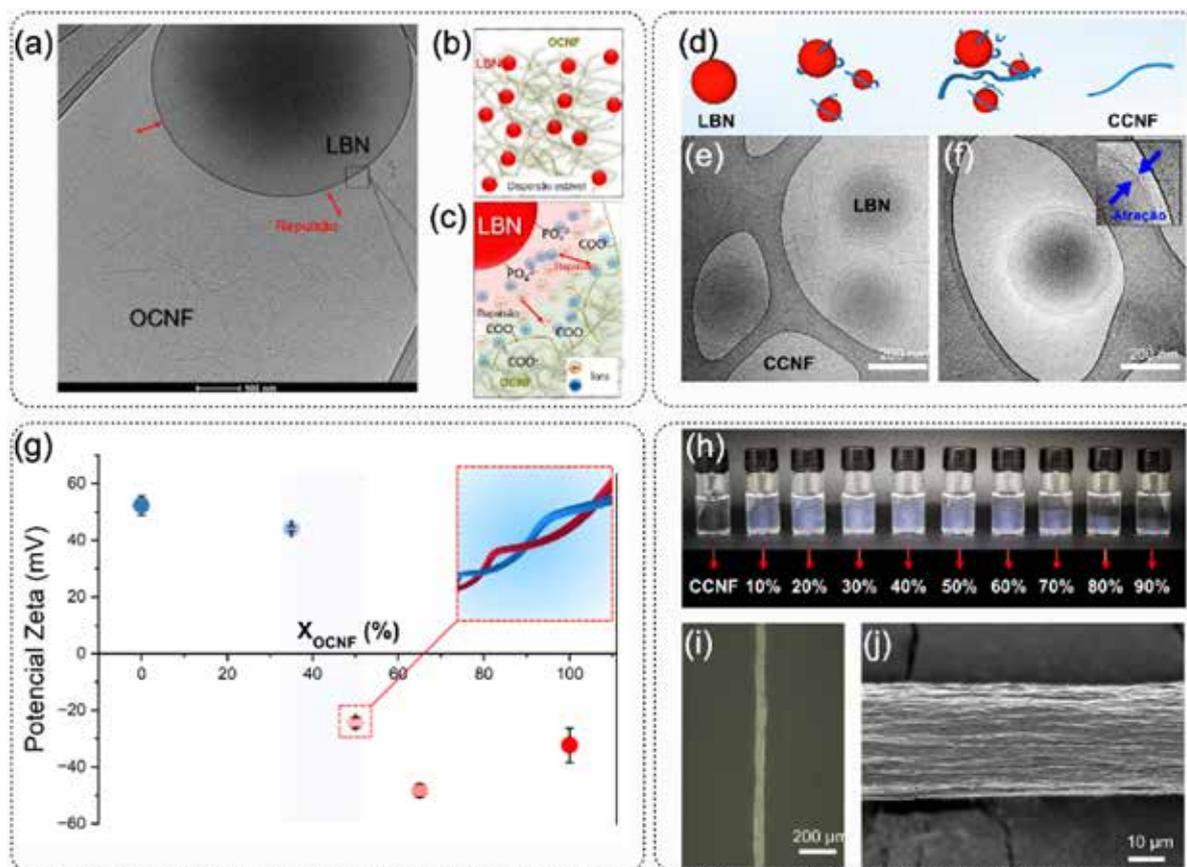


Figura 14. (a) Imagem de Cryo-TEM da suspensão de OCNF e LBN; (b) ilustração esquemática da dispersão de LBN e OCNF; (c) ilustração do mecanismo de repulsão eletrostática entre LBN e OCNF; (d) ilustração esquemática da interação entre o LBN e as CCNFs; (e, f) imagens de Cryo-TEM do complexo polieletrólítico LBN-CCNFs; (g) potencial ζ de dispersões aquosas de CCNFs e OCNFs com fração mássica de OCNF:CCNF variando de 0 a 100% m/m; (h) teste de turbidez das suspensões com diferentes proporções mássicas; Imagens de microscopias (i) óptica e (j) eletrônica de varredura das peças unidimensionais de AlgNa-CCNF.

12. Lorevice, M. V. et al. (2023). Designing 3D fractal morphology of eco-friendly nanocellulose-based composite aerogels for water remediation. *Chemical Engineering Journal*, 462, 142166. 13. Bernardes et al Patente INPI BR10202202488 (2022).

A interação entre AlgNa e CCNF por complexação interfacial foi investigada como uma estratégia inovadora para a obtenção de materiais uni e tridimensionais produzidos por fiação úmida e impressão 3D, respectivamente. A associação entre os coloides (AlgNa e CCNF) se mostrou eficaz para a produção de filamentos com diâmetro micrométrico, com o alinhamento das CCNFs no sentido de formação da peça unidimensional, característica essa que conferiu capacidade de resistir a mais de 1000x ao seu peso.

As interações eletrostáticas entre nanofibras de celulose e dióxido de titânio também foram controladas para a obtenção de emulsões do tipo óleo em água (O/W) com elevada estabilidade coloidal. Esses resultados já foram publicados e são importantes considerando uma possível aplicação de CNFs na área de cosméticos¹⁴.

No início de 2023, outros dois trabalhos envolvendo nanofibras de celulose também foram publicados em periódicos internacionais. Em um deles, foi avaliado como controlar as características morfológicas de nanofibras de celulose isoladas por microfluidização, a fim de se obter dispersões aquosas de OCNF com diferentes perfis reológicos¹⁵. No outro trabalho, a interação entre nanocelulose e grafeno foi avaliada por DFT para avançar no entendimento dessa nanointerface que possui grande potencial de aplicação em eletrônica flexível¹⁶.

Em relação ao uso de nanocelulose como reforço mecânico em nanocompósitos poliméricos, nanocristais de celulose (CNCs) funcionalizados com látex de borracha natural (LBN) podem ser modulados a fim de melhorar as propriedades mecânicas de filmes de amido e de barreira ao vapor de água, além de aumentar a resistência superficial à água desses materiais¹⁷.

Uma técnica muito importante para o entendimento de materiais produzidos a partir de biopolímeros é a microtomografia de raios X. A relevância dessa técnica de análise para a área resultou em um trabalho de revisão que descreve as suas aplicações, os recursos atuais disponíveis com a fonte de luz Síncrotron e o processamento orientado de dados voltados para essa técnica, ressaltando a urgência de combinar ferramentas computacionais com dados experimentais (Figura 15). Esse trabalho contou com a colaboração de vários colaboradores do CNPEM, sendo escolhido pelo editor como um artigo de destaque na prestigiada revista *Applied Physics Review*¹⁸, o qual repercutiu jornalisticamente no site do CNPEM e nas respectivas redes sociais.

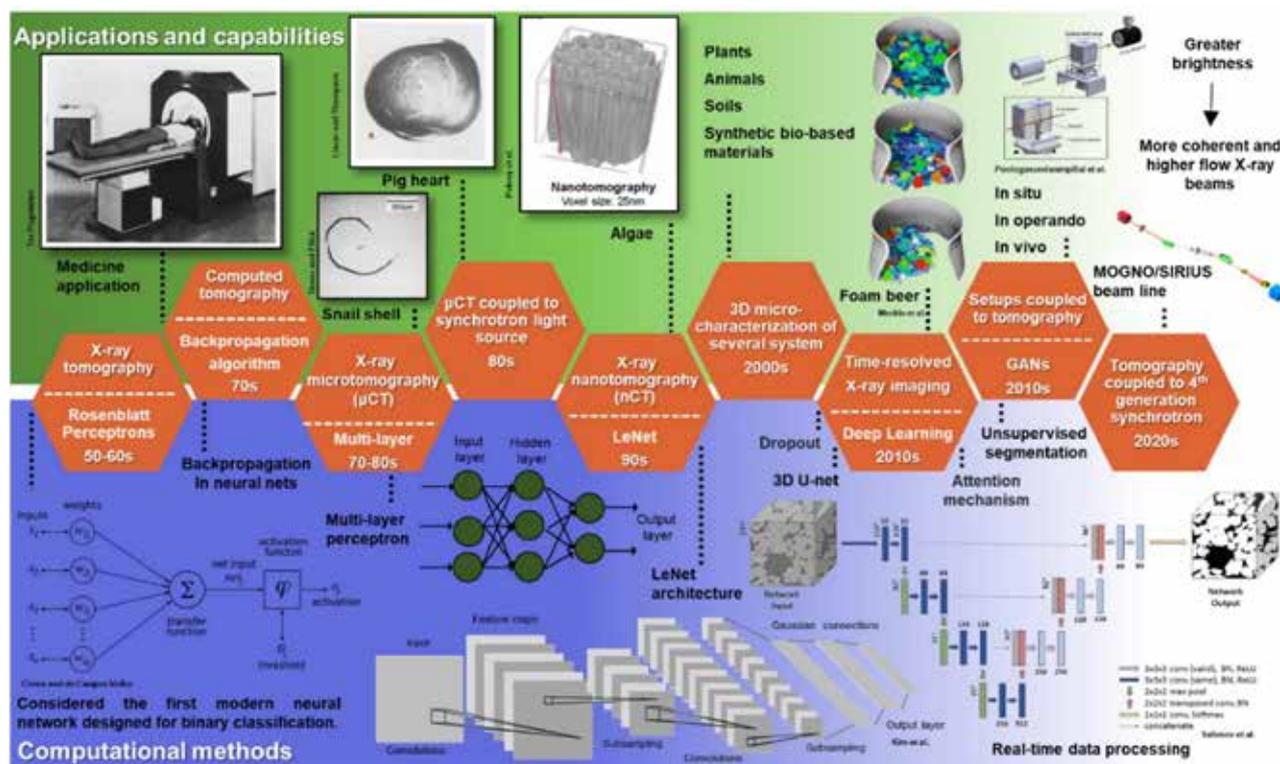


Figura 15 - Esquema ilustrativo sobre a linha do tempo da tomografia computadorizada de raios X com relação a suas aplicações até a chegada das linhas de luz Síncrotron em paralelo ao desenvolvimento de métodos computacionais visando o tratamento de grandes quantidades de dados.

14. Silva, C. E. et al. (2023). Stabilizing both oil droplets and titanium dioxide nanoparticles in aqueous dispersion with nanofibrillated cellulose. *Carbohydrate Polymers*, 302, 120354. 15. Pessan, C. C., et al. (2023). Oxidized cellulose nanofibers from sugarcane bagasse obtained by microfluidization: Morphology and rheological behavior. *Carbohydrate Polymers*, 304, 120505. 16. Silvestre, G. H., et al.; (2023). Nanoscale structural and electronic properties of cellulose/graphene interfaces. *Physical Chemistry Chemical Physics*, 25(2), 1161-1168. 17. Gouveia R.F. e Claro, P.I.C. Patente PCT/BR2023/050108 (2023) 18. Claro, P. I., et al. (2023). From micro- to nano- and time-resolved x-ray computed tomography: Bio-based applications, synchrotron capabilities, and data-driven processing. *Applied Physics Reviews*, 10(2).

Programa de P&D Agroambiental

Investigações na área agroambiental podem ser fortes aliadas para uma agricultura mais sustentável, com redução do uso de agroquímico e baixa emissão de gases do efeito estufa, além de viabilizar o desenvolvimento de novos dispositivos e estudos dos impactos de novos materiais nos ecossistemas. A estratégia do CNPEM engloba três principais iniciativas: (i) Microbiota, Nutrientes e Emissões do Solo, (ii) Remediação Ambiental e (iii) Ecotoxicidade.

Subprograma Microbiota e Emissões do Solo

A agricultura é uma das principais bases da economia brasileira, mas é altamente dependente de fertilizantes e agroquímicos, o que acarreta uma série de problemas ambientais, como contaminação de solo e recursos hídricos, diminuição da biodiversidade, emissões de GEE, entre outros. Assim, novas estratégias biotecnológicas podem ser desenvolvidas e aplicadas nas áreas agrícolas visando a substituição dos agroquímicos convencionais e a descarbonização. Estas iniciativas estão alinhadas com o Programa Nacional de Bioinsumos do Ministério da Agricultura e Pecuária (MAPA) que tem como objetivo estimular a pesquisa, a produção e o uso de produtos biológicos, como bioinsumos agrícolas, para uma agricultura mais sustentável no país. As linhas de atuação do CNPEM para 2023 envolvem o desenvolvimento de sistemas bacterianos para a produção de compostos bioativos para a agricultura e a elucidação dos mecanismos biológicos e físicos associados a emissões de solos agrícolas que englobam: (i) identificação de bactérias com o potencial de promover o crescimento radicular e melhor utilização dos nutrientes disponíveis, (ii) identificação de bactérias com potencial de substituir a aplicação de pesticidas químicos, (iii) identificação dos principais grupos microbianos responsáveis pela produção de N₂O em solos cultivados com cana-de-açúcar submetidos à aplicação de vinhaça, (iv) demonstração do efeito dos resíduos agrícolas na labilidade e proteção do carbono em solos tropicais e (v) abordagem metodológica baseada em tomografia síncrotron para visualização tridimensional do carbono particulado em agregados de solo.

Destaca-se neste semestre resultados da linha de pesquisa Identificação de bactérias com o potencial de promover o crescimento radicular e melhor utilização dos nutrientes, também financiada pela FAPESP pelo projeto¹⁹ “Decifrando o papel de compostos orgânicos voláteis bacterianos na promoção do crescimento e sanidade do milho (*Zea mays* L.) e na modulação de sua comunidade microbiana”, onde foi criado um biobanco de bactérias associadas ao milho para exploração de microrganismos produtores de compostos orgânicos voláteis (COVs) de interesse.

Os COVs são pequenas moléculas sinalizadoras naturalmente produzidas como parte do metabolismo microbiano. Estes metabólitos podem promover o crescimento vegetal bem como inibir o crescimento de fitopatógenos. Estes compostos bioativos possuem diversas vantagens em relação a outras moléculas não voláteis: (a) podem se deslocar por longas distâncias, permeando facilmente pelo solo, água e atmosfera, não sendo necessária a colonização da rizosfera por pelos microrganismos produtores; (b) por serem em grande maioria lipofílicas, estas moléculas podem permear facilmente pelas membranas das células alvos, o que as tornam mais efetivas; e (c) atuar em baixas concentrações. Apesar do potencial biotecnológico, ainda são raros estudos dos efeitos destas moléculas em culturas agrícolas extensivas, como o milho (*Zea mays* L.), uma das mais importantes no cenário mundial.

O biobanco de bactérias associadas ao milho para exploração de microrganismos produtores de compostos orgânicos voláteis (COVs) de interesse contém 1.728 isolados bacterianos, 1.056 provenientes da rizosfera (vida livre), 384 endofíticos das folhas, 96 do sistema radicular e 192 dos fragmentos do caule. Foram identificadas bactérias com efeito benéfico na germinação do milho, bem como isolado com a atividade fitotóxica de alguns COVs bacterianos, inibindo totalmente a germinação do milho. Especificamente em relação a promoção da germinação, medida pelo tamanho das radículas, o melhor isolado promoveu ganhos médios de 59%.

Dada a importância da cultura, também foi um objetivo do projeto a identificação de bactérias com potencial de substituir a aplicação de pesticidas químicos, realizando o *screening* de bactérias que produzem compostos orgânicos voláteis (COVs) para inibirem importantes fitopatógenos da cultura do milho. Para os patógenos *Pantoea annatis* e *Fusarium moniliforme*, causadores da mancha-branca e podridão do *Fusarium*, respectivamente, foram identificados antagonistas que inibiram seus crescimentos em 50%. Visando identificar os possíveis COVs

19. FAPESP 22/00474-1. Decifrando o papel de compostos orgânicos voláteis bacterianos na promoção do crescimento e sanidade do milho (*Zea mays* L.) e na modulação de sua comunidade microbiana.

responsáveis por estes fenótipos, os volatilomas das três melhores bactérias que inibem o *F. moniliforme* foram analisados, em três meios de cultura distintos e no total, 29 COVs foram identificados. Após a identificação dos perfis dos COVs bacterianos, foram selecionados compostos voláteis para serem testados individualmente (acetofenona, álcool benzílico, dissulfeto de dimetil e 2-etil,1-hexanol) e identificar, assim, quais seriam responsáveis pelo efeito inibitório.

No tocante à linha de pesquisa “Mecanismos que regulam as emissões de gases do efeito estufa em solos tropicais”, destaca-se os resultados obtidos no projeto de pesquisa que também conta com financiamento da FAPESP²⁰ intitulado: “Uso de biochar na agricultura: Implicações nas emissões de óxido nitroso (N₂O) e na comunidade microbiana do solo”. O biochar (ou biocarvão) é um subproduto da produção de biocombustíveis avançados por meio da pirólise de biomassa lignocelulósica. O biochar é um resíduo rico em carbono, com alta área superficial específica e alta porosidade. Mais de 90% do carbono presente no biochar está em formas recalcitrantes, quimicamente estáveis e mais resistentes à degradação microbiana. A aplicação de biochar na agricultura tem sido globalmente difundida com umas das únicas tecnologias capazes de induzir emissões de gases do efeito estufa (GEE) negativas. Entretanto, a maioria dos estudos da literatura foram obtidos em condições de clima temperado e pouco se sabe sobre impactos da adição de biochar em solos tropicais, sobretudo no que se refere aos grupos microbianos responsáveis pelas emissões.

O CNPEM produziu biochar a partir de resíduos oriundos das indústrias da cana-de-açúcar (palha e bagaço) e papel e celulose (pinus e eucalipto) e avaliou os efeitos da aplicação no campo como forma de mitigar as emissões de óxido nitroso (N₂O) e aumentar o sequestro de carbono do solo. De modo geral, observou-se que todos os tipos resultaram em aumentos expressivos nos estoques de carbono no solo. Em relação às emissões do solo, a adição de biochar de palha, bagaço, pinus e eucalipto reduziram em 50, 35, 35 e 25% as emissões de óxido nitroso (N₂O) proveniente dos fertilizantes nitrogenados sintéticos. Observou-se que o potencial do biochar em mitigar as emissões de N₂O está associado à dose aplicada e menores emissões são obtidas nas maiores doses de biochar. O estudo avalia ainda o efeito do biochar na comunidade microbiana do solo e os resultados preliminares indicam que a aplicação de biochar inibem o grupo de bactérias oxidadoras de amônio.

As características físico-químicas do biochar, avaliada por meio de microscopia eletrônica de varredura (MEV), espectroscopia de raios-X por energia dispersiva (EDS) e espectroscopia de fotoelétrons excitados por raios X (XPS) indicam que os biochars produzidos pelas quatro biomassas são diferentes físico-quimicamente. Por exemplo, a análise de XPS indicou que o biochar resultante de resíduos florestais apresenta maior teor de carbono (C) em sua superfície, resultando em maior capacidade de estocar carbono no solo. Por outro lado, o biochar de palha de cana-de-açúcar foi a melhor opção para mitigar as emissões de N₂O e apresentou uma maior proporção de grupos funcionais hidroxila/éter (C-O) em sua superfície. Os resultados deste estudo estão em fase final de análises.

Subprograma Remediação Ambiental

Nanocompósitos porosos a base de celulose e látex para remediação ambiental

Neste semestre, foram obtidos criogéis a partir da combinação de celulose nanofibrilada oxidada (OCNF) proveniente de bagaço de cana-de-açúcar e látex de borracha natural (LBN), formando estruturas altamente porosas e coesas. A adição do látex conferiu hidrofobicidade aos criogéis de OCNF/LBN, e os grupos carboxilatos (COOH) na superfície das nanofibrilas de celulose permitiram a adsorção de metais pesados e corantes. Esses criogéis de OCNF/LBN demonstraram uma capacidade de adsorção excepcional para materiais porosos baseados em celulose. Com relação a reusabilidade, uma propriedade importante para materiais ecossustentáveis, os criogéis foram capazes de remover entre 66% e 98 % de cobre (Cu) e azul de metileno (AM), respectivamente. Além disso, ensaios de ecotoxicidade para sistemas contendo íons de cobre foram realizados para demonstrar o potencial ecobenigno dessas estruturas porosas. O criogel OCNF/LBN mostrou sua eficácia para a remoção de cobre da água em uma concentração ambientalmente relevante sem apresentar toxicidade adicional aos organismos, que são usados como modelos aquáticos, como a *Daphnia similis*. Esses resultados indicaram que os criogéis nanocompósitos de OCNF/LBN são alternativas verdes promissoras e eficientes para remover poluentes de meios aquosos.

20. FAPESP 21/11995-0. Uso de biochar na agricultura: Implicações nas emissões de N₂O e na comunidade microbiana do solo.

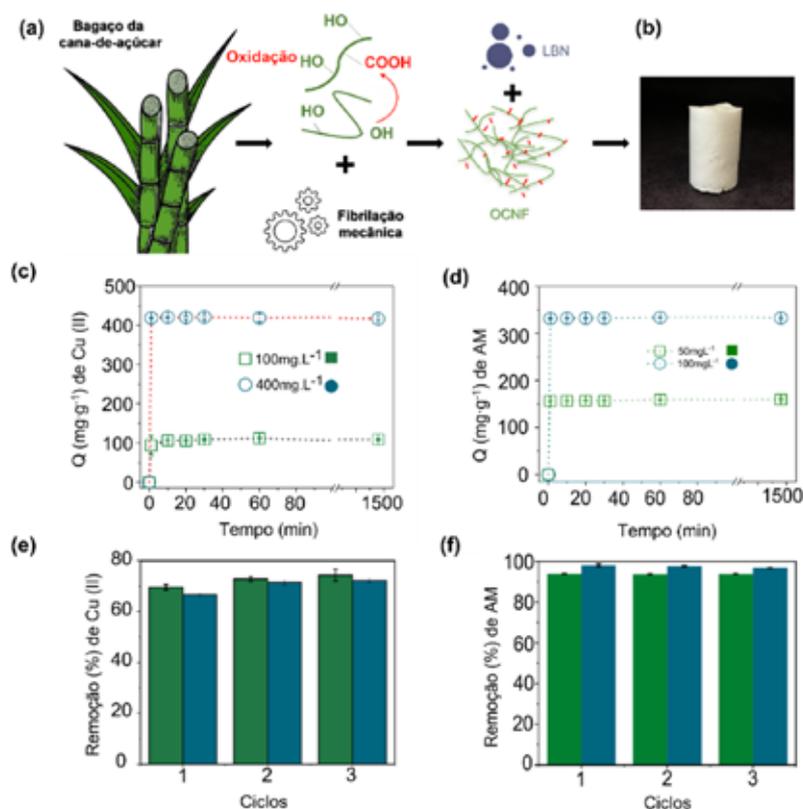


Figura 16. (a) Resumo esquemático da obtenção de criogéis baseados em nanofibrilas de celulose oxidada (OCNF) incorporadas com látex de borracha natural (LBN) e (b) fotografia digital do criogel de OCNF/LBN obtido. Curvas de cinética de adsorção de íons Cu (II) (c) e azul de metileno (AM) (d) para duas diferentes concentrações iniciais: 100 e 400 mg·L⁻¹ para o Cu (II) e 50 e 100 mg·L⁻¹ para o AM. Ensaios de ciclos de reuso dos criogéis de OCNF/LBN para íons Cu (II) (e) e azul de metileno (f).

Membranas multifuncionais de papel pirolisado para remoção de metais

Membranas de papel filtro pirolisado foram funcionalizadas com grupo funcional de cloro, através de processo de pirólise reativa com butilamina e posterior reação de síntese em balão de reação em meio de tolueno. Ao final das reações, obteve-se um papel pirolisado funcionalizado com aplicação na remoção seletiva de íons prata em solução aquosa (Figura 17). Para as caracterizações das amostras, foram utilizadas as seguintes técnicas: Microscopia Eletrônica de Varredura (SEM), Espectroscopia de Fotoelétrons Excitados por Raios-X (XPS), Microscopia Óptica e Análise Termogravimétrica (TGA). Os dados de TGA obtidos mostram uma diferença na massa final entre o papel funcionalizado e o papel sem tratamento na incorporação de prata, com o papel funcionalizado apresentando uma massa relativa final maior, indicando o sucesso na funcionalização com cloro e a subsequente precipitação de cloreto de prata (AgCl). As análises de XPS mostram percentuais mássicos semelhantes em relação aos dados de TGA, com os elementos calculados a partir do modo survey. Entretanto, é necessário a realização de caracterizações complementares (Espectroscopia Raman e ICP-OES) para identificar a natureza dos cristais observados e quantificação elementar da prata na solução. Também está previsto a funcionalização da superfície do papel com bromo e comparar a eficiência na seleção de prata em relação ao cloro. Além disso, o projeto seguirá com a elaboração de processo tecnológico para aplicações na remoção de metais em plantas de reciclagem de *e-waste*.

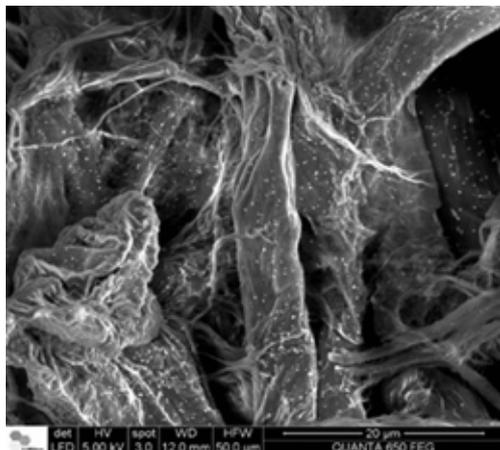


Figura 17. Imagem de microscopia eletrônica de varredura (SEM) do papel filtro pirolisado e funcionalizado com cloro após interação com nitrato de prata em solução, sendo possível visualizar as partículas de prata depositadas na superfície do material.

Subprograma Ecotoxicidade

Estudo da formação de ecocoronas e impactos na toxicidade de nanopartículas de prata sobre Daphnias

Ensaio ecotoxicológicos tradicionais ainda não estão adaptados para avaliação da toxicidade de materiais nanoestruturados e alguns problemas vem sendo observados, como por exemplo, a formação da ecocorona que não é levada em consideração nas normas técnicas como OECD, ISO e ABNT. Proteínas e outras biomoléculas podem ser liberadas pelos organismos modelos (i.e., daphnias) no meio durante o ensaio de toxicidade, além do intestino desses organismos contem proteínas e outras biomoléculas provenientes da alimentação de algas verdes (principal fonte de alimento das daphnias nos ensaios). Ambos os cenários influenciam os resultados de toxicidade das nanopartículas relatados na literatura, pois as nanopartículas podem interagir com essas biomoléculas, criando um revestimento superficial (ecocorona) que pode alterar as respostas biológicas das nanopartículas frente aos organismos. Nesse contexto, avançamos na utilização de técnicas avançadas de microscopia eletrônica de transmissão (MET) para caracterização da ecocorona na superfície de nanopartículas de prata (PVP-AgNP) após interação com proteínas extraídas de algas verdes. O uso de aberturas ao longo da coluna do microscópio proporciona um melhor contraste na imagem e conseqüentemente a visualização da fina camada de PVP sobre as nanopartículas de Ag, que apresentou espessura de ~2,5 nm.

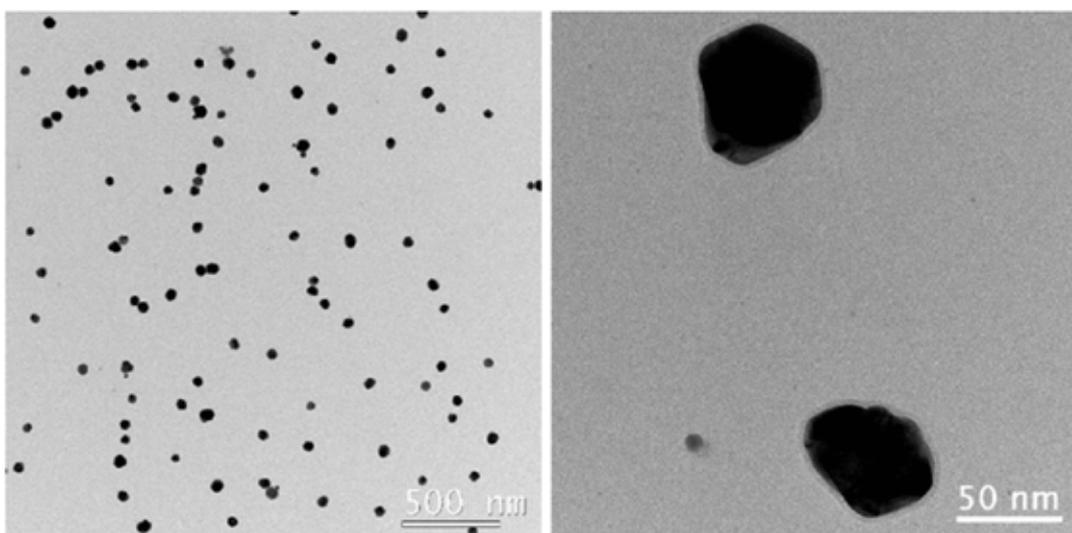


Figura 18. Imagem de microscopia eletrônica de transmissão das nanopartículas de prata (PVP-AgNP). As figuras correspondem a duas magnificações diferentes, onde é possível visualizar a camada de PVP sobre as NPs de Ag com espessura de 2,5 nm.

No entanto, devido à alta densidade de espalhamento das AgNPs, evidenciado pelo alto contraste (tonalidade escura) nas imagens acima, tal condição dificulta a visualização da corona de proteína em torno das partículas. Uma das estratégias foi em filtrar uma região do espectro que corresponde ao *Zero Loss*, com isso imagens com melhores contrastes podem ser obtidas e assim melhorar a visualização da corona de proteínas. Outra estratégia é filtrar a energia específica de um determinado elemento químico, tais como carbono e oxigênio, base da composição das proteínas que são o fundamento deste estudo.

Os ensaios de toxicidade mostraram que as nanopartículas PVP-AgNPs foram aproximadamente 6x mais tóxicas em relação a esta amostra contendo uma corona de proteína de alga na superfície (AP@PVP-AgNPs) para *Daphnia similis*. Através da técnica de microscopia hiperspectral de campo escuro (CytoViva) foi observado a ingestão das nanopartículas pelo organismo bioindicador *D. similis*, e empregando análises de ICP-MS o teor de prata na *D. similis* foi de 0,034 ($\pm 0,051$) $\mu\text{g/daphnia}$ para PVP-AgNPs, enquanto em co-exposição com proteína de alga o teor total de prata diminuiu para 0,012 ($\pm 0,019$) $\mu\text{g/daphnia}$. Portanto, apesar das daphnias estarem ingerindo o material, o acúmulo deste no organismo foi reduzido quando a partícula estava recoberta de biomoléculas. Esses resultados mostram a importância de considerar a formação da ecocorona nos estudos de toxicidade de nanopartículas devido seus impactos na modulação da ecotoxicidade e transformações destes materiais no ambiente.

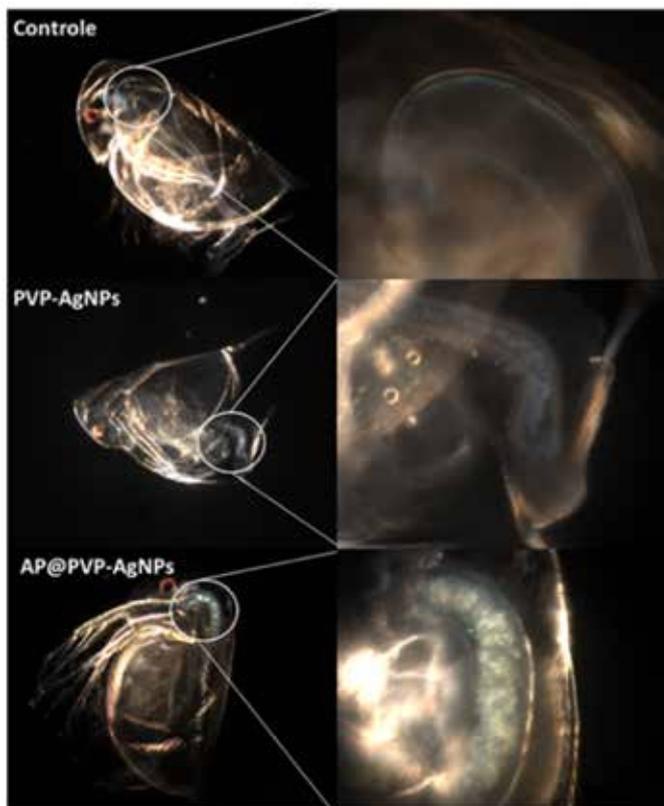


Figura 19. Imagens de microscopia hiperspectral de campo escuro (CytoViva) do microcrustáceo aquático *Daphnia similis* após interação com as nanopartículas de prata.

Programa de P&D em Tecnologias Quânticas

A produção de novos materiais e dispositivos e o entendimento aprofundado de suas propriedades quânticas tem potencial de impactar diversas áreas, como eletrônica, sensores, e computação quântica. A estratégia do CNPEM em Tecnologias Quânticas engloba duas principais iniciativas: (i) estudos em supercondutividade e (ii) desenvolvimento de dispositivos quânticos.

Subprograma em Supercondutividade

Dando continuidade ao subprograma de P&D em Supercondutividade, a Diretoria Adjunta de Tecnologia (DAT) atuou em diversas frentes de estudo e desenvolvimento de materiais supercondutores, com destaque nos avanços do projeto de um *Wavelength Shifter Supercondutor* (SWLS).

No final de 2020, o acordo de colaboração entre CNPEM e CERN (European Organization for Nuclear Research) foi firmado e, desde então, o CERN tem compartilhado conhecimento e guiado as equipes do CNPEM no desenvolvimento dos projetos. Essa colaboração tem especial contribuição no projeto do SWLS, que permitirá o desenvolvimento de um dispositivo de inserção com campo magnético superior a 6 T que atende a demanda de uma futura linha de luz do Sirius. Em 2022, o projeto conceitual e o projeto preliminar do SWLS foram finalizados e atualmente ele se encontra na fase de projeto final, em que diversos avanços foram realizados neste primeiro semestre de 2023.

Wavelength Shifter Supercondutor (SWLS)

Esse projeto exige um esforço multidisciplinar de várias áreas do CNPEM. O trabalho conjunto visa solucionar os desafios técnicos envolvidos em cada subsistema do SWLS para viabilizar a operação do dispositivo em condições mecânicas e térmicas extremas exigidas pelo supercondutor e, ao mesmo tempo, satisfazer as exigências de dinâmica do feixe do Sirius.

Neste primeiro semestre de 2023, atualmente na fase de projeto final, foi dada continuidade no desenvolvimento de todos os subsistemas, com destaque para a fabricação das primeiras bobinas de NbTi, na montagem do criostato vertical de testes e de seus subsistemas, incluindo os sistemas de automação e de proteção de *quench*, que estão servindo como protótipos para os que serão utilizados no SWLS.

Projeto Eletromagnético

Durante o semestre, foram realizadas diversas simulações e validações no projeto eletromagnético, incluindo: a implementação do modelo do SWLS no *software* Opera adquirido recentemente; a positiva comparação de resultados com o *software* Magnet; simulações transientes do *ramp-down* da corrente; a revisão de simulações dos protótipos dos conjuntos *yoke* e bobinas para o criostato de testes; a avaliação do modelo eletromagnético com furações e detalhes mecânicos; e ajuste do modelo das bobinas supercondutoras de acordo com a fabricação das bobinas. Além disso, na área de caracterização magnética, foi montado um *setup* com três sensores Hall para caracterização das bobinas no criostato vertical, e uma colaboração com o CERN foi estabelecida em que eles enviarão um *setup* contendo sensores Hall, PCB coils e sistema de aquisição de dados.

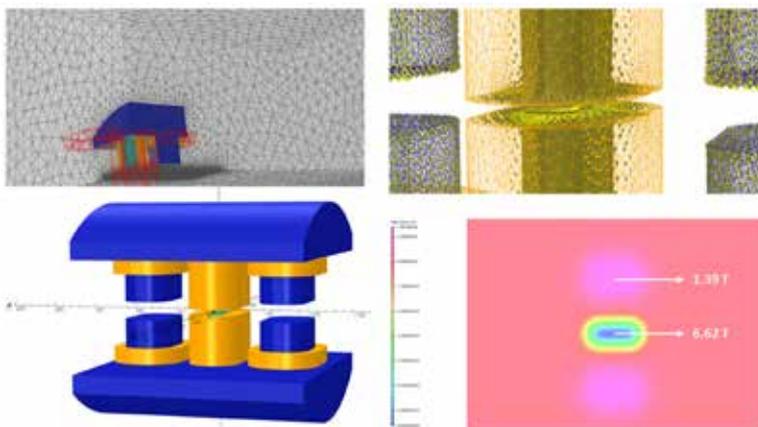


Figura 20 - Interface gráfica das simulações magnéticas do SWLS no *software* Opera.

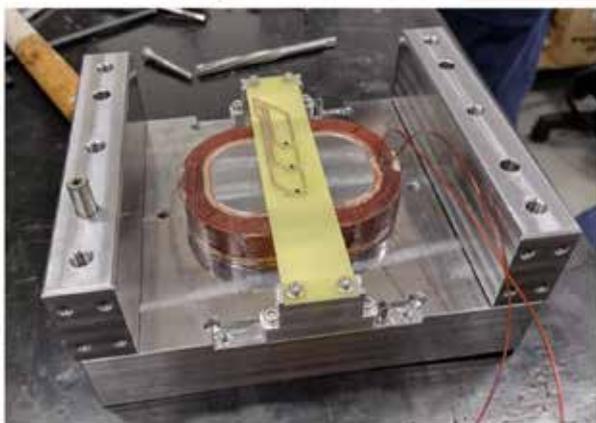


Figura 21 - Placa prototipada com sensores Hall fixada à parte inferior do protótipo do conjunto *yoke* e bobina que será testado no criostato vertical.

Projeto Mecânico

O projeto do SWLS prevê a utilização de cabos de *kevlar* para suspender a estrutura eletromagnética no criostato, minimizando a condução térmica. As bobinas supercondutoras são fixadas no *yoke* magnético com *clamps* de alumínio, cuja contração térmica proporciona rigidez mecânica e boa condução térmica para as bobinas. O sistema de vácuo para o feixe de elétrons consiste em uma câmara central de 6 mm de espessura e duas câmaras laterais, com um sistema de transição para o ambiente externo ao criostato. *Flexures* são utilizados para sustentar a câmara, permitindo contrações longitudinais e rigidez transversal.

Nestê semestre, foram também executados projetos das montagens mecânicas da estrutura eletromagnética, da suportação, do sistema de vácuo, do circuito térmico, dos dispositivos de montagem da massa fria, bem como a proposta de instalação do dispositivo dentro do anel de armazenamento do Sirius e as estruturas de suporte a outros sistemas como rack para eletrônicas, bastidores e suportes para placas de sensores. Os desenhos técnicos da maioria dos componentes foram concluídos e alguns estão em fase de fabricação. Além disso, foram realizadas compras de componentes importados, como *bellows* hidroformados e polos centrais de holmium. Revisões do projeto estão em andamento, juntamente com testes de caracterização de materiais e componentes especiais. Um *setup* para avaliação do perfil de vibração dos compressores também foi desenvolvido e as medições iniciarão em breve.

Current Leads

O conceito das *current leads* que será utilizado no SWLS segue os mesmos princípios das que foram projetadas para o criostato vertical. Desta forma, a operação das *current leads* no criostato vertical servirá como prova de conceito para o modelo final. Os resultados preliminares dos testes indicam que o componente está funcionando de acordo com o projetado.



Figura 22 - Conceito das *current leads* do SWLS instaladas no criostato vertical.

Fontes

De acordo com a decisão de projetar uma fonte para o SWLS, foram realizados testes com o conversor ressonante e medidas de *ripple*, alcançando correntes de 50 A e *ripple* RMS menor que 10 ppm. Posteriormente, foram realizados testes com 150 A na saída do conversor, no entanto, foram detectados problemas ao aumentar a tensão de entrada, que danificava os MOS-FETs devido a parâmetros parasitas causados pela montagem provisória. Esses problemas serão solucionados na próxima versão do protótipo de 300 A, que terá um novo transformador projetado internamente. O design final do conversor ressonante está em desenvolvimento, utilizando MOS-FETs de carbeto de silício e um retificador monofásico com PFC. A integração em uma única placa de circuito impresso reduzirá os parâmetros parasitas e o projeto eletrônico da parte de potência já está concluído.

Proteção de quench

No primeiro semestre de 2023, foi desenvolvido o sistema de proteção de *quench* para o criostato vertical, utilizado nos testes e caracterizações das bobinas supercondutoras, que servirá de protótipo das soluções propostas para o SWLS. O sistema inclui um circuito de detecção de *quench* com 4 canais de *voltage taps*, um circuito de extração de energia e uma solução de aquisição de sinais, integrados à fonte de corrente e automação do criostato.

Um protótipo do circuito de detecção de *quench* com 1 canal foi validado e está sendo utilizado nos testes iniciais, enquanto o circuito completo teve sua placa de circuito impressa fabricada, e a montagem e validação estão previstas para o segundo semestre. Além disso, um bastidor para o circuito de extração, com resistores *dump*, contadores de *bypass* e eletrônica de acionamento, também foi desenvolvido e testado.

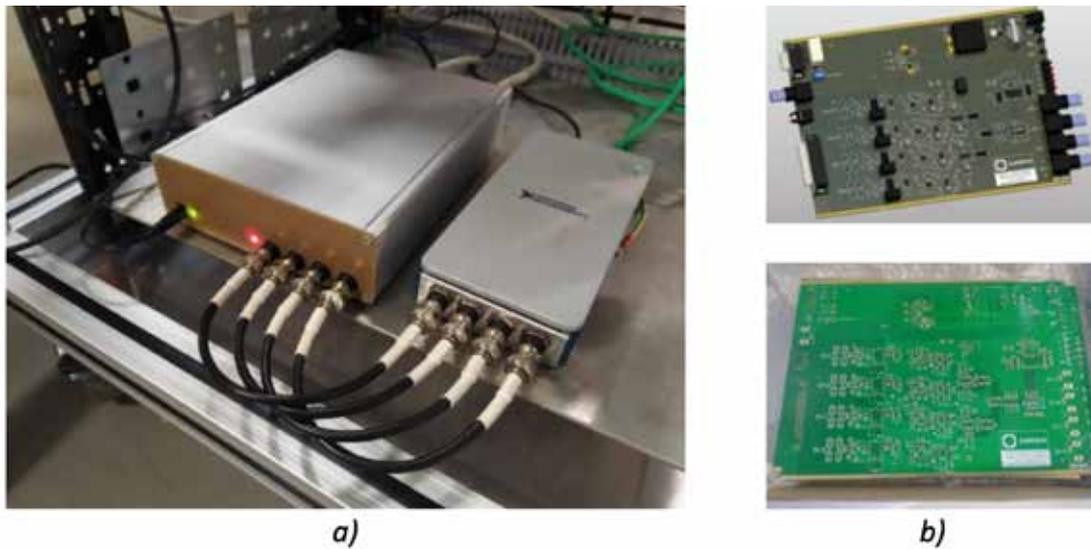


Figura 23 - Circuito de detecção de quench: a) Protótipo de 1 canal integrado com DAQ NI 9239 b) Modelo 3D do circuito completo e placa de circuito impressa fabricada.

Fabricação das Bobinas Supercondutoras

Foram desenvolvidos 6 protótipos da bobina lateral usando fio de cobre para validar, detalhar e otimizar a rota de fabricação das bobinas supercondutoras. Os protótipos seguiram o projeto da bobina lateral, prevista para ter 10 camadas com 18 espiras cada. A rota de fabricação segue o método de bobinagem camada por camada utilizando isolamento de fibra de vidro entre as camadas e o método de impregnação a vácuo com resina epóxi Araldite F. Foram feitas pequenas variações nos detalhes geométricos e nos processos de fabricação dos protótipos, visando a melhoria do processo de enrolamento dos fios, e a obtenção de bobinas com baixa taxa de porosidade (< 1%) após a impregnação, conforme mostra o gráfico da Figura 24.

O 5º e o 6º protótipo foram fabricados exatamente da mesma forma, e visto que apresentaram repetibilidade e baixa taxa de porosidade, seguiu-se com a fabricação da 1ª bobina lateral de NbTi. No entanto, o fio de NbTi apresentou maior dificuldade no posicionamento devido à sua menor conformabilidade em comparação com o fio de cobre. Dessa forma, foi fabricada uma 2ª bobina lateral de NbTi, aprimorada com perfil “ovalado” do mandril para garantir o contato adequado dos fios com o material do mandril sem comprometer a qualidade da impregnação. Além disso, o projeto mecânico das bobinas centrais já está em desenvolvimento, com conceito fundamental de impregnação da bobina diretamente no clamp de montagem final, permitindo melhor condução térmica e acomodação mecânica.



Figura 24 - Gráfico comparativo do percentual de porosidade dos protótipos de cobre da bobina lateral do SWLS.

Criostato Vertical para Testes

Durante o primeiro semestre de 2023, foi realizada a fabricação de componentes, montagem e testes do sistema, além do recebimento de itens comerciais. Dessa forma, foi feita a primeira montagem e aplicação de vácuo do sistema, que permitiu verificar o bom funcionamento das bombas, sensores de vácuo e componentes de vedação. Posteriormente, o primeiro *cooldown* foi realizado, validando os componentes responsáveis pela refrigeração e blindagem térmica (*cryo-cooler*, compressor, cobertores de MLI, escudo térmico e links térmicos). Em paralelo, avanços na instrumentação e controle foram alcançados, incluindo automação e monitoramento.

Atualmente, o criostato vertical encontra-se em operação e protótipos de bobina supercondutoras estão sendo testados. Melhorias na montagem do criostato e no sistema de automação e controle estão em andamento, bem como a fabricação do yoke para acomodação completa das bobinas supercondutoras.



Figura 25 - Criostato vertical durante montagem do teste da primeira bobina supercondutora.

Subprograma Dispositivos Quânticos

Estudo teórico-computacional da estrutura eletrônica e de transporte de novos materiais quânticos

Propriedades Vibracionais de Cadeia Lineares de Carbono

Nessa linha de pesquisa são estudadas as propriedades não-usuais das vibrações moleculares de cadeias lineares de carbono (carbina) que apresentam ligações simples e triplas alternadas. Parte deste trabalho foi desenvolvida em colaboração com grupos experimentais a fim de interpretar alguns modos de vibração nunca observados no espectro Raman deste sistema²¹. Em outro trabalho, investigou-se por teoria do funcional da densidade (DFT) os efeitos de tensão, tamanho finito e anarmonicidade quântica no espectro vibracional destes mesmos sistemas. Os resultados sugerem que os dados experimentais do espectro vibracional dessas cadeias lineares não se referem aos sistemas infinitos, mas têm forte efeitos de tamanho finito.

Conexão do efeito Hall orbital e topologia de alta ordem em monocamadas de dicalcogenetos de metais de transição

Monocamadas de dicalcogenetos de metais de transição (TMDs) na fase estrutural 2H foram recentemente classificadas como isolantes topológicos de ordem superior (HOTIs), protegidas pela simetria de rotação C3. Além disso, cálculos teóricos mostram um platô do *hall* orbital no *gap* isolante dos TMDs, caracterizado por um número de Chern orbital. Neste trabalho, foi explorada a correlação entre esses dois fenômenos em monocamadas de TMDs em duas fases

21. Moura, T. A. et al (2023). Resonance Raman spectroscopy characterization of linear carbon chains encapsulated by multi-walled carbon nanotubes. *Carbon*, 212, 118123.

estruturais: a 2H não centrossimétrica e a 1T centrossimétrica. Utilizando teoria do funcional de densidade (DFT), foram confirmadas as características dos TMDs 2H e revelado que os TMDs 1T são identificados por um invariante topológico Z_4 . Como resultado, quando cortados ao longo de direções apropriadas, eles abrigam estados de borda condutores, que atravessam os *gaps* de banda de energia do *bulk* e podem transportar momento angular orbital. Os cálculos de resposta linear indicam, portanto, que a fase HOTI é acompanhada por um efeito *Hall* orbital. Usando argumentos de simetria gerais, estabelece-se uma conexão entre os dois fenômenos com implicações potenciais para orbitrônica e *spin* orbitrônica. Este trabalho foi publicado no periódico *Physical Review Letters*²².

Adesão Superficial seletiva por Domínios em Grafenos com Poucas Camadas rotacionadas: uma plataforma para Química assistida por Moiré

Multicamadas rotacionadas de *van der Waals* são amplamente consideradas como uma plataforma rica para acessar novas fases eletrônicas devido aos múltiplos graus de liberdade disponíveis para controlar suas propriedades eletrônicas e químicas. Neste projeto foi proposto que os domínios de empilhamento que se formam naturalmente devido ao torcimento relativo entre camadas sucessivas atuam como um parâmetro adicional para controlar o comportamento desses sistemas, e relatado o surgimento e a engenharia de uma química de superfície dependente de domínios de empilhamento em grafeno com poucas camadas torcidas. Usando microscopia óptica de campo próximo de infravermelho médio e microscopia de força atômica, observou-se uma adesão seletiva de nanopartículas metálicas e água líquida nos domínios com configurações de empilhamento romboédrico de grafeno bi- e tricamadas minimamente torcidas. Além disso, foi demonstrado que a manipulação de nanopartículas localizadas em certos domínios de empilhamento pode reconfigurar localmente a superrede de moirés em sua vizinhança na escala micrométrica. Descobertas estabelecem uma nova abordagem para controlar a química assistida por moirés e a nanoengenharia. Este trabalho foi publicado no periódico *Nano Letters*²³.

Física e Química de um Moiré Unidimensional em Grafeno Bicamada Heterotensionado

O grafeno bicamada rotacionado (tBLG) emergiu como uma plataforma promissora para explorar fases eletrônicas exóticas. No entanto, a formação de padrões de moiré no tBLG tem sido até agora limitada à introdução de ângulos de torção entre as camadas. Neste projeto, foi proposto o grafeno bicamada heterotensionado (hBLG) como uma alternativa para acessar a física moiré sem ângulos de rotação por meio do desalinhamento dos parâmetros da rede cristalina. Usando cálculos atomísticos e de primeiros princípios, demonstrou-se que a heterotensão uniaxial pode promover bandas eletrônicas planas isoladas ao redor do nível de Fermi. Além disso, o relaxamento de rede fora do plano induzido pela heterotensão pode levar a uma reatividade espacialmente modulada da superfície, abrindo caminho para a química e magnetismo impulsionados por moiré. Espera-se que essas descobertas possam ser prontamente generalizadas para outros materiais em camadas. O manuscrito originado desse estudo foi submetido à publicação e está disponível abertamente no servidor arXiv²⁴.

Isoladores de Chern fracionários aprimorados por pressão em moirés de dicacogenetos de metal de transição ao longo de uma "linha mágica"

Neste trabalho foi demonstrado a pressão aplicada ao disseleneto de tungstênio (WSe₂) torcido pode aprimorar o *gap* de muitos corpos e a região de estabilidade de um isolante de Chern fracionário na ocupação eletrônica $\nu=1/3$. Os resultados são baseados na diagonalização exata de um modelo contínuo, cuja dependência da pressão é obtida por meio de métodos *ab initio*. Os resultados foram interpretados em termos de uma linha mágica no diagrama de fase pressão-ângulo de torção: ao longo da linha mágica, a largura de banda da banda de valência moiré superior é minimizada, enquanto simultaneamente sua geometria quântica se assemelha quase à de uma banda de Chern ideal. Espera-se que os resultados possam ser generalizados para outras homo-bicamadas de dicacogenetos de metal de transição torcidos. Esse manuscrito foi submetido à publicação e está disponível abertamente no servidor arXiv²⁵.

22. M. Costa, et al. (2023) Connecting Higher-Order Topology with the Orbital Hall Effect in Monolayers of Transition Metal Dichalcogenides. *Phys. Rev. Lett.* 130, 116204. 23. Valerie Hsieh et al. Domain-Dependent Surface Adhesion in Twisted Few-Layer Graphene: Platform for Moiré-Assisted Chemistry. *Nano Letters* 2023 23 (8), 3137-3143. 24. Gabriel R. Schleder, Michele Pizzochero, Efthimios Kaxiras (2023) One-Dimensional Moiré Physics and Chemistry in Heterostrained Bilayer Graphene. arXiv:2306.09799 [cond-mat.mtrl-sci]. 25. Nicolás Morales-Durán, et al. (2023) Pressure--enhanced fractional Chern insulators in moiré transition metal dichalcogenides along a magic line. arXiv:2304.06669

Supressão de substrato do processo de oxidação em monocamadas de pnictogênio

Os materiais 2D apresentam uma plataforma interessante para design de novos dispositivos. No entanto, a oxidação pode drasticamente alterar as propriedades do sistema. Através de cálculos *ab initio*, investigou-se camadas monoelementares de arsênio (As), antimônio (Sb) e bismuto (Bi) 'freestanding' e suportadas no substrato de carbeto de silício (SiC). O processo de oxidação ocorre através de uma transição de estado de *spin* do oxigênio (O₂), o estado tripleto para singleto, que foi contabilizada dentro da transição de Landau-Zener. Além disso, foram investigadas as barreiras de oxidação e o papel do acoplamento *spin*-órbita no processo de oxidação. Os cálculos apontaram que a presença do substrato de carbeto de silício (SiC) reduz a escala de tempo de oxidação em comparação com uma monocamada 'freestanding'. A barreira energética de transição do processo de oxidação, compatível com nossa análise de transição de *spin*, mostra que o processo de oxidação sempre envolve uma transição tripleto-singleto que é alterado considerando efeitos relativísticos (acoplamento *spin*-órbita). Os resultados mostram a melhora na fragilidade à oxidação nos sistemas suportados.

Grau de Liberdade no design de texturas de spin em interfaces Bi₂Se₃/CrI₃

A interrelação entre transporte de carga e *spin* vem transitando de propriedades exploradas apenas teoricamente para realização experimental. Muitos dos efeitos relevantes ocorrem através da existência de texturas de *spin* para os estados quânticos dos elétrons nos materiais. Neste trabalho é explorado, através de cálculos de primeiros princípios baseados na teoria do funcional da densidade (DFT), uma interface experimentalmente relevante que permite o controle/design da textura de *spin* em uma interface bidimensional (2D). Controlando os parâmetros de crescimento do isolante topológico Bi₂Se₃ e o eixo de magnetização do ferromagneto 2D iodeto de cromo (CrI₃), foi demonstrada a existência de uma grande variabilidade nas texturas de *spin*. Através de um modelo efetivo evidenciamos a existência em uma grande anisotropia no transporte de elétrons neste sistema, alterando a direção/existência da proteção contra retroespalhamento. Este trabalho serve como um guia para o design experimental de novos dispositivos em spintrônica.

Aprimoramento da dinâmica de conversão de carga de spin e transferência de carga em heteroestruturas de grafeno/WS₂ à temperatura ambiente

A conversão de carga em *spin* desempenha um papel fundamental na spintrônica, pois permite a geração e manipulação de correntes de *spin*. Realizar essa conversão de forma eficiente é essencial para maximizar o desempenho e a eficiência de dispositivos. Foi apresentada uma investigação da combinação de *flakes* de WS₂ com uma camada de grafeno para conversão de corrente de *spin* em corrente de carga. A corrente de *spin* pura foi produzida pela precessão de *spin* na ressonância ferromagnética acionada por micro-ondas de um filme de permalloy (Py-Ni₈₁Fe₁₉) e injetada na heteroestrutura WS₂/grafeno pelo processo de bombeamento de *spin*. A conversão de corrente de *spin* em corrente de carga que ocorre na heteroestrutura é atribuída aos efeitos Hall de *spin* inverso (ISHE) no WS₂ e o efeito Rashba-Edelstein inverso (IREE) na interface dos *flakes* de WS₂ e o filme de grafeno. Cálculos de primeiros princípios mostram que a presença de *flakes* de WS₂ melhora a eficiência de conversão de corrente através da geração de uma textura de *spin* no grafeno devido a presença do WS₂.

Unindo Borofeno e Superfícies Metálicas: Propriedades Estruturais, Eletrônicas e de Transporte de Elétrons

As interfaces sólidas compostas por materiais bidimensionais (2D) em contato com superfícies metálicas (m-surf) têm sido objeto de pesquisa, sendo as bicamadas de borofeno (BBL) consideradas proeminentes para o desenvolvimento de dispositivos eletrônicos baseados em plataformas 2D. Neste projeto foi realizado um estudo teórico das propriedades energéticas, estruturais e eletrônicas da interface BBL/m-surf, com superfícies de prata (Ag), ouro (Au) e alumínio (Al) (111), e as propriedades eletrônicas de transporte de canais de bicamadas de borofeno conectados aos contatos superiores do metal. A camada inferior se metaliza devido à hibridização orbital com os estados de superfície metálica resultando em contatos ôhmicos, enquanto as camadas de boro internas à BBL mantêm seu caráter semicondutor. As transferências líquidas de carga revelam que o BBL se tornou dopado do tipo n (tipo p) para superfícies metálicas de prata e alumínio. Uma

caracterização estrutural completa da interface BBL/m-surf, usando uma série de simulações dos espectros de fotoelétrons de raios X, mostra que a formação da interface BBL/m-surf é caracterizada por um desvio para o vermelho dos espectros B-1s. Além disso, resultados de transporte eletrônico revelaram o surgimento de uma barreira de Schottky entre 0,1 e 0,2 eV entre o contato BBL/m-surf e os canais BBL. Essas descobertas trazem contribuições importantes para a aplicabilidade de *bilayers* de borofeno no desenvolvimento de dispositivos eletrônicos 2D.

Implementação de novos métodos de crescimento de materiais quânticos e materiais 2D

Síntese por epitaxia por feixe molecular de galeneno

Cristais monoatômicos bidimensionais têm atraído interesse devido às suas propriedades não convencionais. O metaloide arsênio (As) quando se encontra na sua forma tridimensional comporta-se como um material semimetálico. Porém quando reduzido a uma única camada atômica, arseneno, pode exibir propriedades quânticas na qual a condução elétrica nas suas bordas possui polarização espontânea de *spins*²⁶. O gálio cristalino quando reduzido para monocamada, galeneno, pode exibir uma transição do regime metálico para supercondutor no qual a condução de corrente elétrica ocorre sem perdas de energia²⁷.

Contudo, a síntese de arseneno e galeneno por métodos de deposição em fase vapor ainda é um desafio. A técnica de epitaxia por feixe molecular (MBE) tem sido utilizada por pesquisadores do CNPEM para explorar o crescimento²⁸ e, com isso, construir uma plataforma para investigar novas propriedades fundamentais desses materiais. Para estudar a fase hexagonal do gálio, substrato de safira (Al₂O₃) orientado na direção (0001) tem sido utilizado. Após tratamento térmico a 1600°C, patamares atômica e planos foram obtidos. A altura dos degraus varia aproximadamente entre 3 e 6 nm que é de 2 a 5 vezes o parâmetro de rede c da safira (1,29 nm). Antes de iniciar o crescimento, a difração de elétrons de alta energia por incidência rasante (RHEED) mostra um padrão de listras característico de uma superfície plana com degraus. Após a deposição, o padrão muda mostrando que houve a deposição de gálio.

Para caracterizar eletricamente a amostra e obter a densidade de portadores, mobilidade e resistividade, contatos elétricos na geometria barra Hall são desenvolvidos por processo de litografia (micro fabricação). Espera-se que a utilização da barra Hall permita a medição mais precisa do transporte de carga em função do campo magnético e que fenômenos como as oscilações quânticas na magnetoresistência sejam observadas.

Crescimento de Fase Pt₂ZnSe₃ – Isolante Topológica

A síntese de materiais com estrutura tipo jacutingaíta está em fase de estudos por diferentes rotas de síntese. Utilizando processos de síntese em alta pressão ou sistemas abertos levaram a perda da estequiometria do composto formando majoritariamente a fase do calcogeneto metálico disseleneto de platina (PtSe₂). Desta forma, a inserção do átomo mercúrio (Hg) ou zinco (Zn) na estrutura Pt₂MSe₃ ainda não foi obtida. Diante dos resultados, no primeiro semestre de 2023 houve uma adequação de um novo espaço físico destinado a síntese de materiais em fase sólida em sistemas fechados de ampola de quartzo. A selagem de ampolas de quartzo sob vácuo está em fase de comissionamento. Para o próximo semestre, espera-se um melhor controle estequiométrico para a obtenção da fase tipo jacutingaíta Pt₂HgSe₃. Os resultados de síntese dos calcogenetos metálicos levaram a produção de um manuscrito sobre o estudo da formação de nanopartículas de disseleneto de platina (selenização), onde estas foram aplicadas em sistemas eletroquímicos para a evolução de hidrogênio. Estes nanomateriais também foram estudados para obtenção de fase Pt₂Se₃ (deselenização) que seria um precursor da estrutura jacutingaíta (Pt₂MX₃). Foi observado a perda da estequiometria formando nanomateriais PtSex na presença de temperaturas entre 250 °C e 400 °C. Acima de 400 °C há um processo de deselenização total da amostra restando apenas a fase metálica de Pt. Diante dos resultados uma nova linha de estudos para a obtenção da estrutura jacutingaíta será abordada no segundo semestre utilizando tratamentos térmicos no PtSe₂ em atmosfera de mercúrio (Hg), onde espera-se que a saída do Se ocorra durante o processo de inserção dos átomos de Hg.

26. Kamal, C., & Ezawa, M. (2015). Arsenene: Two-dimensional buckled and puckered honeycomb arsenic systems. *Physical Review B*, 91(8), 085423. 27. Zhang, H. M. et al. (2015). Detection of a superconducting phase in a two-atom layer of hexagonal Ga film grown on semiconducting GaN (0001). *Physical review letters*, 114(10), 107003. 28. Badalov, S. V. et al. (2018). Enhanced stability of single-layer w-gallenene through hydrogenation. *The Journal of Physical Chemistry C*, 122(49), 28302-28309.

Medidas de transporte eletrônico em materiais quânticos

Transporte elétrico em junções PN em heteroestruturas de van der Waals de grafeno e nitreto de boro hexagonal

Utilizando técnicas de micro e nanofabricação, foram fabricados moduladores de grafeno (SLG) do tipo junção PN em substratos de nitreto de boro hexagonal (hBN) 2D. As heteroestruturas de SLG/hBN foram preparadas sobre eletrodos metálicos inferiores que atuam como “split-gates” independentes, permitindo a modulação de carga no grafeno individualmente através das tensões de porta VG1 e VG2, consequentemente permite a criação de junções do PP, NP, PN ou NN no canal de grafeno. As curvas de transferências demonstram que o valor máximo de resistência é ~2900 Ohm para VG1=5,5V e VG2=6.5V, localizando assim o ponto de neutralidade de carga do canal de grafeno. Os nanodispositivos de SLG/hBN foram caracterizados por “scattering-scanning near-field optical microscope” (SNOM), “Kelvin probe force microscopy” (KPFM) por pesquisadores do CNPEM e do “Free Electron Laser” (FEL) de Dresden (Alemanha), que demonstraram um comportamento optoeletrônico anômalo da condutividade óptica grafeno na região (1.5 – 6 THz) do THz²⁹.

Micro e nanofabricação de dispositivos baseados em materiais quânticos

Fabricação e Caracterização de heteroestruturas de van Waals baseados em materiais 2D

Materiais 2D são altamente sensíveis ao meio externo, logo estes elementos influenciam diretamente as propriedades eletrônicas (ópticas e elétricas) medidas nos dispositivos confeccionados utilizando estes 2D como material ativo. Portanto, em muitos casos se faz necessário a combinação de materiais 2D ativos (condutores ou semicondutores) com 2D passivos (isolantes), possibilitando a melhora na qualidade eletrônica dos nanodispositivos fabricados. Este tipo de combinação de materiais 2D é obtido artificialmente quando se empilha manualmente e verticalmente diferentes 2Ds, confeccionando às chamadas de heteroestruturas de *van der Waals*. As heteroestruturas ultrafinas foram fabricadas combinando diferentes classes de materiais 2Ds (isolantes, condutores e semicondutores), visando distintas análises optoeletrônicas. Estas heteroestruturas 2D foram inicialmente caracterizadas por microscopia de força atômica, espectroscopia Raman e de fotoluminescência e no segundo semestre serão apresentados os resultados elétricos e optoeletrônicos.

Programa de Ciência com Luz Síncrotron

A investigação da matéria utilizando a luz síncrotron tem aplicação em áreas cruciais como saúde, energia, informação, meio ambiente e agricultura, permitindo testar hipóteses sobre mecanismos microscópicos e impulsionando a invenção de tecnologias e a expansão do conhecimento científico. O programa de luz síncrotron, considerado uma "ciência e tecnologia habilitadora das ciências finalísticas", evolui continuamente através dos projetos científicos e tecnológicos, fornecendo perspectivas, pensamentos, linguagens e conceitos compartilhados entre áreas. Este programa forma uma camada de conhecimento na interface entre técnicas experimentais e a solução de problemas em áreas finalísticas, com o objetivo de expandir as fronteiras do conhecimento, fornecendo à comunidade que utiliza o Sirius o melhor feixe de elétrons, aliado aos melhores instrumentos e técnicas de luz síncrotron para resolver problemas estratégicos.

A seguir serão apresentados alguns destaques na ciência com luz síncrotron. Neste programa, o principal objeto de investigação é o reflexo de fenômenos microscópicos da matéria na luz síncrotron e como isso pode ser utilizado para desenvolver métodos e protocolos capazes de testar hipóteses mecanísticas microscópicas da matéria.

29. Feres, F. H. et al. (2023). Graphene Nano-Optics in the Terahertz Gap. Nano letters, 23(9), 3913-3920.

Organização química e estrutural

Perovskitas de haletos metálicos de largura de banda grande são materiais relevantes como camada fotoativa em células solares tandem. Para aumentar largura de banda da perovskita é necessário um alto conteúdo de bromo. Entretanto, a adição de bromo geralmente leva a formação de uma perovskita mais rica em defeitos, com heterogeneidades na distribuição de haletos e foto-instabilidade, levando a uma menor eficiência da célula solar. Nesse estudo realizado na linha de luz CARNAÚBA, foi investigado o impacto positivo da adição de cloreto de metilamônio (MACl) no mecanismo de formação e nas propriedades dessas perovskitas juntamente com a variação da quantidade de bromo, empregando técnicas avançadas de radiação síncrotron. Os resultados desta pesquisa foram submetidos para o periódico *Advanced Functional Materials*.

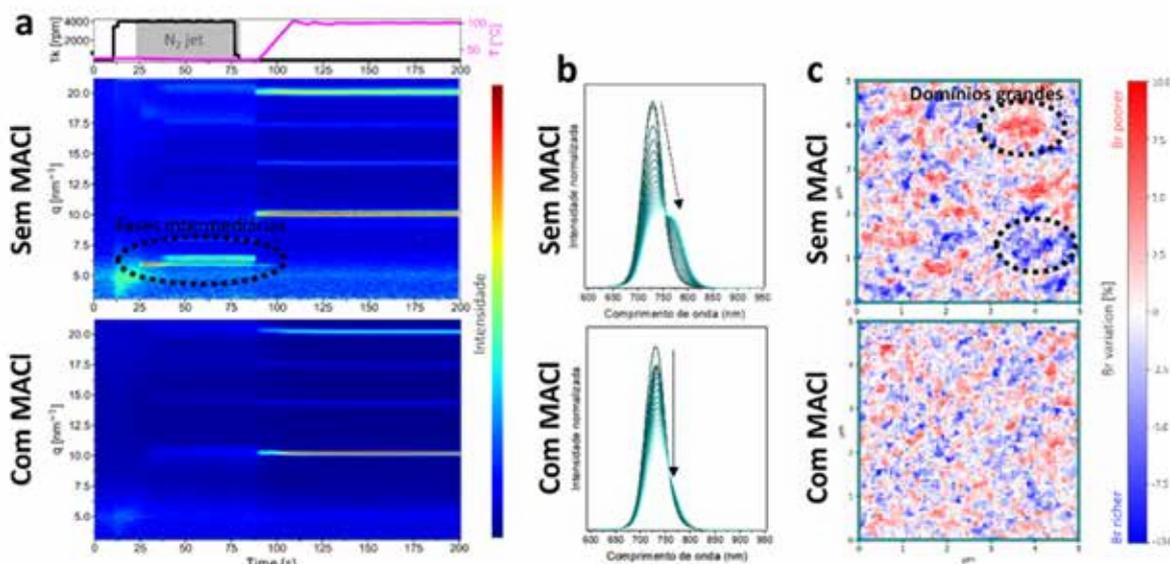


Figura 26: Efeito da adição de MACl na formação e propriedades da perovskita CsFAPb(Br,I)3: a) Mapas de intensidade de GIWAXS in situ; b) Espectros de fotoluminescência durante a iluminação contínua por 15 min; c) Variação de bromo obtida pela razão entre as emissões de Br e Pb do mapeamento por nano-XRF na linha CARNAÚBA.

Dinâmica de redox

A modificação de metais nobres por átomos em eletrocatalise é utilizada para estudar diversas reações relacionadas a questões energéticas. Nesse contexto, os elementos do bloco p como o bismuto, têm sido usados para impactar a atividade e seletividade das superfícies de Pt e Pd para a oxidação de várias pequenas moléculas orgânicas, pois a adsorção desses átomos modifica a estrutura eletrônica da superfície e evita o envenenamento do catalizador. Graças a uma célula eletroquímica especialmente desenhada para a linha CARNAÚBA, foram estudados eletrodos de carbono vítreo (GC) modificados com nanopartículas de Pt (NPs) com e sem átomos de bismuto (Bi) na solução. O estudo foi submetido para publicação no periódico *Analytical Chemistry*.

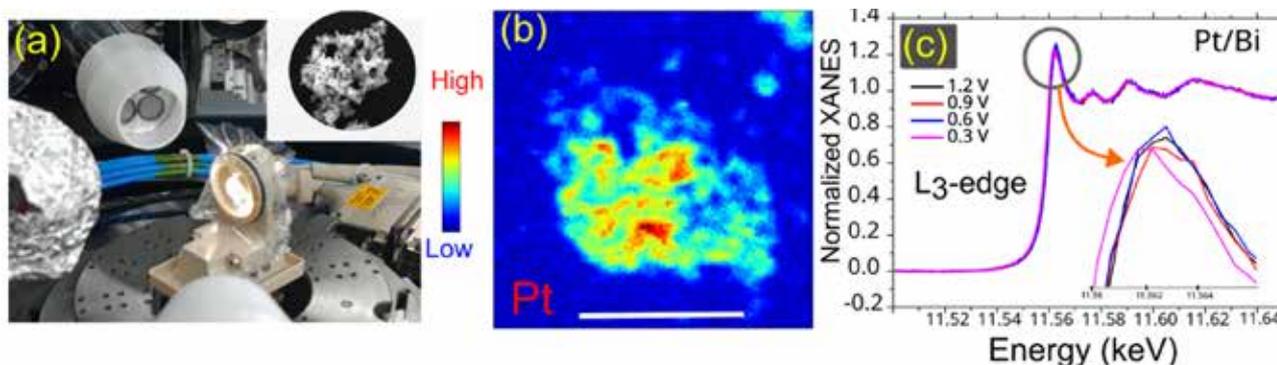


Figura 27: Célula eletroquímica para experimentos in situ (a) Célula miniaturizada montada na estação TARUMÃ (b) Mapa XRF obtido no aglomerado de NPs Pt (inserção em a). (c) XANES sobre a borda Pt L3 de 0,3 a 1,2 V. A barra de escala corresponde a 25 µm.

Interações nano-bio

Neste trabalho o foco foi desenvolver protocolos que sejam capazes de analisar possíveis alterações estruturais das proteínas quando adsorvem em nanopartículas. Visando essa problemática, foram utilizadas duas linhas de luz do Sirius para os experimentos. Inicialmente, medidas de espectroscopia de dicroísmo circular (CD) na linha de luz CEDRO foram realizadas permitindo visualizar e quantificar o conteúdo da estrutura secundária de proteínas em termos de α -hélice, folhas β e estrutura desordenada (Figura 28a). Uma vez que as mudanças sutis foram notadas nos experimentos realizados na CEDRO, investigações mais minuciosas dessas sutis alterações foram realizadas utilizando a microscopia óptica de varredura em campo próximo (s-SNON) disponível na IMBUIA-Nano. Essa técnica nos permitiu combinar o potencial da microscopia de força atômica com a espectroscopia do infravermelho e discriminar estados da proteína albumina humana (Figura 28b e 28c).

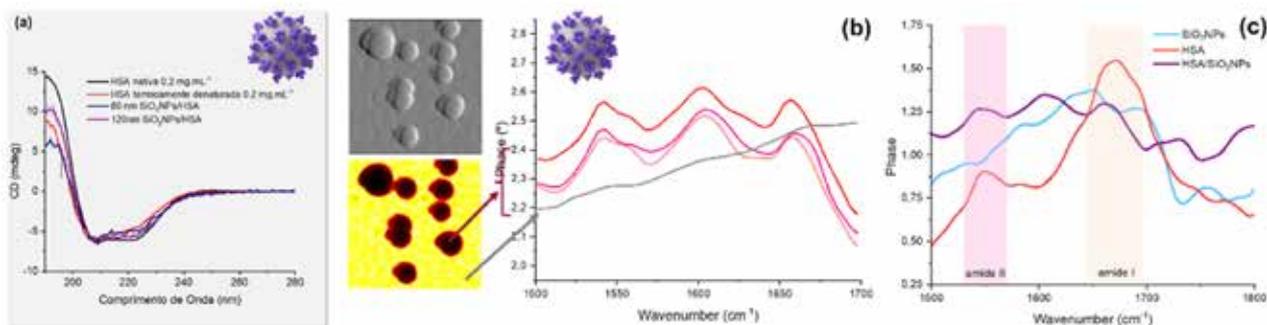


Figura 28: a) Espectros de dicroísmo circular para albumina humana em diferentes condições. b) e c) Imagens e seus espectros pontuais ao lado. Sobreposição dos espectros pontuais para nanopartículas, complexo nanopartícula-proteína e para um filme de HSA depositado no substrato de ouro destacando a região da amida I e amida II (c).

Fenômenos em escala de poro

Este estudo na linha MOGNO é voltado à compreensão da doença conhecida no Brasil como amarelinho ou clorose variegada dos citros (CVC), causada pela bactéria *Xylella fastidiosa*, que coloniza o xilema de espécies vegetais cítricas e adoce a planta. Essa doença atua obstruindo os vasos responsáveis pelo transporte de água e nutrientes a partir da raiz. Por conta disso, as plantas afetadas pela bactéria acabam produzindo frutos significativamente menores e com menor qualidade. As imagens tomográficas obtidas na linha Mogno ajudarão na compreensão de como a estrutura interna do xilema em diferentes espécies resistentes ou suscetíveis afeta a propagação da doença, fornecendo informações essenciais para seu combate.

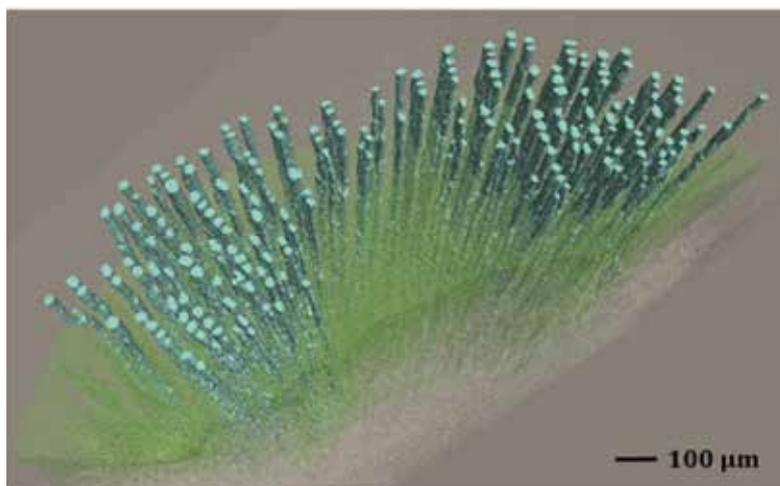


Figura 29: Pesquisadora montando porta amostra na estação da linha MOGNO (esquerda); Reconstrução da estrutura interna do xilema na planta *Xylella fastidiosa* (direita).

Condições extremas

A competição entre magnetismo e supercondutividade é um tema central nas pesquisas em matéria condensada. Compostos que apresentam baixa dimensionalidade e frustração magnética são de particular interesse devido ao aumento de flutuações quânticas, que podem servir como um mecanismo facilitador para o aparecimento de supercondutividade. Em uma colaboração entre CNPEM e o Instituto Max Planck de Dresden foram estudados os efeitos da pressão no ordenamento estrutural e magnético do composto de LuFe_4Ge_2 . Este material apresenta uma transição estrutural da fase tetragonal para uma fase ortorrômbica em 35 K e na fase ortorrômbica apresenta um ordenamento antiferromagnético. Através de experimentos de difração de raio X como função da pressão e da temperatura, realizados no LNLS, observou-se que a pressão tem efeito distinto nas transições estruturais e magnética. Enquanto a transição estrutural, é praticamente insensível a pressão (Figura 30), o ordenamento antiferromagnético é suprimido para pressões maiores do que 1.8 GPa³⁰.

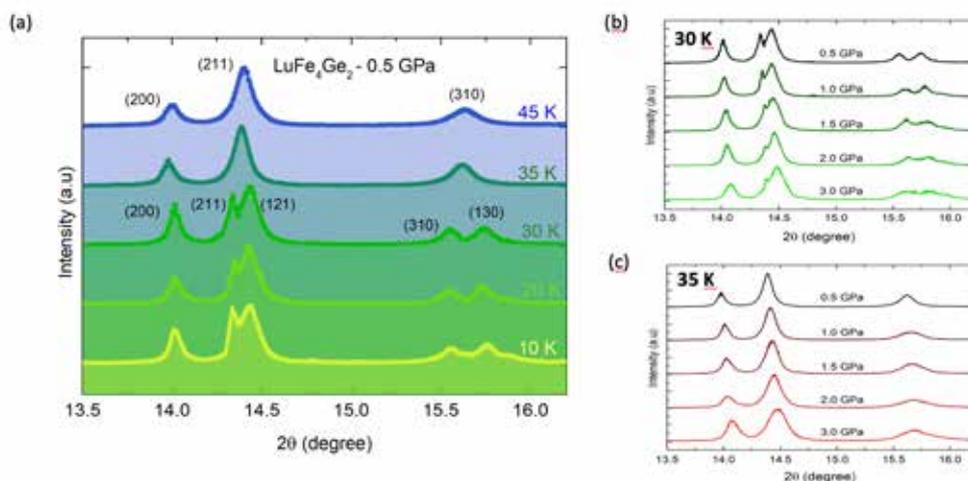


Figura 30: (a) Difractogramas da amostra de LuFe_4Ge_2 em 0.5 GPa para diferentes temperaturas, evidenciando a transição estrutural ente 35 K e 30 K. Difractogramas em 30 K (b) e 35 K (c) para pressões de ate 3 GPa evidenciando que a estrutura da amostra não é alterada neste range de pressão

Excitações quânticas

Em pesquisa sobre a nano-óptica do grafeno em THz foram utilizados ferramentais científicos sofisticados, especificamente, um microscópio óptico de campo próximo de varredura por espalhamento (*scattering-scanning optical near-field microscope, s-SNOM*) iluminado por radiação THz sintonizável para investigar a resposta óptica de campo próximo do grafeno dentro da lacuna THz (1,5 - 6,0 THz). Primeiramente, foi demonstrado que o grafeno apresenta resposta óptica metálica próxima a 2 THz, ou seja, próximo a sua frequência de relaxação de carga que reflete a radiação eletromagnética semelhantemente ao que se fazem os metais nobres. Em segundo lugar, demonstrou-se que o grafeno apresenta um efeito de aumento de campo óptico (*field enhancement effect, FEE*) em 3,8 THz que leva a melhorias significativas de contraste e nitidez das imagens ópticas de campo próximo. Por meio de análises teóricas baseadas na relação de dispersão frequência-momento e modelagem de campo próximo, verificou-se que a FEE é atribuída a uma ressonância plasmônica de grafeno entre 3,0 e 6,0 THz. Baseado nestas observações experimentais, foi possível discutir teoricamente a sintonia da FEE com a dopagem elétrica do grafeno. Esses resultados revelaram novas propriedades da nano-óptica de grafeno na lacuna THz abrindo novas oportunidades para futuras pesquisas e aplicações tecnológicas no tema.

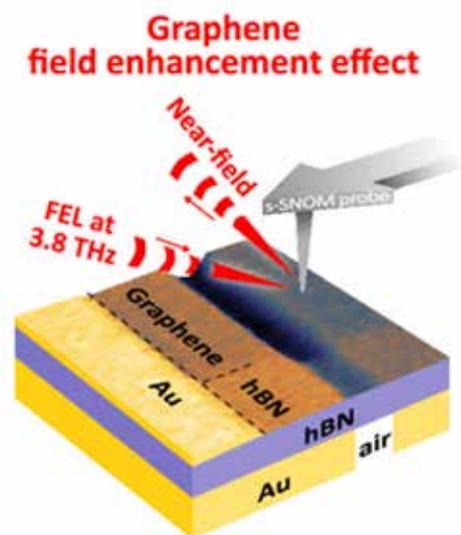
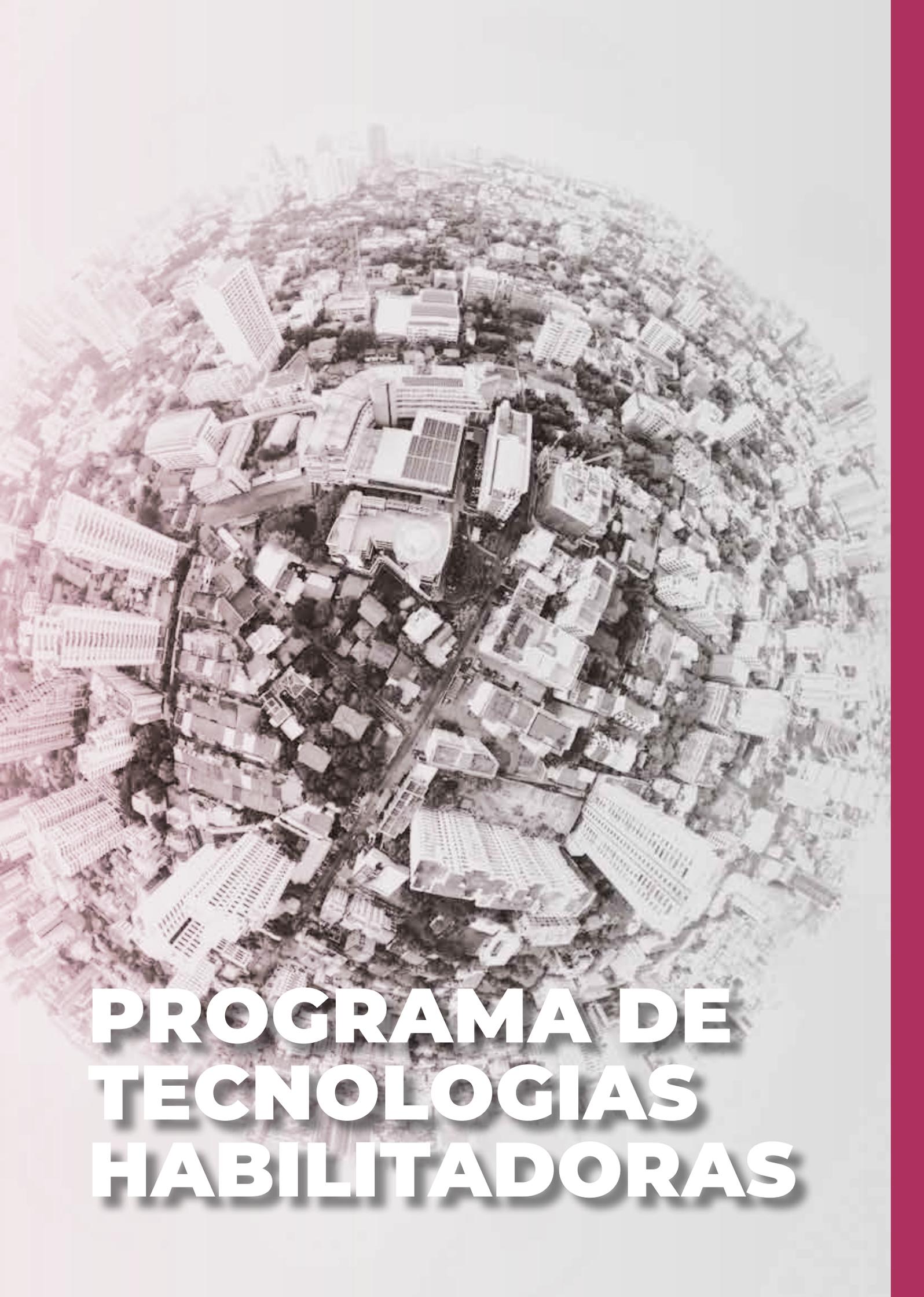


Figura 31: Imagem demonstrando que o grafeno apresenta um efeito de aumento de campo óptico (*field enhancement effect, FEE*) em 3,8 THz que leva a melhorias significativas de contraste e nitidez das imagens ópticas de campo próximo.

30. Ajeesh, M. O. et al. (2023) Interplay of structure and magnetism in LuFe_4Ge_2 tuned by hydrostatic pressure. *Physical Review B*, v. 107, n. 12, 125136.





PROGRAMA DE TECNOLOGIAS HABILITADORAS

Neste capítulo estão descritos os resultados do Programa de Tecnologias Habilitadoras, que abrangem a consolidação e expansão de núcleos importantes de competências, capazes de garantir singularidade na contínua busca da compreensão aprofundada e integrada das propriedades e dos mecanismos de interação da matéria *in situ*, *in vivo* e *in operando* e em diversas escalas de tamanho. Tais competências podem ser agrupadas em três grandes blocos: métodos e técnicas voltadas para a síntese e modificação da matéria; elucidação da organização e estrutura da matéria e; conversão, funcionalização e aplicação no desenvolvimento de tecnologias e produtos de valor agregado.



Subprograma de desenvolvimento de metodologias e instrumentação

Microscopia Eletrônica

Nesse semestre foi implementada a Themis Titan da técnica 4D-STEM através da instalação de uma câmera e *software* específico. Essa técnica é considerada a vanguarda da caracterização por imagem de uma amostra utilizando a microscopia eletrônica. Basicamente, consiste na obtenção de uma imagem especial (2D) de uma região da amostra, na qual cada *pixel* contém uma imagem (2D) do espelhamento total daquela região. Após processamento esta imagem pode fornecer informações estruturais tais como, tensão, defeitos, estrutura atômica, magnética, elétricas etc. com alta resolução e alta relação sinal/ruído. Além disso, foi feita uma reforma na sala de usuários para adequações técnicas e arquitetônicas. O número de computadores para processamento de dados pelos usuários passou de três para nove, sendo que três deles são de alta performance para processar imagens de 4D-STEM e tomografia. Além disso, *softwares* pagos foram adquiridos, com destaque para o JEMS, que simula imagens em modo TEM e STEM, e o TEM-DEM para processamento de imagens espectroscópica utilizando análises multiestatísticas. Por fim, o programa de apoio a usuários externos do estado de São Paulo está totalmente operacional, em que são financiadas as viagens e estadia dos usuários de fora do estado.

Criomicroscopia

O Laboratório de Criomicroscopia Eletrônica desenvolve pesquisas na área de metodologias para a aquisição e processamento de dados, visando o avanço da técnica de criomicroscopia para a análise estrutural de macromoléculas. Além disso, também opera uma instalação aberta de criomicroscopia eletrônica de transmissão, disponível para a comunidade científica brasileira e da América Latina. Sendo assim, o laboratório atua de forma sinérgica, fazendo com que os avanços obtidos no desenvolvimento de metodologias viabilizem a introdução de novas áreas da criomicroscopia. Um dos projetos, desenvolvido em conjunto com o Laboratório de Microfabricação e Microfluídica, visa a obtenção de um dispositivo microfluídico, para o preparo de amostras para criomicroscopia eletrônica resolvida no tempo. Essa técnica é capaz de revelar estados intermediários em reações envolvendo complexos macromoleculares. Inicialmente, os dispositivos foram planejados baseados em arquiteturas disponíveis na literatura. Após testes preliminares, verificou-se a necessidade de modificações na arquitetura do misturador, para torná-lo mais eficiente (Figura 32). Estas alterações estão em fase de implantação.

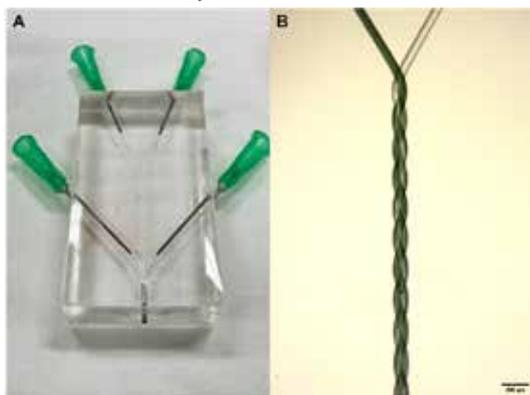


Figura 32. Dispositivo microfluídico. (A) Visão geral do dispositivo produzido e (B) imagem ampliada do início do canal de mistura do dispositivo. A imagem (B) mostra uma gradual homogeneidade colorimétrica de duas soluções, que possuem diferentes tonalidades de cinza.

O laboratório também está implantando a técnica de criotomografia de elétrons. Foi iniciado o comissionamento técnico e foram realizados experimentos com o vírus Mayaro (MAYV) e o protozoário *T. cruzi*, em parceria com CENABIO/UFRJ, utilizando os microscópios Talos Arctica e Titan Krios, respectivamente (Figura 33). Para o preparo dessas grades foram produzidos fiduciais no laboratório, através do recobrimento de nanopartículas de ouro de 5 nm de diâmetro com BSA. A implementação dessa técnica permitirá o estudo de estruturas celulares, como organelas, além de permitir avançar na implantação da técnica de análise de subtomogramas, para amostras selecionadas, como o MAYV.

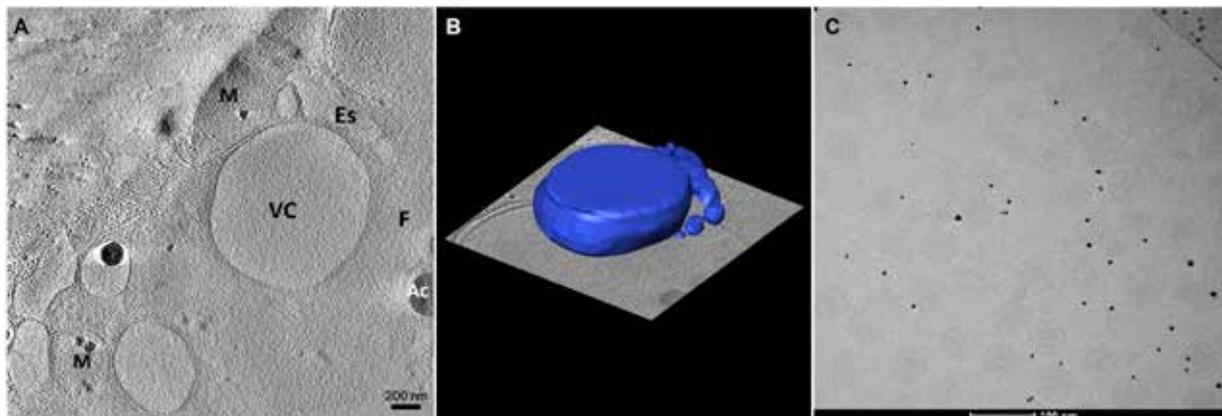


Figura 33. (A e B) Criotomografia de célula inteira de *Trypanosoma cruzi*. (A) Corte virtual do criotomograma da mostrando o complexo do vacúolo contrátil – formado pelo vacúolo central (VC) e espongioma (Es), áreas da mitocôndria (M) e acidocalcisomos (Ac) na região anterior da célula. (B) Modelo 3D gerado a partir da reconstrução celular por criotomografia (C) Imagens de coleta de dados de tomografia do vírus Mayaro (MAYV) com marcadores fiduciais.

Além disso, está em andamento o desenvolvimento de uma plataforma de imageamento do efeito de materiais nanométricos em modelos biológicos. Esses ensaios visam reproduzir o efeito de potenciais poluentes e contaminantes originários de materiais nanotecnológicos. As análises permitem a visualização, por imagens de microscopia eletrônica, dos resultados obtidos nesses sistemas biológicos, dos ensaios de toxicidade. Para o desenvolvimento dos ensaios, as amostras foram expostas a nanopartículas de prata, emblocadas em resina epóxi, e cortadas com 70 nm de espessura, sendo em seguida analisadas no microscópio eletrônico de transmissão (Figura 34).

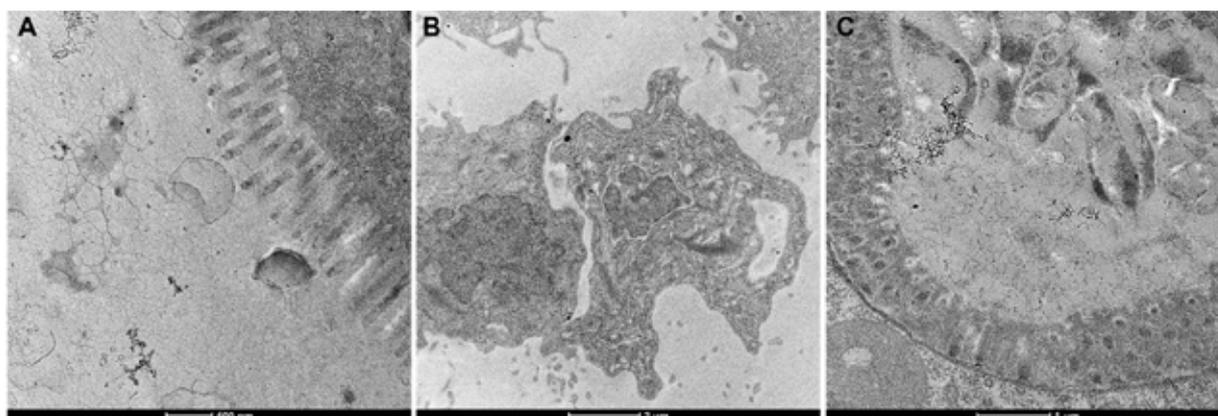


Figura 34. Análise ultra estrutural de modelos biológicos expostos a nanopartículas por microscopia eletrônica de transmissão. (A) *Daphnia* sp. exposta a íon prata (Ag⁺). (B) ZFL exposta a óxido de grafeno decorado com nanopartícula de prata. (C) *C. elegans* co-exposto a nanopartículas com íon de prata.

Micro e Nanofabricação

Neste relatório estão descritos os avanços em duas frentes para o desenvolvimento e aprimoramento de processos de micro e nanofabricação. Estes desenvolvimentos são fundamentais para garantir o avanço da pesquisa científica nas áreas nas quais a micro e nanofabricação desempenham papel central, como tecnologias quânticas, dispositivos para a saúde (diagnóstico), e sensores para o meio ambiente.

Nanofabricação via litografia por feixe de elétrons e deposição de filmes metálicos

Utilizando o sistema de litografia por feixe de elétrons (eLINE Plus/Raith), a equipe da Divisão de Dispositivos realizou o treinamento de colaboradores externos na operação do equipamento; a execução de propostas internas e externas; o aprimoramento dos processos de micro e nanofabricação utilizando processos de alinhamento e reexposição da resina em materiais quânticos (heteroestrutura 2D de grafeno e nitreto de boro hexagonal), bem como utilização de dupla camada de resina para facilitar os processos de deposição e remoção de filmes metálicos. A Figura 35a mostra imagens de microscopia óptica de uma junção do tipo “split-gate” fabricados em uma heteroestrutura 2D de grafeno e nitreto de boro hexagonal³¹. A equipe também desenvolveu escritas de nanolitografia utilizando um software de correção de efeitos de proximidade, o que garante a litografia correta de objetos de dimensões reduzidas (<500 nm) e periódicos, formando matrizes complexas de objetos. A Figura 35b ilustra diferentes estruturas geométricas após a correção do efeito de proximidade. Nestas figuras se observa uma distribuição de dose (degrade de cores: do verde – menor dose – ao vermelho – maior dose) que varia com a posição do pixel de escrita (menor área definida pelo usuário no software) em relação ao padrão global. Já as Figura 35c-d apresentam imagens de microscopia eletrônica de varredura de dois padrões que foram processados por litografia eletrônica, seguido por técnicas de deposição de filmes metálicos e *lift-off*.

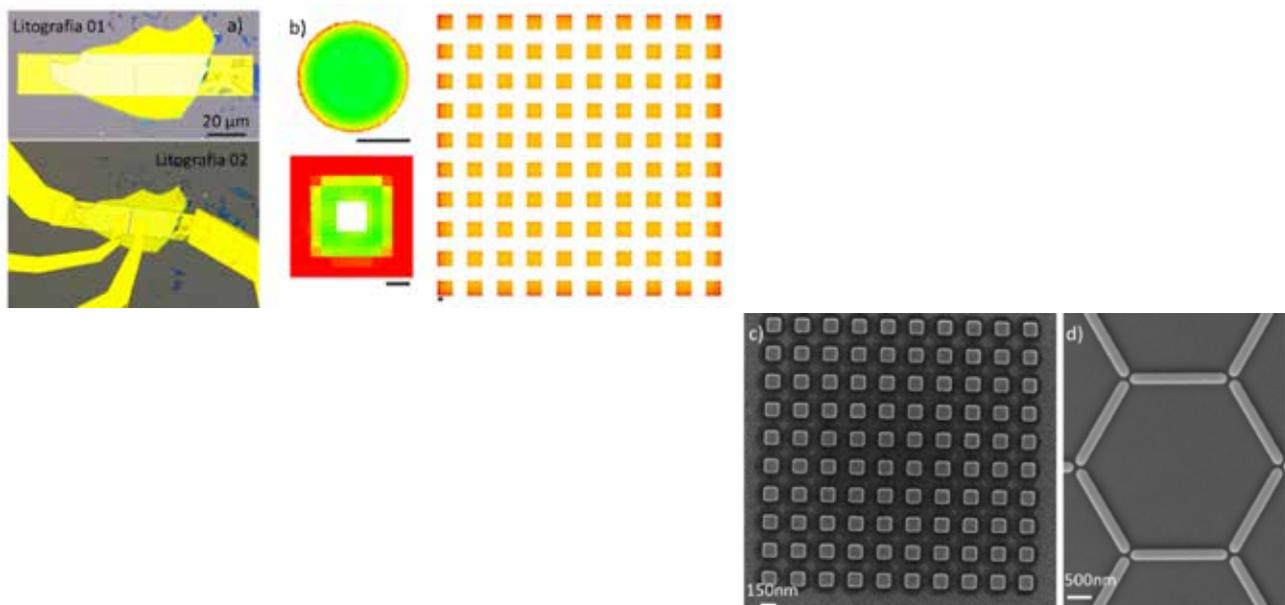


Figura 35. a) Litografia em múltiplos níveis de alinhamento. Litografia 01 define a região dos eletrodos inferiores antes da transferência do grafeno/nitreto de boro hexagonal, enquanto litografia 02 defini os eletrodos superiores definidos na região da heteroestrutura 2D. Após cada escrita, os dispositivos seguem para as etapas de metalização de filmes de Cr/Au e lift-off. b) Planejamento e correção dos efeitos de proximidade no software da Raith para diferentes formas geométricas e matriz de elementos. A barra de escala nas figuras representa 50 nm. c-d) Imagens de microscopia eletrônica de varredura de nanoestruturas produzidas via litografia eletrônica e técnicas de metalização e lift-off no LNNano.

Ion Beam Milling (IBM)

O controle dos processos de *Ion Beam Milling* (IBM) é fundamental para a fabricação de dispositivos para diferentes aplicações, como por exemplo, dispositivos para tecnologias quânticas, sensores e biossensores. No sistema de IBM os principais parâmetros ajustáveis em um processo são: fluxo de gás Ar, potencial elétrico aplicado ao feixe, aceleração dos íons de Ar, corrente do feixe e ângulo de inclinação da superfície do material com a direção de incidência do feixe de Ar. As atividades práticas no sistema de IBM foram desenvolvidas para a verificação da seletividade de alguns processos com relação ao fotoresiste AZ5214E e os substratos mais comuns aos diferentes processos realizados nas instalações da Divisão de Dispositivos. Foram escolhidos os substratos mais comuns utilizados em processos de micro e nanofabricação de dispositivos, abrangendo também os substratos utilizados no crescimento de filmes finos através da epitaxia de feixe moleculares (MBE).

31. Feres, F. H. et al. (2023). Graphene Nano-Optics in the Terahertz Gap. Nano letters, 23(9), 3913-3920.

Subprograma de Teoria e Ciência de Dados

Modelagem da Reação de Evolução de Hidrogênio em MoS2 Amorfo

Neste trabalho, em colaboração com pesquisadores experimentais da área de Energias Renováveis, foram estudados modelos microscópicos baseados na teoria do funcional da densidade (DFT) para explicar o aumento na atividade catalítica para produção de hidrogênio em estruturas amorfas de dissulfeto de molibdênio (MoS₂). Os sistemas amorfos são fabricados a partir do impacto de feixes de elétrons em amostras pristinas de MoS₂ e observa-se uma melhoria contínua da atividade catalítica para geração de hidrogênio à medida em que o sistema se amorfiza. Na modelagem teórica, as estruturas amorfas foram construídas utilizando relaxação estrutural e dinâmica molecular de primeiros princípios a partir da geração de vacâncias em posições aleatórias no sistema. A partir daí, as entalpias de adsorção de hidrogênio em diversos sítios não-equivalentes associados a defeitos não estequiométricos de enxofre são investigados. Observa-se que o número de sítios catalíticos favoráveis (aqueles que têm entalpia de adsorção próxima a zero) aumenta substancialmente à medida que a estrutura se torna amorfa, explicando desta forma os resultados observados experimentalmente. Este trabalho foi submetido para publicação.

Análise por Machine Learning da Interação entre Lignina e Celulose Obtida a partir de Medidas de AFM

Neste trabalho, realizado em colaboração com pesquisadores experimentais do Subprograma de Funcionalização de Biopolímeros, teve como objetivo entender as interações entre lignina e celulose ao nível microscópico. Foram realizados experimentos em microscópio de força atômica (AFM) sobre as superfícies de celulose com pontas cobertas por lignina. A análise posterior por métodos de *machine learning* possibilitou a identificação de diversos tipos de interações (desde repulsivas até atrativas em diversos graus) que foram associadas às diferentes facetas da celulose. Também foram utilizadas simulações de dinâmica molecular clássica para entender e reproduzir os resultados experimentais. Os resultados serão publicados em breve na *Nanoscale*.

Desenvolvimento de novos algoritmos para aprendizado de máquina, classificação e predição de propriedades de materiais de interesse do CNPEM

Existem diversos modelos preditivos de propriedades de materiais utilizando técnicas de aprendizado de máquina. Uma característica usual destes modelos é que são especialistas, ou seja, cada modelo é capaz de prever apenas uma propriedade ou característica dos materiais. Neste trabalho, foi desenvolvida uma rede neural artificial multitarefa capaz de prever diversas propriedades dos materiais ao mesmo tempo. A estratégia foi induzir um modelo preditivo que recebe de entrada características físico-químicas dos materiais e busca entender as correlações entre as diferentes propriedades de saída. A expectativa é que o modelo, ao entender o comportamento de uma propriedade, irá prever com mais precisão outra propriedade correlacionada. Esta rede está sendo treinada e otimizada em um banco de dados de materiais vítreos contendo mais de duzentas mil composições e mais de 80 propriedades diferentes.

Aprendizado de Máquina dos Ingredientes Microscópicos da Interação Óxido de Grafeno-Celulose

Compreender o papel das características microscópicas em nanocompósitos permite guiar o controle e, portanto, acelerar o desenvolvimento de sistemas experimentais. Neste trabalho, utilizou-se uma nova abordagem para avaliar os parâmetros químico e estruturalmente relevantes que governam a força de ligação entre óxido-de-grafeno e nanocelulose. Combinando cálculos de primeiros princípios e algoritmos de aprendizado de máquinas baseado em regressão simbólica, foi simulado e extraído os principais componentes estruturais governando a ligação entre os compostos. Aqui, em vez de estudar defeitos únicos, considerou-se a complexidade da superfície do óxido-de-grafeno simulando um modelo químico preciso em grandes supercélulas, com diferentes grupos oxigenados, e concentrações de oxigênio. Foram identificados dois regimes de interação dependentes apenas da composição do óxido-de-grafeno, que se mostraram extraídos inteiramente a partir de espectroscopia de fotoelétrons de raios-X (XPS). Isso permitiu entender o papel das características microscópicas na determinação da escala de força de interação entre os compostos e guiar futuros experimentos para o controle racional da interface óxido-de-grafeno/celulose.

Revisão de técnicas de inteligência artificial na área de micro- e nano-tomografia computadorizada de raios-X resolvida no tempo: Aplicações em biomateriais, capacidades de síncrotron e processamento baseado em ciência de dados

A microtomografia computadorizada de raios-X (μ CT) é uma técnica inovadora e versátil, não destrutiva, que tem sido amplamente utilizada para investigar biosistemas em diversas áreas de aplicação. O progresso emergente nesse campo trouxe inúmeros estudos utilizando caracterização por μ CT, revelando estruturas tridimensionais (3D) de materiais e quantificando características como defeitos, poros, fases secundárias, dispersões de cargas e interfaces internas. Recentemente, linhas de feixe de tomografia computadorizada de raios-X (CT) acopladas a fontes de luz de síncrotron também permitiram a nanotomografia computadorizada (nCT) e a caracterização quatro-dimensional (4D), permitindo a caracterização *in situ*, *in vivo* e *in operando* da microestrutura à nanoestrutura. Esse aumento na resolução temporal e espacial produz dados a serem processados, incluindo processamento em tempo real, para fornecer *feedback* durante os experimentos. Para superar esse problema, técnicas de aprendizado profundo surgiram como uma ferramenta poderosa que permite a automação do processamento de grandes quantidades de dados, aproveitando ao máximo as capacidades da linha de feixe. Nesse contexto, foi publicado um artigo de revisão que destaca aplicações, capacidades de síncrotron e processamento baseado em dados, com foco na urgência de combinar ferramentas computacionais com dados experimentais. O trabalho foi publicado no periódico *Nano Letters*³².

Processamento de imagens para reconstrução tridimensional da proteína nucleocapsídeo do SARS-CoV-2

A proteína nucleocapsídeo (N) do vírus SARS-CoV-2, agente causal da COVID-19, é uma fosfoproteína multifuncional que desempenha papéis críticos no ciclo de vida do vírus, incluindo a transcrição e empacotamento do RNA viral. Para desempenhar esses papéis diversos, a proteína N possui dois módulos globulares de ligação ao RNA, os domínios N-terminal (NTD) e C-terminal (CTD), que são conectados por uma região intrinsecamente desordenada. Apesar da abundância de dados estruturais disponíveis para o NTD e CTD isolados, ainda não está claro como esses domínios estão arrançados na proteína de comprimento total e como a oligomerização da N influencia sua atividade de ligação ao RNA. Neste trabalho, utilizando dados experimentais de microscopia eletrônica e técnicas bioquímicas/biofísicas combinadas com modelagem molecular e simulações de dinâmica molecular, mostrou-se que, na ausência de RNA, a proteína N formou dímeros estruturalmente dinâmicos, com o NTD e CTD dispostos em conformações estendidas. No entanto, na presença de RNA, a proteína N assumiu uma conformação mais compacta em que o NTD e CTD estão embalados juntos. Também foi estabelecido um modelo octamérico para a N de comprimento total ligada ao RNA que é consistente com imagens de microscopia eletrônica da proteína N na presença de RNA. Juntos, estes resultados lançam nova luz sobre a dinâmica e a estrutura oligomérica de ordem superior dessa proteína versátil.

Análise de dados preditiva de Biossensor Eletroquímico Modular com Peptídeo Inspirado na Natureza para Uso Generalizado em Testes de Anticorpos COVID-19

Limitações dos elementos de reconhecimento em termos de síntese, custo, disponibilidade e estabilidade têm prejudicado a aplicação prática de biossensores. Inspirados pela natureza para imitar o reconhecimento molecular do anticorpo (AbS) anti-SARS-CoV-2 da proteína S pelo sítio de ligação da proteína S, neste trabalho foi sintetizada a sequência peptídica Asn-Asn-Ala-Thr-Asn-COOH (PEP2003) para criar biossensores label-free (LF) para triagem de COVID-19 baseados em um eletrodo de carbono, nanopartículas de ouro (AuNPs) e espectroscopia de impedância eletroquímica. O PEP2003 é facilmente obtido por síntese química e pode ser adsorvido em eletrodos mantendo sua capacidade de reconhecimento do anticorpo AbS, resultando em uma sensibilidade 3,4 vezes maior do que a da proteína S completa, o que está de acordo com o aumento da razão de tamanho alvo-receptor. Dispositivos LF carregados com peptídeo foram desenvolvidos por imobilização não covalente, proporcionando análises rápidas e simples, juntamente com uma funcionalização modular. Estudos de acoplamento molecular mostraram que a ligação peptídeo-AbS ocorre por meio de ligações de hidrogênio e interações hidrofóbicas. Além

32. Pedro I. C. Claro, et al. (2023) From micro- to nano- and time-resolved x-ray computed tomography: Bio-based applications, synchrotron capabilities, and data-driven processing. *Applied Physics Reviews* 10, 021302.

disso, o peptídeo não é suscetível à desnaturação, abordando a relação entre escalabilidade, custo e robustez. O biossensor mantém 95,1% do sinal inicial por 20 dias quando armazenado seco a 4 °C. O método foi capaz de realizar a triagem de COVID-19 de 39 amostras biológicas em grupos saudáveis e infectados com 100,0% de precisão. Aproveitando as vantagens relacionadas ao peptídeo combinadas com avanços na química de superfície e precisão auxiliada por ML, essa plataforma promete trazer os biossensores COVID-19 para uso generalizado, possibilitando análises diretas, rápidas e precisas no ponto de atendimento, com impactos sociais e econômicos significativos.

Expansão linear de Jacobi-Legendre da densidade de carga para cálculos de estrutura eletrônica acelerada por aprendizado de máquina

A teoria do Funcional da Densidade (DFT) é um método poderoso para obter as principais propriedades dos materiais, mas a solução iterativa das equações Kohn-Sham é uma tarefa numericamente intensiva, o que limita sua aplicação a sistemas complexos. Para resolver esse problema, os modelos de aprendizado de máquina (ML) podem ser usados como substitutos para encontrar a densidade de carga do estado fundamental e reduzir as sobrecargas computacionais. Foi desenvolvida uma representação estrutural centrada na grade, baseada nos polinômios de Jacobi e Legendre combinados com regressão linear, para aprender com precisão a densidade de carga DFT convergente. Isso se integra a um pipeline de ML que pode retornar qualquer observável dependente de densidade, incluindo energia e forças, com a qualidade de um cálculo DFT convergente, mas com uma fração do custo computacional. A varredura rápida de paisagens de energia e a produção de densidades iniciais para o ciclo autoconsistente DFT estão entre as aplicações deste esquema.

Subprograma de Biologia Computacional

Predição estrutural de macromoléculas e desenvolvimento de algoritmos em Biologia Computacional

No primeiro semestre de 2023, o Laboratório de Biologia Computacional desenvolveu e disponibilizou para toda comunidade científica o KVFinder-web, uma nova ferramenta para estudo de sítios de ligação em biomoléculas. O KVFinder-web (Figura 36) é uma aplicação web baseada na ferramenta parKVFinder (v1.2.0), composta por um serviço web RESTful para detecção e caracterização de cavidades, juntamente com um portal web gráfico. O objetivo ao desenvolver esse aplicativo é democratizar e expandir ainda mais a base de usuários do parKVFinder na comunidade de biologia estrutural. A aplicação está disponível em <https://kvfinder-web.cnpem.br> e foi publicada na revista *Nucleic Acids Research*³³.

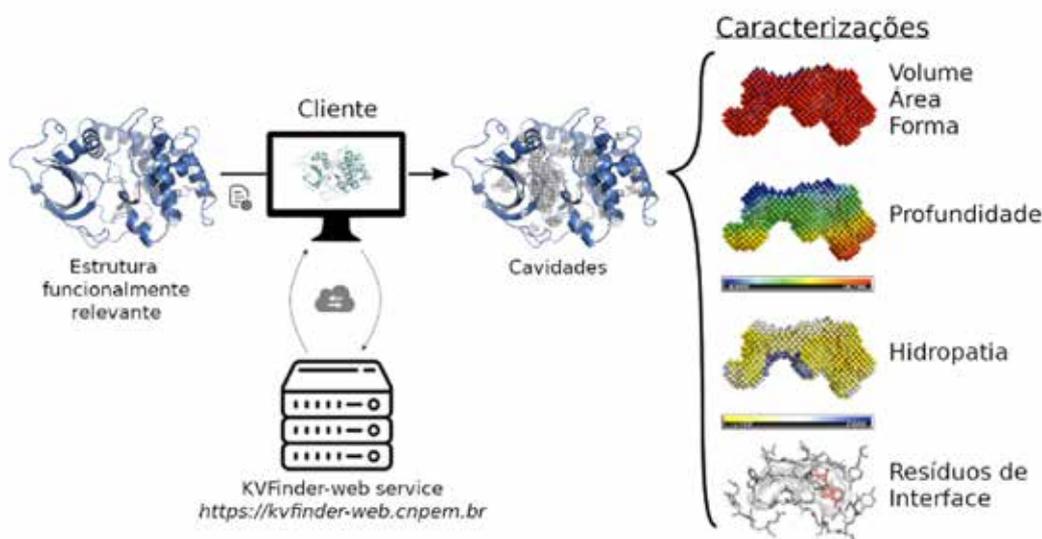


Figura 36. Esquema representativo do funcionamento do KVFinder-web para detectar e caracterizar cavidades em estruturas funcionalmente relevantes.

33. Guerra, J.V. et al. (2023) KVFinder-web: a web-based application for detecting and characterizing biomolecular cavities. *Nucleic Acids Research*, <https://doi.org/10.1093/nar/gkad324>

Ainda no contexto de detecção de cavidades, o Laboratório de Biologia Computacional, em colaboração com o Dr. György Szalóki (Laboratoire Hétérochimie Fondamentale et Appliquée – Université Toulouse III Paul Sabatier – FR), expandiu o escopo do KVFinder para uma nova classe de moléculas, denominadas gaiolas supramoleculares, e o comparou com o estado da arte. Essas gaiolas são moléculas interconectadas que se unem de maneira não-covalente, formando uma cavidade interna capaz de encapsular moléculas ou íons. A forma e o tamanho da cavidade são parâmetros importantes que podem ser facilmente determinados por algoritmos geométricos, auxiliando no desenho racional de gaiolas supramoleculares. Neste contexto, foi avaliado o estado da arte dos diferentes métodos disponíveis para detectar e descrever cavidades, aplicáveis em gaiolas supramoleculares. Nossos resultados demonstram que as ferramentas do KVFinder suite são as mais acuradas dentre os 7 métodos computacionais comparados para caracterização de cavidades em gaiolas supramoleculares. Este estudo foi publicado na revista *Journal of Chemical Information and Modeling*³⁴ e foi escolhido para compor a capa da edição (Figura 37).



Figura 37. Cavity Characterization in Supramolecular Cages: A powerful technique in the toolbox of rational cage design. Cover page J. Chem. Inf. Model. 2023, <https://doi.org/10.1021/acs.jcim.3c00328>

Dada a importância estratégica da aplicação de métodos computacionais para planejamento e entendimento da resposta imunológica no contexto do Programa de P&D em Saúde, nesse semestre o Laboratório de Biologia Computacional estreitou uma colaboração internacional com o grupo do Dr. Brian Pierce (*Institute for Bioscience and Biotechnology Research – University of Maryland – US*), referência na área de imunoinformática, através do Pós-doutorado de um dos pesquisadores do grupo. Nesse estágio no exterior, o pesquisador executou um projeto que envolve a aplicação de inteligência artificial no contexto de modelos de linguagem para o planejamento de receptores de células T (TCR) que possam ser utilizados como imunoterapia para o câncer e doenças virais. Ainda nesse estágio, o pesquisador colaborou no desenvolvimento de um método baseado em modificações do AlphaFold2 para modelagem da interação entre TCR e peptídeos apresentados pelo complexo de histocompatibilidade maior (MHC) (Figura 38). Esse método, que gera impacto direto na área de planejamento computacional de TCRs e no entendimento do reconhecimento imune, está disponível como uma aplicação web em <https://tcrmodel.ibbr.umd.edu/> e o estudo foi publicado na revista *Nucleic Acids Research*³⁵.

34. Guerra, J. V. S. et al. (2023) Cavity Characterization in Supramolecular Cages. *J. Chem. Inf. Model.* <https://doi.org/10.1021/acs.jcim.3c00328>. 35. Yin, R. et al. (2023). TCRmodel2: high-resolution modeling of T cell receptor recognition using deep learning. *Nucleic Acids Research*, gkad356, <https://doi.org/10.1093/nar/gkad356>

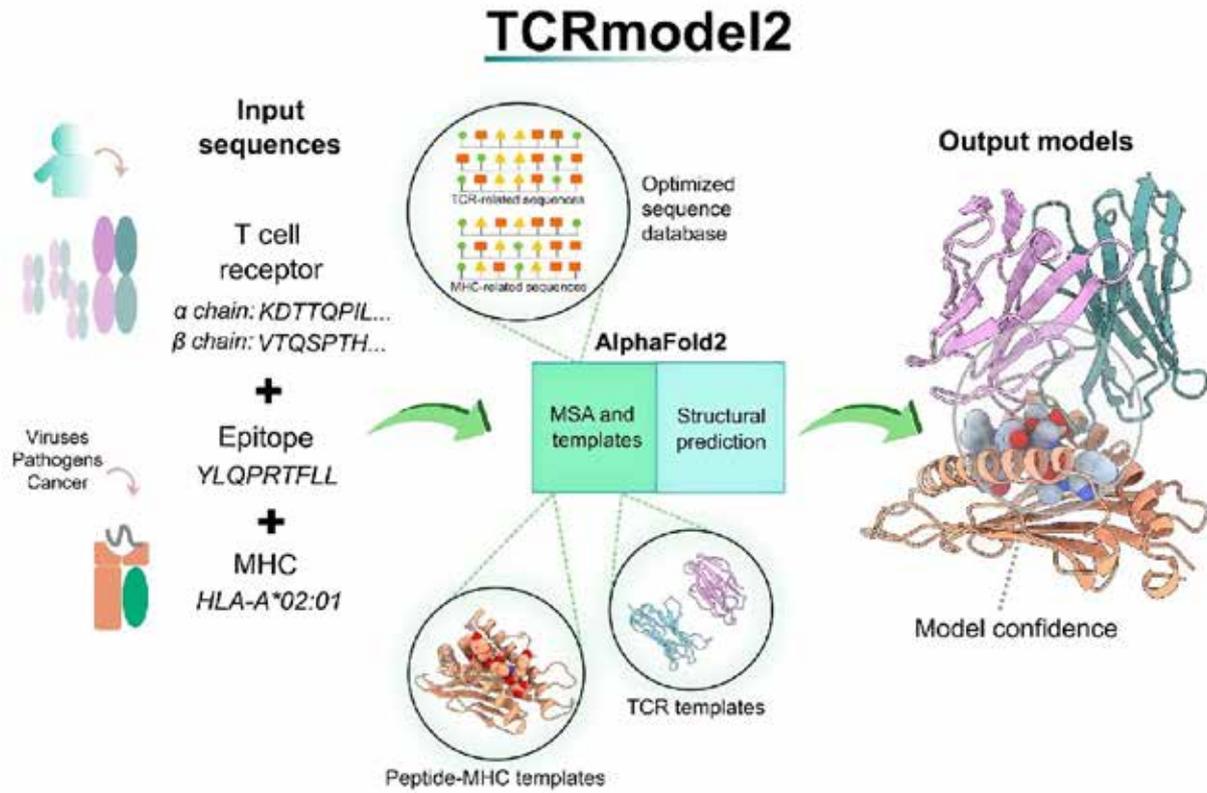
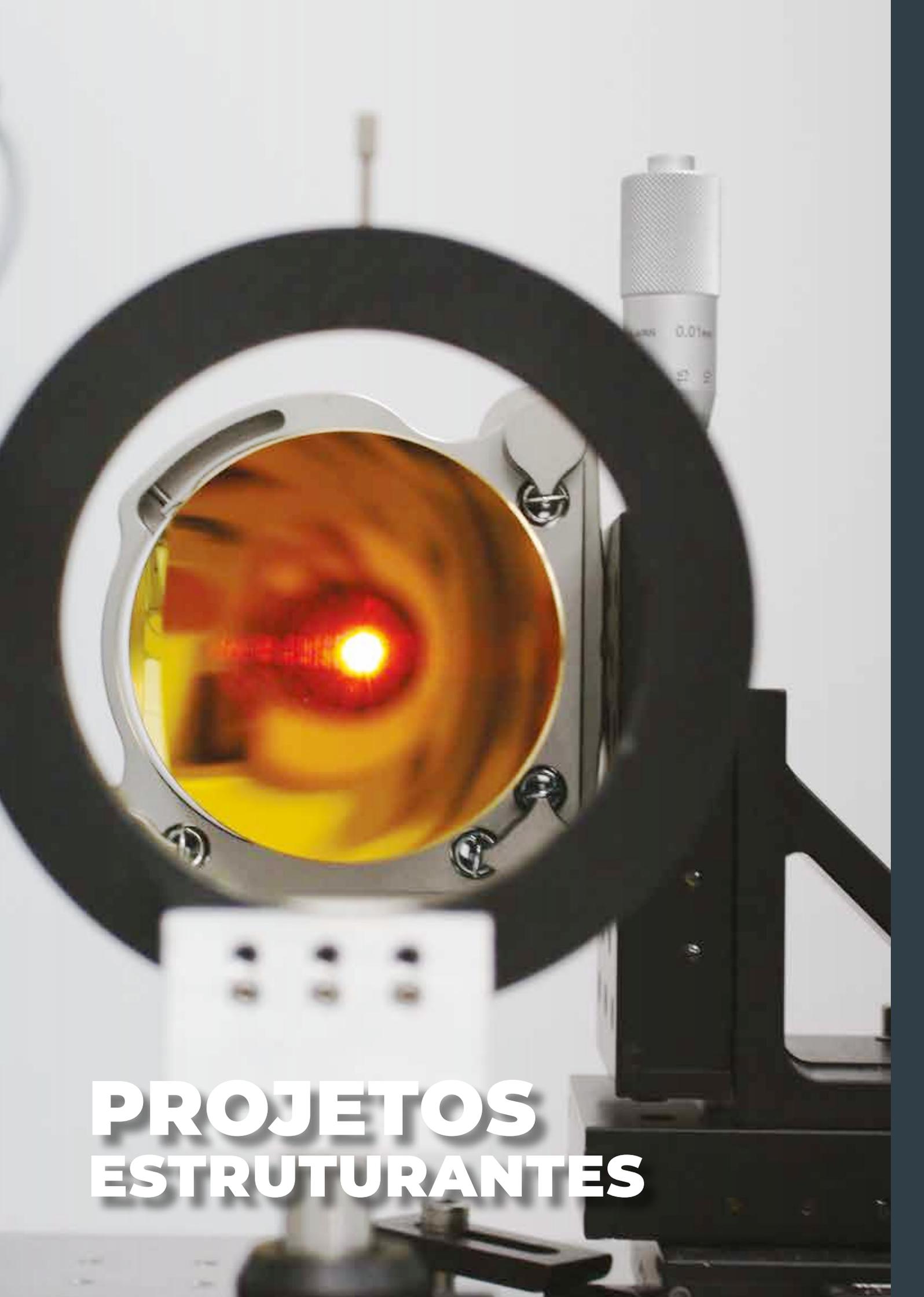


Figura 38. Esquema representativo do método TCRmodel2. A partir de sequências da cadeia α e β do TCR, e das sequências do peptídeo e do MHC, o método prediz a estrutura 3D desse complexo. O método se baseia em modificações no primeiro bloco do AlphaFold2 que envolve construção de alinhamentos múltiplos e seleção de template.





PROJETOS ESTRUTURANTES

Neste capítulo estão descritas as atividades realizadas nos Projetos Estruturantes do CNPEM, os quais envolvem a implantação de infraestruturas de pesquisa que servirão de forma transversal aos quatro eixos de atuação do Centro. Estes projetos exigem um amplo esforço de P&D interna para a criação de soluções aos desafios relacionados à construção de infraestruturas de pesquisa de alta complexidade.

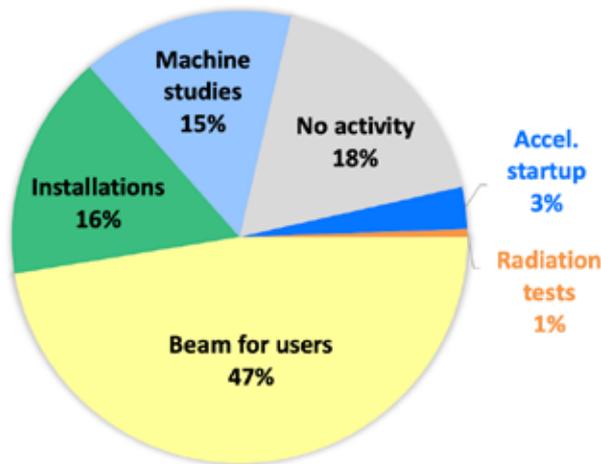


Projeto Sirius

Aceleradores

No primeiro semestre de 2023, os aceleradores do Sirius operaram regularmente seguindo agenda previamente programada, com fornecimento de luz síncrotron para experimentos nas linhas de luz e estudos de máquina. A Figura 39 mostra que houve um aumento de tempo de feixe alocado para experimentos nas linhas de luz em relação ao ano anterior. O tempo destinado aos estudos de máquina foi mantido praticamente o mesmo, refletindo que ainda há necessidade de tempo para atividades relacionadas ao aprimoramento da confiabilidade e estabilidade dos aceleradores. O Sirius está operando em um regime de 24/6, resultando em uma fração não desprezível de turnos sem atividade programada, que corresponde principalmente aos domingos.

SIRIUS - DISTRIBUTION OF SHIFT HOURS IN 2023



Shift hours	2023	2022
Beam for users	4152	3360
Installations	1416	1968
Machine studies	1320	1296
No activity	1560	1608
Accel. startup	264	480
Radiation tests	48	48

Figura 39: Distribuição de horas alocadas aos diferentes turnos de operação durante o ano de 2023.

As estatísticas de confiabilidade da fonte de luz para o primeiro semestre de 2023, definida como o tempo de feixe para linhas de luz entregue dentro do horário programado, foi de 94%, o tempo médio entre as falhas (MTBF) foi de cerca de 34.4 horas e o tempo médio de recuperação (MTTR), de cerca de 1.9 horas. Esses dados estão mostrados mês a mês na Figura 40, e os números integrados do primeiro semestre são mostrados na Tabela 2.

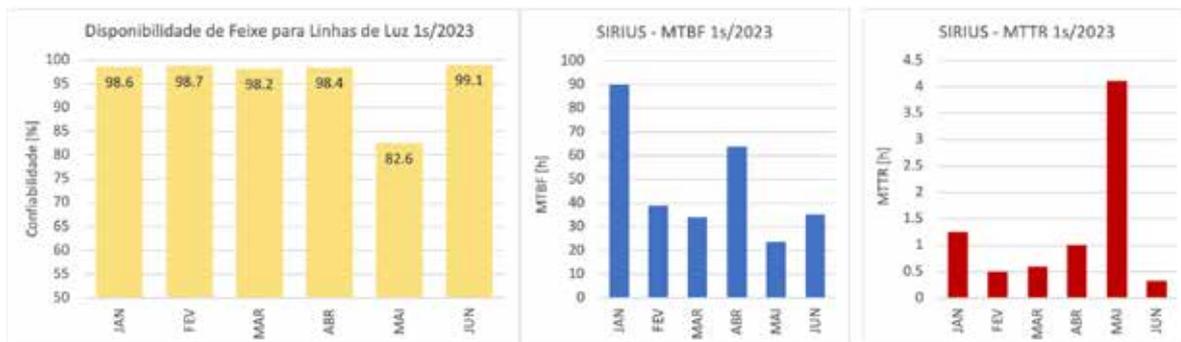


Figura 40: Disponibilidade de feixe para as linhas, tempo médio entre falhas (MTBF) e tempo médio para recuperação de falhas (MTTR) no primeiro semestre de 2023. Obs. Os dados do mês de junho/2023 estão compilados até o dia 25.

Horas programadas de feixe para linhas	1721 h
Horas entregues dentro do horário programado	1624.3 h
Total de horas entregues	1677.2 h
Confiabilidade	94.4 %
Tempo médio entre falhas (MTBF)	34.4 h
Tempo médio para recuperação (MTTR)	1.9 h

Tabela 2: Estatísticas de operação para o 1º semestre de 2023.

Projeto e operação das plantas de RF para a operação com as cavidades supercondutoras

Sistema de Vácuo

No primeiro semestre de 2023 foram finalizados os projetos detalhados para os *bellows* e transições a serem instaladas no trecho reto do Setor 3, local do acelerador principal do Sirius que receberá as cavidades supercondutoras.

A matéria prima para a usinagem das peças foi adquirida e entregue ao CNPEM. Construiu-se um protótipo para o *bellows* e um protótipo para a transição visando a avaliação dos processos de fabricação e precisão dimensional do conjunto. Ambos os protótipos atingiram adequado nível de desempenho de ultra-alto vácuo e os projetos estão aprovados para a fabricação final.

Protótipo do Ondulador DU525 para a Linha de Luz Sabiá

Caracterização e Estrutura Magnética

No primeiro semestre de 2023 houve diversos avanços na estrutura magnética, assim como na caracterização e ajustes no perfil de campo do ondulador. Um dos pontos fundamentais foi a mudança dos parafusos de fixação dos blocos magnéticos, que originalmente eram de alumínio e foram substituídos por parafusos de aço inox, permitindo aumento do torque de fixação. Tal mudança mitigou um problema de inclinação dos blocos magnéticos que aparecia em posições com grandes forças longitudinais, causando grandes variações no erro de fase do dispositivo de inserção, o que impossibilitava a correção de campo otimizada para todas as configurações de posicionamento dos cassetes.

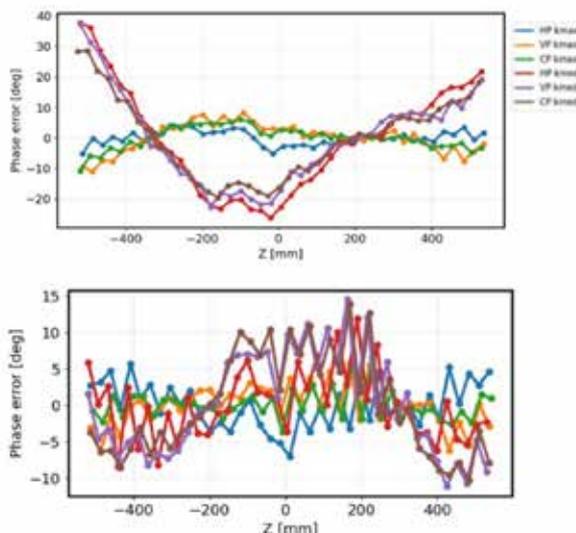


Figura 41 - Perfil de erro de fase antes (acima) e depois (abaixo) de substituição dos parafusos.

Após a substituição dos parafusos, foi possível realizar três iterações de *shimming* (aplicação de calços nos blocos) para correção do perfil de campo magnético, reduzindo efetivamente os erros de fase do ondulador e validando o algoritmo desenvolvido para o cálculo de espessura e local de aplicação dos calços. Os erros de fase RMS encontram-se próximos a 3° , valor adotado como meta.

Foram realizados testes de repetibilidade do campo magnético após a realização de movimentações nos cassetes, verificando que o campo magnético e seus erros (erros de fase e integrais de campo) apresentavam variações pequenas o suficiente para não impactar o funcionamento do dispositivo.

Na área dos sistemas de caracterização magnética, foram realizados testes de *crosstalk* no sensor *Hall* utilizado para medidas de campo, demonstrando que as correções aplicadas eram satisfatórias e foi realizada alteração nos atuadores do sistema de fio esticado para corrigir o problema de diferença no desvio padrão das medidas das componentes vertical e horizontal das integrais de campo, agora ambas estão com erros baixos (na ordem de 3 G.cm para a primeira integral e 0.8 kG.cm² para a segunda integral).

Câmara de Vácuo

No mês de maio de 2023 foram realizados testes de montagem da câmara de vácuo no ondulador DU525. Neste teste, filmes de kapton de espessura de 0,07 mm e 0,125 mm são posicionados entre a câmara e os subcassetes de forma a reduzir o atrito durante a movimentação dos cassetes do ondulador.

Os testes tinham como objetivo avaliar se ocorreriam danos à câmara e desgaste, ou ruptura, dos filmes de Kapton. O experimento foi montado de forma a replicar a situação que ocorrerá durante a operação real do ondulador no Sirius. A Figura 42 mostra a câmara posicionada no ondulador.

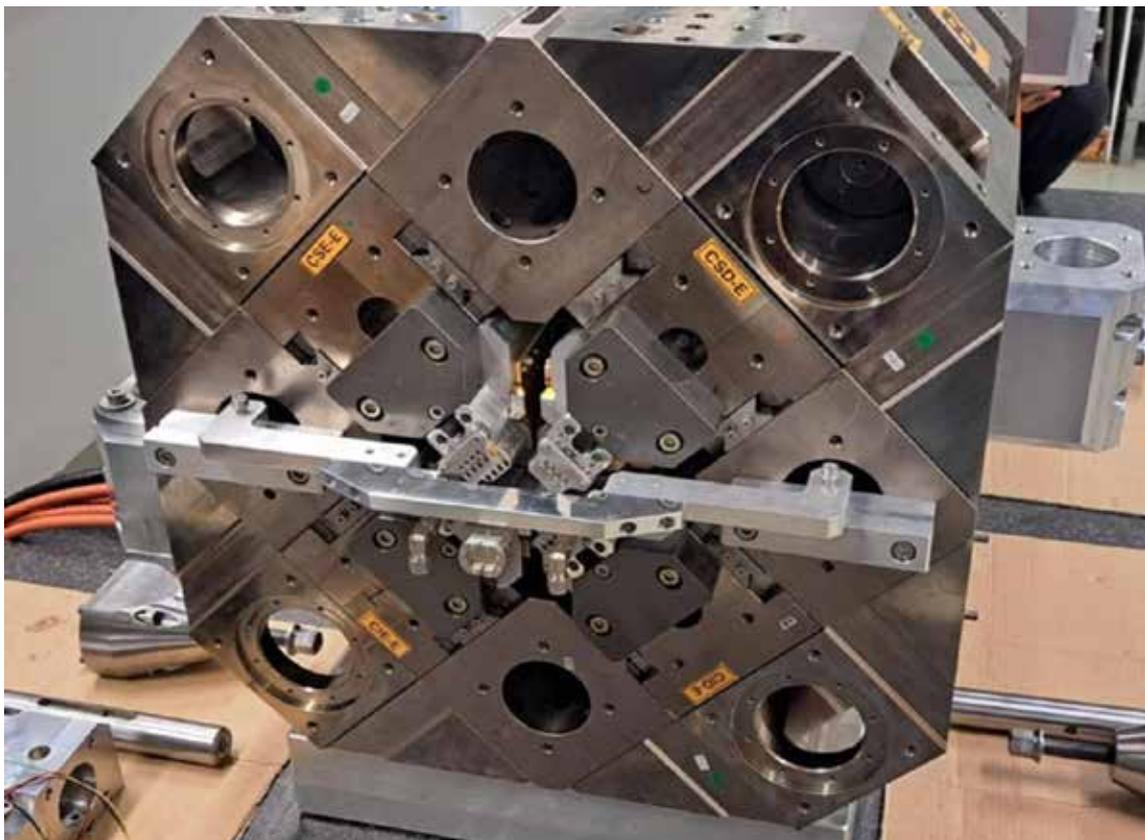


Figura 42 - Câmara posicionada do ondulador.

Foram realizados cerca de 7000 ciclos que abrangeram diferentes polarizações nas quais o ondulador irá operar para geração de feixe de luz síncrotron para a linha de luz. Após as cicla-gens não foram observados danos à câmara de vácuo e nem as folhas do filme Kapton, indicando que os testes foram bem-sucedidos.

Infraestrutura

Os desenvolvimentos envolvendo a infraestrutura para os aceleradores, linhas e laboratórios envolveram o projeto de sistemas e equipamentos para o alcance de parâmetros nominais, melhoria dos processos de operação e organização geral das instalações. As ações estão descritas nos tópicos a seguir.

Distribuição de nitrogênio líquido

O sistema de distribuição de Nitrogênio Líquido poderá abastecer 40 linhas de luz e a planta de liquefação de gás hélio no Sirius.

No primeiro semestre de 2023, foi concluído o *Final Design Review* para todas as linhas de distribuição de Nitrogênio Líquido, Separador de fase e sistema de controle e monitoramento desse sistema.

A DEMACO, parceira neste projeto, iniciou a fabricação do Sistema de Distribuição de Nitrogênio nesse semestre. Na Figura 43 se pode observar o separador de fases de nitrogênio, após montagem mecânica.



Figura 43 - Separador de fases de Nitrogênio

Neste semestre também houve uma expressiva evolução na fabricação das linhas isoladas a vácuo para distribuição de Nitrogênio Líquido. A Figura 44 mostra alguns trechos do anel isolado a vácuo de distribuição de Nitrogênio Líquido.



Figura 44 - Trechos do anel de distribuição de nitrogênio fabricados

Em maio desse ano, a empresa DWG concluiu a fabricação de todos os gabinetes do sistema de controle e monitoramento. Durante o semestre houve uma intercorrência na entrega das válvulas da Stohr, gerando um atraso de três semanas no cronograma do projeto. Com isso, o comissionamento do sistema de distribuição de nitrogênio líquido deverá ser concluído até o final de outubro de 2023.

Em paralelo às atividades de fabricação do sistema de distribuição de Nitrogênio Líquido que ocorreram na DEMACO e DWG, foi concluída a base de concreto com capacidade de instalação de um tanque de até 55.000 litros. Também foi construída uma canaleta enterrada com tampas entre a base do tanque e o prédio do Sirius, que irá abrigar a linha de nitrogênio líquido que abastecerá as linhas de luz e a linha de nitrogênio líquido que abastecerá a planta criogênica.

Ademais, foram projetados e cotados todos os suportes para as linhas isoladas a vácuo do Nitrogênio Líquido, no primeiro semestre de 2023. A Figura 45 mostra o projeto de todos os modelos suportes.

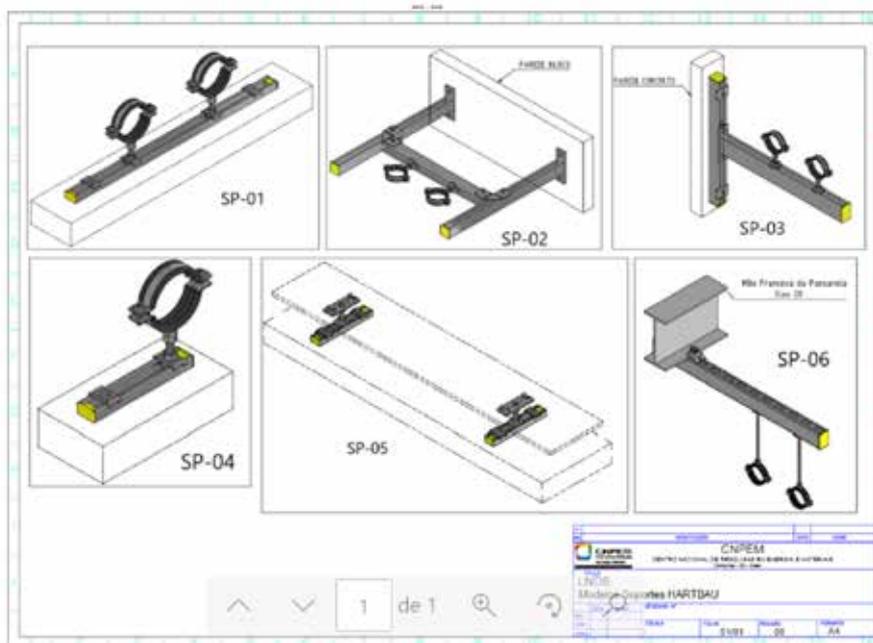


Figura 45 - Projeto dos Suportes para o Sistema de Distribuição de Nitrogênio Líquido.

Pode-se destacar ainda neste semestre, o projeto da conexão entre o tanque e as linhas de distribuição de Nitrogênio Líquido que alimentam as linhas de Luz (TL1A) e Planta Criogênica (TL3). Após conclusão do projeto, foi realizado o processo de concorrência e a contratação da empresa a Nitrotec para esse fornecimento.

Planta para recuperação de hélio

A obra para implantação da recuperação de hélio gás se desenvolveu dentro do previsto, especialmente no que se refere à instalação das infraestruturas associadas, que está em sua etapa final e será testada com nitrogênio gás no próximo mês. Entretanto, ocorreu atraso na entrega do compressor de alta pressão da empresa alemã Bauer, que ainda sofre com atrasos na cadeia de suprimentos de itens de automação, estendendo o prazo previsto para operacionalização da planta de junho para setembro. No início do ano foi firmado um acordo de comodato entre USP-Lorena e CNPEM, viabilizando a transferência de componentes e equipamentos que estão sendo empregados nesta instalação, reduzindo custos e criando redundâncias. O *startup* da planta atenderá imediatamente as linhas EMA, SABIÁ e IPÊ, que em conjunto requerem grandes volumes de hélio líquido para abastecer os sistemas de refrigeração criogênica necessários para operar magnetos supercondutores e detectores utilizados em seus programas científicos. A operacionalização desta planta representa ao CNPEM uma redução de custo da ordem de 70% em comparação ao cenário de aquisição direta de hélio líquido, custo que ainda poderá ser reduzido futuramente se demonstrada a viabilidade de conexão ao liquefator previsto na planta criogênica das novas cavidades de radiofrequência (supercondutoras) para o anel de armazenamento do Sirius.



Figura 46: A – Maquete 3D da planta de recuperação de hélio gás; B – estado da infraestrutura na sala de compressão; C – linha de coleta em aço inox instalada ao longo do hall experimental; D – balões de gás obtidos da USP-Lorena; E – cavalete com conexões e medidor de vazão instalado nos pontos de geração de gás.

Planta de liquefação de hélio do Sirius

No primeiro semestre de 2023, foi realizada a modelagem 3D da planta criogênica e dos seus subsistemas. Esta modelagem permitiu a identificação e eliminação de interferências entre a planta criogênica, utilidades e instalações pré-existentes. Com isso, pode-se partir para o projeto executivo da parte quente da planta criogênica e das utilidades. As Figura 47 e Figura 48 mostram os modelos 3D desenvolvidos.

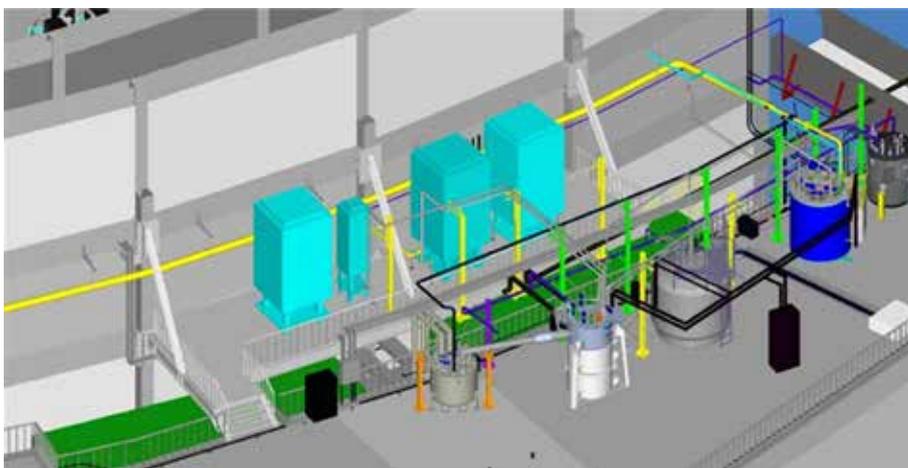


Figura 47 - Modelagem 3D da planta criogênica em cima da blindagem

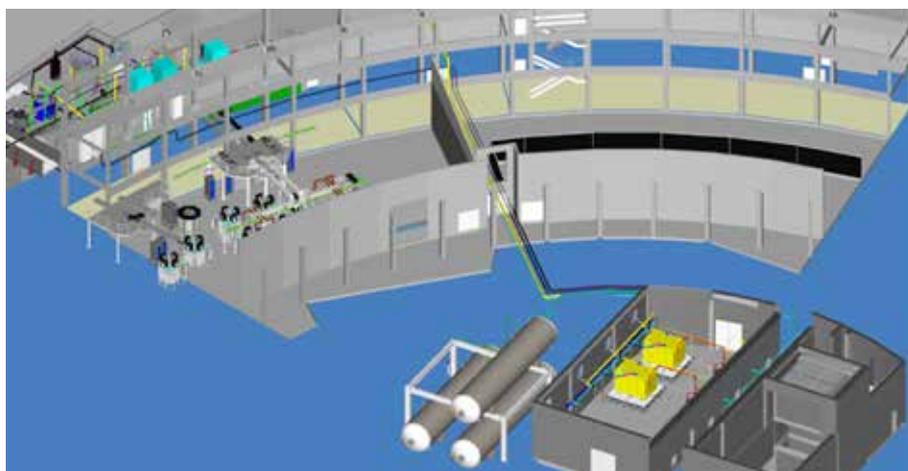


Figura 48 - Modelagem 3D da planta criogênica incluindo tanques e sala de compressores

Em dezembro de 2022, foi realizado o *Acceptance Test da Cold Box* na planta da fornecedora Linde em Pfungen na Suíça. No *Acceptance Test*, a Linde demonstrou o funcionamento da Cold Box nos modos de Resfriamento e Evaporação.

O teste de performance da *Cold Box*, no modo Refrigeração, teve como objetivo comprovar a capacidade de resfriamento da *Cold Box* com a especificação de 750W@4K. Foi possível verificar na vazão especificada de 85 g/s a capacidade de resfriamento real de 817W cujo valor foi maior que o especificado, além do fluxo uniforme de hélio líquido observado pela estabilidade do nível do *Dewar*.

O teste de performance da *Cold Box* no modo Liquefação teve por objetivo comprovar a vazão especificada do hélio na fase líquida e, a partir dos dados de densidade, volume do tanque e tempo de decaimento de pressão do tanque, foi possível com provar a vazão desejada.

A fabricação de todos os componentes da planta criogênica contratados com a Linde foi concluída no primeiro semestre de 2023. Todos os equipamentos foram embarcados para o Brasil e a planta criogênica já está em desembarço no Porto de Santos – SP.

Em paralelo à conclusão da fabricação da planta criogênica, foi concluída, ainda, a montagem da estrutura metálica dos tanques de Hélio gasoso, que armazenarão todo o inventário de Hélio da Planta em casos de parada.



Figura 49 - Estrutura metálica e tanques de Hélio instalados

Neste semestre, foi concluída a fabricação e instalação do mezanino que será utilizado para instalação dos *Ambient Heaters* da planta criogênica. Também foram projetados diversos suportes para a planta criogênica e iniciada a instalação dos mesmos.

A respeito das utilidades necessárias para a planta criogênica, foi concluído o projeto executivo da parte mecânica e elétrica e foram realizadas cotações para execução. No entanto, os valores das propostas recebidas inviabilizavam a execução porque excederiam em muito o orçamento. Para viabilizar as instalações, foi feita uma engenharia de valor e uma nova projeção do Circuito C2 na casa de bombas 2, gerando uma redução de custos de quase 50% na instalação.

Foi realizada, internamente, a análise de risco da planta criogênica e concluído o projeto executivo de exaustão de Hélio e Nitrogênio para Planta Criogênica e Cavidades. Ademais, foi realizado o projeto “*Conceptual Design Review*” para renovação de ar do Hall Experimental onde será instalada a planta criogênica e o sistema de distribuição de Hélio Líquido e recebido o *Ambient Heater* que atenderá a *Valve Box*. Por fim, foi executado o projeto para isolamento de vibrações para os compressores de Hélio, com a construção e instalação das bases dos compressores.

..... Sistema de abastecimento AAB e AD - C6

Em 2022, o *Conceptual Design Review* (CDR) do Sistema de Abastecimento de Água Abrandada (AAB) e água desmineralizada (AD) para o Sirius foi concluído. Ficou definida a seguinte especificação para água desmineralizada que irá abastecer os sistemas de resfriamento do Sirius: PH igual a 7,5, Condutividade menor ou igual a 0,1 $\mu\text{S}/\text{cm}$ e Nível de O2 menor ou igual a 10 ppb.

No primeiro semestre de 2023, a especificação técnica para contratação de um projeto do sistema de abastecimento de água desmineralizada e abrandada para o Sirius foi elaborada. A

partir da especificação técnica, foi realizado o processo de concorrência para seleção do projetista, no qual, a WSE Engenharia foi escolhida para realização do projeto e o contrato foi assinado. Para o segundo semestre de 2023, será iniciado esse projeto básico e executivo com a WSE.

Sistema de Exaustão do Sirius

O Projeto dos Sistemas de Exaustão do Sirius pode ser dividido em: (a) exaustão para o Laboratório Químico (LQ), Laboratório de Crescimento in situ (LCIS), e Laboratório de Manipulação de Sólidos (LMS), (b) Exaustão Laboratórios Localizados nas Linhas Longas e (c) Exaustão do Hall Experimental (cabana ótica e experimental das linhas luz).

Em 2023, a instalação da exaustão para os laboratórios LQ, LCIS e LMS, localizados entre os eixos 56 e 1 do Sirius, foi concluída e liberada para uso. Os gases dos laboratórios são exauridos através do sistema apresentado na foto abaixo, em que o ventilador direciona os mesmos para a chaminé localizada na área externa do Sirius.



Figura 50 - Sistema de exaustão dos laboratórios LQ, LCIS e LMS.

Sobre a Exaustão do Hall Experimental entre os eixos 37 e 11, neste semestre foram finalizados os processos de concorrência e de contratação da empresa para projeto executivo. O Projeto Preliminar, Projeto Conceitual e anteprojeto já foram realizados pela ARPRO e aprovados pelo CNPEM. Ademais, o desenho apresentado no Projeto Básico e aprovado pelo CNPEM da exaustão do Hall se encontra na Figura 51 abaixo.

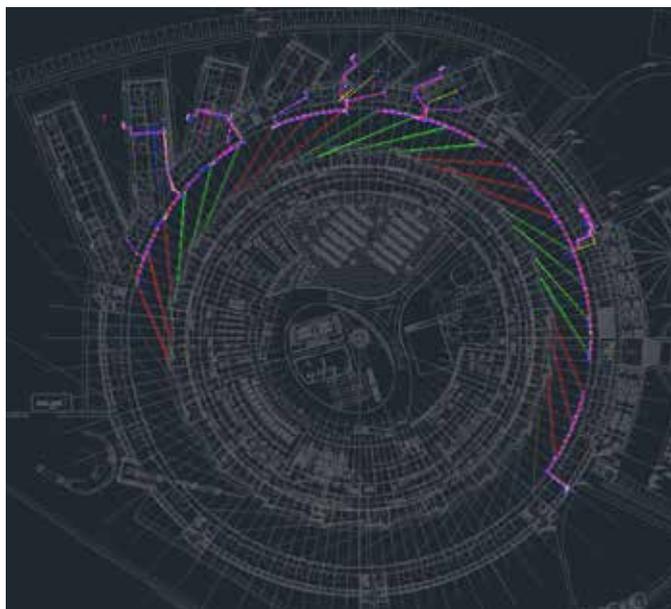


Figura 51 - Disposição dos sistemas de exaustão das linhas de luz entre os eixos 37 e 11.

Os sistemas de exaustão foram divididos a cada 4 linhas de luz, de acordo com os cálculos realizados de vazão e diâmetros das tubulações. Os gases são coletados numa tubulação ao longo do anel e direcionados para fora do Sirius através de ventiladores, sendo exauridos por chaminés a 3 metros acima do telhado (para as linhas de luz longas) e através de um sistema de diluição dos gases para os outros pontos. O projeto está em conformidade com as normas NBR 16.401 1/2/3 e recomendações pertinentes da ASHRAE.

Combate a Incêndio CPD e Carnaúba

O escopo do projeto é a instalação de um sistema de combate a gás inerte em dois ambientes com equipamentos críticos e sensíveis à água, elemento de proteção convencional para combate a incêndio existente atualmente na sala CPD e na Sala de Microscopia da Linha Carnaúba, ambos no prédio do Sirius. Faz parte desse escopo a interligação dos dispositivos acrescentados para detecção, alarme, operação e monitoramento ao sistema existente no prédio.

A empresa Sofister Soluções de Tecnologia Eletrônica LTDA (Engprotection) foi contratada para fornecimento de projetos e de materiais nacionais, instalação de sistema de supressão de incêndio por gás, interligação do sistema de combate ao sistema de detecção e alarme, atualização de telas gráficas do supervisor e emissão de ART junto ao CREA.

As fases de projeto contemplaram o encaminhamento da tubulação do agente nos ambientes, a definição da localização dos detectores multicritério, cálculo hidráulico do sistema em *software* homologado do fabricante do agente limpo Novec™ 3M, disposição dos cilindros, localização das fontes de alimentação IDNAC, disposição dos quadros de módulos, levantamento de intervenções na arquitetura e localização dos equipamentos de emergência.

Na etapa de testes de performance, durante o primeiro semestre de 2023, foram concluídas a instalação das infraestruturas e dos dispositivos do sistema de alarme de incêndio, a montagem das tubulações de encaminhamento do gás e alimentação elétrica para o novo sistema.



Figura 52 - Cilindro, tubulação e equipamentos instalados para a sala Microscopia

Foram executadas as interligações com o sistema de climatização da sala para atuação dos equipamentos de ar-condicionado e exaustores em caso de ocorrência nos ambientes. Toda a lógica de disparo e operação do novo sistema foi desenvolvida, assim como as novas telas do sistema de supervisão para monitoramento.

Para o segundo semestre de 2023, a previsão é de instalação dos cilindros contendo o gás extintor, teste do sistema, programação e comissionamento da detecção e alarme com as novas lógicas de funcionamento desenvolvidas para esses ambientes específicos junto ao prédio do Sirius.

Auditório do Sirius

Com a contratação do escritório de arquitetura no final de 2022, teve-se início, no primeiro semestre de 2023, o desenvolvimento dos projetos para o auditório do Sirius. Nesse sentido, foi finalizado o desenvolvimento do projeto arquitetônico em fase de Estudo Preliminar e iniciado o processo de contratação dos projetos complementares.

Para o desenvolvimento do Estudo Preliminar, foram realizadas reuniões de levantamento de dados com a diretoria do CNPEM e equipes indicadas, sendo criado ao final, o programa de requerimentos deste projeto, representado nos documentos do Estudo Preliminar.

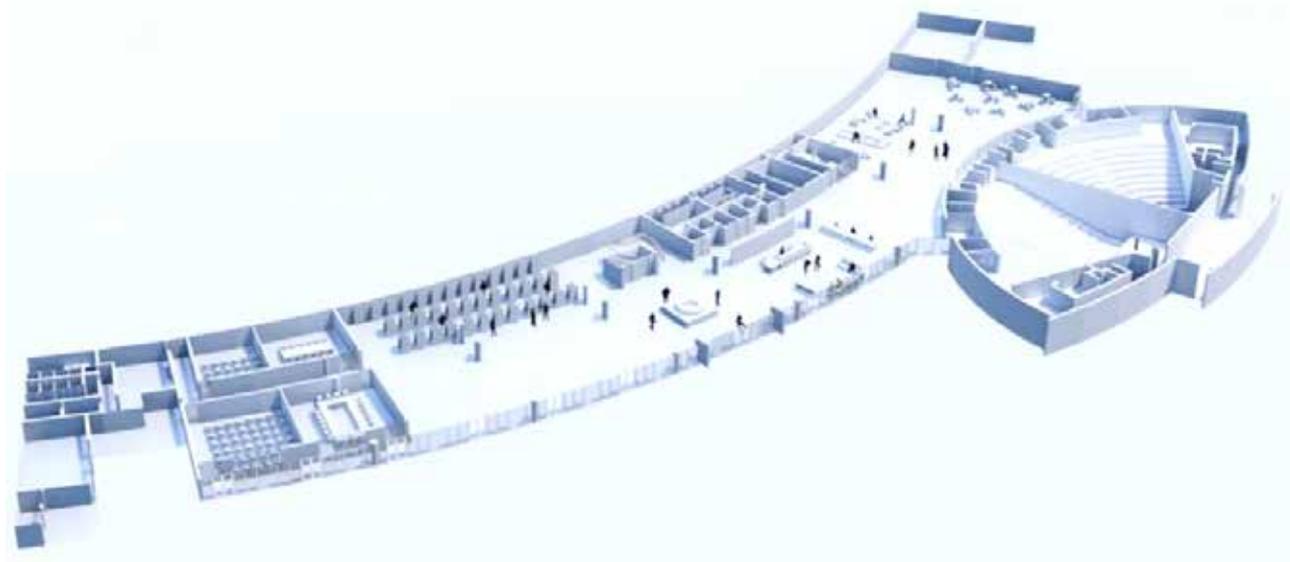


Figura 53 - Imagem isométrica do projeto para o auditório Sirius.

Tecnologias para luz síncrotron

Ótica de fótons

Controle de contaminação por carbono

As linhas de luz de baixa energia, como IPÊ e SABIÁ no Sirius, são conhecidamente mais afetadas pela contaminação das ópticas por carbono, afetando a performance dessas linhas. Com base nisso, implementamos alguns procedimentos de controle de contaminação na linha SABIÁ. Uma estratégia adotada foi a introdução de pressão de oxigênio ($\sim 1e-7$ mbar) nas câmaras de vácuo das primeiras ópticas da linha, onde a contaminação é mais intensa devido à alta potência do feixe de luz. O oxigênio, em conjunto com o feixe síncrotron, reage com possíveis hidrocarbonetos presentes nas câmaras, evitando (ou retardando) sua adesão na superfície das ópticas. Além disso, foi adotada uma estratégia de liberação crescente da potência do feixe síncrotron ao longo do tempo, uma vez que a contaminação pode ser acelerada pela maior incidência do feixe na face óptica dos elementos na presença de maiores concentrações de contaminantes. Para o condicionamento inicial foram selecionadas regiões fora do centro das faces ópticas para receber o feixe de luz, a fim de preservar a região central, uma vez que estas devem ser utilizadas na operação e rotina da linha. Através de análises visuais e medidas de espectro na região do carbono, foi identificada a contaminação de carbono nas ópticas da linha SABIÁ. No entanto, por meio do monitoramento desse processo ao longo do tempo, constatou-se uma diminuição na contaminação. Os próximos passos envolvem estudar os parâmetros que aceleram ou retardam a remoção do carbono e estender esse procedimento para outras linhas de luz que sofrem da mesma condição.

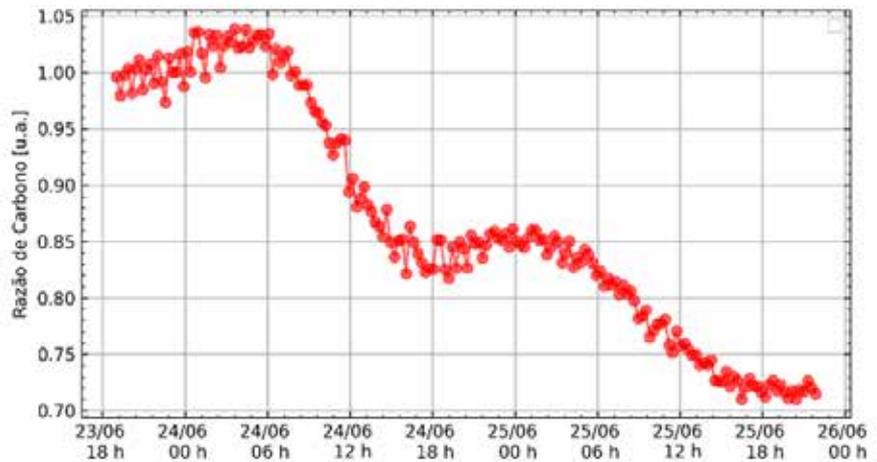
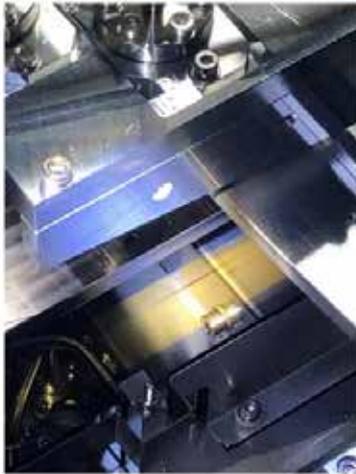


Figura 54: (esq.) Pequena mancha escura sobre superfície de um espelho (região dourada da imagem) da linha SABIA, evidenciando a contaminação de carbono; (dir) gráfico da quantidade relativa de carbono, em unidades arbitrárias, ao longo de dois dias de exposição ao feixe, com pressão de oxigênio nas câmaras das primeiras ópticas.

Sistema de limpeza de superfícies óticas

O principal objetivo deste projeto é desenvolver um método interno para a limpeza das ópticas do Sirius, visando a remoção de contaminações, especialmente contaminação por carbono, que ocorrem durante a operação da linha. Assim, busca-se estudar como essas contaminações ocorrem e desenvolver técnicas de remoção que restaurem a qualidade das superfícies ópticas. Para isso, serão testadas amostras contaminadas de forma semelhante ao que ocorre na linha, utilizando uma câmara de testes específica desenvolvida como parte do projeto. Esse passo também envolve a caracterização da contaminação, identificando o tipo e a quantidade de material depositado. Com base em referências de outras fontes de luz síncrotron no mundo, estão sendo direcionadas as limpezas dessas amostras para dois métodos principais: limpeza por plasma e limpeza por oxigênio. Ambos os métodos serão executados na câmara desenvolvida pelo projeto, com adaptações para atender às necessidades de cada método. As conclusões desse projeto apontam para duas possibilidades, desinstalar as ópticas das linhas e realizar as limpezas *ex-situ* no *setup* desenvolvido, ou propor alterações nas atuais câmaras de espelhos das linhas, a fim de realizar a limpeza *in situ* das ópticas. O projeto está em fase de estudo, e a expectativa é consolidar uma proposta até o final de 2023.

Opto mecânica

Monocromador DCM-L

Durante o primeiro semestre de 2023 houve avanços significativos nas montagens dos monocromadores de dois cristais (HD-DCM-L) que serão instalados no segundo semestre nas linhas QUATI e SAPUCAIA. As bases de granito de ambas as unidades foram montadas e se encontram em fase de finalização da infraestrutura elétrica e validação das movimentações responsáveis por alinhamento na linha de luz e troca entre pares de cristais. No interior da câmara de vácuo, as suportações dos atuadores rotativos foram alinhadas e o controle de movimento sincronizado entre tais atuadores se encontra em andamento, já tendo sido executadas movimentações em malha aberta e um levantamento preliminar de planta. Quanto aos elementos internos contendo o mecanismo de paralelismo entre cristais, a unidade SAPUCAIA encontra-se em fase de validação em bancada do sistema de controle enquanto a unidade QUATI encontra-se em fase de montagem. Para ambas as unidades, foram executados os alinhamentos entre os planos cristalinos após iterações entre usinagens e metrologia. Em relação ao circuito interno de refrigeração via nitrogênio líquido, vazamentos observados na unidade SAPUCAIA foram reparados com sucesso e o dispositivo para a unidade QUATI está sendo manufaturado. Os passos seguintes para a instalação nas linhas de luz envolvem o condicionamento dos atuadores rotativos comerciais no ambiente de ultra-alto vácuo, o término das montagens, a integração entre os subsistemas e validação offline do sistema de controle. A unidade SAPUCAIA estará disponível para o início do condicionamento com feixe até outubro e a unidade QUATI dezembro.

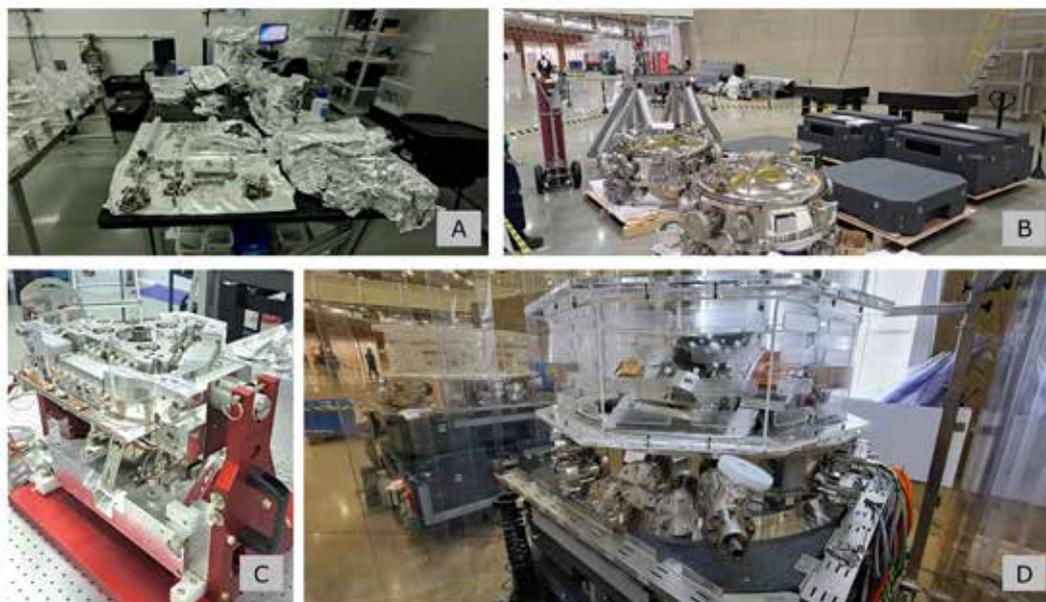


Figura 55: Peças do monocromador durante montagem em janeiro/2023 (A e B) e em junho/2023 durante validações dos mecanismos de controle de paralelismo entre cristais em bancada (C), seleção de ângulo de Bragg e movimentação da base de granito (D).

Estações experimentais

Manipulação e Transferência de Amostras para a Estação SAPOTI

A SAPOTI será a segunda estação experimental na linha de luz CARNAÚBA. Projetada para operar na faixa de energia de 2,05 a 15 keV, será capaz de realizar várias técnicas simultaneamente, como difração, espectroscopia, fluorescência e luminescência, além de mapeamentos em 2D e 3D. Com uma ótica acromática, espera-se obter feixes coerentes e estáveis de 30 a 140nm, possibilitando a realização de imagens de alta resolução em escala nanométrica. Os mapeamentos serão realizados por um estágio de movimentação em vácuo desenvolvido para a aplicação. Com um design mecatrônico de alta dinâmica, foi possível demonstrar a viabilidade do escaneamento da amostra com alta resolução, controle preciso de posicionamento em escala de 1 nanômetro, taxa de amostragem de 10 kHz e velocidades de varredura de centenas de micrômetros por segundo. Para mitigar danos decorrentes das doses de radiação em amostras sensíveis, o manipulador foi projetado para refrigerar as amostras até temperaturas criogênicas, em temperaturas inferiores a 100K. Atualmente, o sistema de manipulação, composto pelo estágio de escaneamento, goniômetro e criostato para refrigeração, encontra-se em fase final de testes, com modificações sendo realizadas para otimização da performance de varredura e da temperatura final da amostra. Para a focalização do feixe, um sistema acromático baseado em espelhos de silício do tipo KB (Kirkpatrick-Baez) foi desenvolvido. Com um design focado em rigidez e estabilidade, o sistema KB utiliza elementos flexíveis e atuadores piezoelétricos para garantir o desempenho dinâmico necessários. O projeto mecânico do sistema está finalizado, estando agora em processo de detalhamento 2D e compra dos materiais e serviços de fabricação.

Outro subsistema desenvolvido é a câmara de carregamento, projetada para transferência e armazenamento de até seis amostras criogênicas em vácuo. Ela conta com um sistema de carrossel de troca de amostras capaz de atingir temperaturas abaixo de 100K e uma garra (ou *gripper*) para transporte das amostras para o manipulador onde são realizadas as medições com raios-X. As amostras são pré-carregadas usando um sistema de *load-lock* e um cartucho personalizado que se acopla ao carrossel. O projeto da câmara de carregamento, incluindo o carrossel, a garra e o condicionamento criogênico, está finalizado, com os componentes em processo de compra e fabricação. Alguns componentes críticos, como a *load-lock*, o criostato de ciclo fechado (*pulse tube*), o mecanismo principal da garra de transferência e um protótipo de uma válvula embarcada já foram integrados e validados. Os níveis de vácuo tanto da região do sistema de carregamento, quanto da região principal onde se encontram o manipulador e o sistema de espelhos, será garantido por uma câmara compatível com níveis de ultra-alto vácuo (UHV) que foi projetada pela equipe do LNSL e recentemente fabricada pela empresa FCA Brasil. Por fim, o sistema completo será montado sobre uma base inercial de granito, também já entregue ao laboratório.

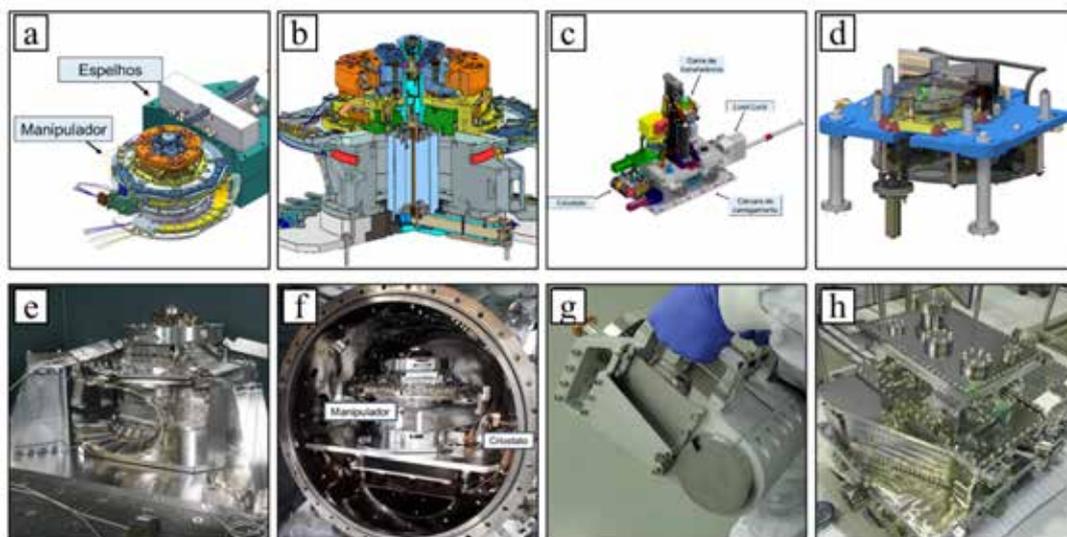


Figura 56: a) Esquema do sistema do manipulador e os mecanismos de espelhos; b) Detalhe interno do manipulador e sistema de refrigeração; c) Imagem renderizada da estação de carregamento de amostras; d) Detalhe do sistema de carrossel; e) Fotografia do manipulador completo em bancada de testes; f) Fotografia do manipulador em câmara de vácuo para testes criogênicos. g) Imagem do criostato tipo pulse-tube integrado; h) Câmaras de vácuo fabricadas.

Detetores e Diagnósticos

Detector PIMEGA 450D

O detector PIMEGA 450D com geometria em arco, mostrado na Figura 57, foi testado, instalado e comissionado na linha de luz PAINEIRA. Ele apresentou características dentro dos requisitos de projeto, porém com alguns pequenos clusters de pixels mascarados (menos de 1%) e uma coluna de 32 bits em um dos chips saturada por canal LVDS. O detector foi calibrado e está em operação na linha de luz. Na Figura 57 é apresentado um difratograma obtido com o PIMEGA 450D com zoom para destacar os picos de difração de uma amostra padrão de Al_2O_3 .

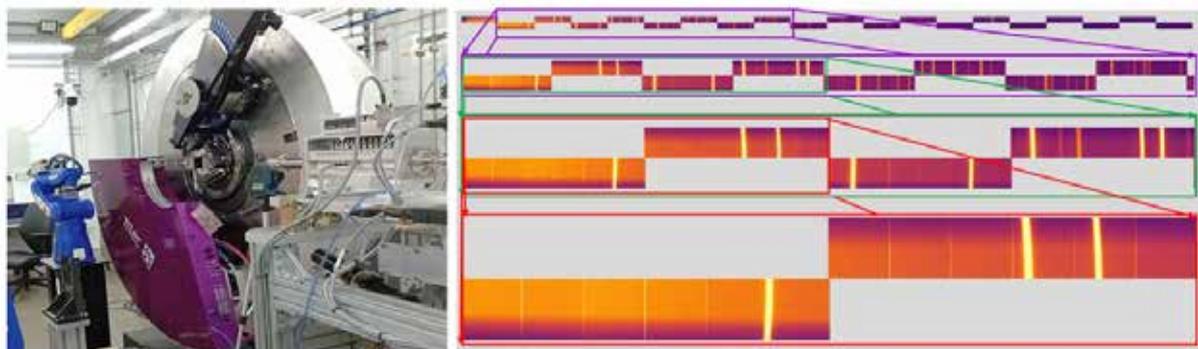


Figura 57: Esquerda: PIMEGA 450D instalado na linha PAINEIRA. Direita: difratograma coletado com padrão NIST Al_2O_3 .

Detector MOBIPIX 15D

Foram implementados novos modos de aquisição de imagens no *software* de controle dos detectores MOBIPIX 15D, os quais foram disponibilizados para uso nas linhas de luz CARNAÚBA e MOGNO. Os novos modos de aquisição são:

- *External Trigger*: possibilita o disparo sincronizado de aquisição de outros equipamentos.
- *Full Dynamic Range*: permite a captura de imagens com profundidade de 24 bits por pixel (dobro do modo *Default*) em feixes de alto fluxo e melhor relação sinal-ruído.

Melhorias adicionais no *gateway* FPGA levaram a uma evolução no desempenho e na confiabilidade do detector para aquisição de imagens, elevando a taxa máxima de quadros de 50 fps para 200 fps no modo *Default* (12 bits por pixel) e para 100 fps no modo *Full Dynamic Range* (24 bits por pixel). Foi implementada também a varredura de energia (*Threshold Scan*), o que permitiu reduzir em aproximadamente 4 vezes o tempo de execução em relação às varreduras existentes. A Figura 58 apresenta exemplos de resultados obtidos com a nova funcionalidade de varredura.

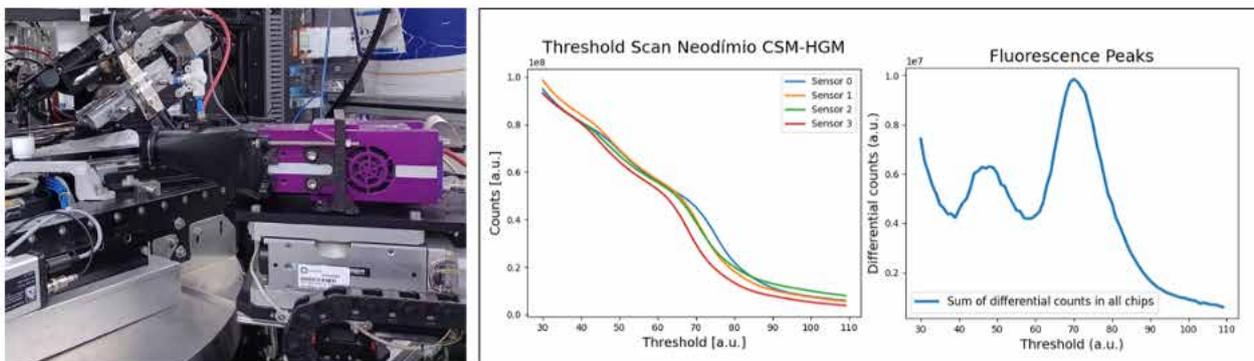


Figura 58: Esquerda: MOBIPIX 15D instalado na linha de luz CARNAÚBA. Direita: gráficos de Threshold Scan para a fluorescência do neodímio.

Controle e Aquisição de Dados

Controle e aquisição de dados de racks de BPM

O *software* de controle e aquisição de dados dos bastidores MicroTCA.4 de BPM e FOFB do Sirius foi inteiramente reformulado visando facilitar a evolução do código e a manutenção dos sistemas que dele dependem no longo prazo. A nova arquitetura removeu o ZeroMQ como camada intermediária entre o IOC EPICS e o *hardware*. A reescrita do código melhorou a confiabilidade e a performance do sistema com um número consideravelmente menor de linhas de código.

Neste período, o novo *software* entrou em operação apenas para as placas FPGA do sistema de correção de órbita rápida (FOFB Controller) e eletrônicas de condicionamento de sinal dos BPMs com conectividade Ethernet (eletrônicas RFFE), ficando pendente para o segundo semestre a atualização de *software* das placas FPGA dos digitalizadores dos sinais dos BPMs de RF e de fótons, bem como placas FPGA dos receptores de sincronismo dos bastidores de BPM.

Padrão NeXus para Cristalografia

Foi realizado um levantamento junto à linha de luz MANACÁ a fim de estabelecer os metadados a compor o formato de dados padronizado para a técnica de cristalografia. Para isto, utilizou-se o formato NeXus, mais especificamente, a definição de aplicação MX que fora definido pela comunidade de síncrotrons e fontes de neutrons nos últimos anos. A padronização se encontra em fase de implantação na linha de luz e faz parte de uma ação mais abrangente de padronização de dados nas linhas de luz do Sirius.

Eletrônica para Medida de Baixas Correntes

Foi recebido o primeiro lote de 30 unidades da eletrônica digital para medida de baixas correntes desenvolvida pelo LNLS. O dispositivo disponibiliza 4 canais de medida em um único instrumento numa faixa dinâmica de pA a mA com conectividade Ethernet. Os sinais de corrente são digitalizados em alta resolução (24 bits) com taxa máxima de aquisição de 2 kS/s. Para alguns experimentos específicos nas linhas de luz do Sirius, este instrumento permite também polarizar o dispositivo conectado com tensões de até 400 V. As 30 unidades recebidas permitirão um aumento da capacidade de diagnóstico e controle de vários aspectos experimentais das linhas de luz do Sirius.

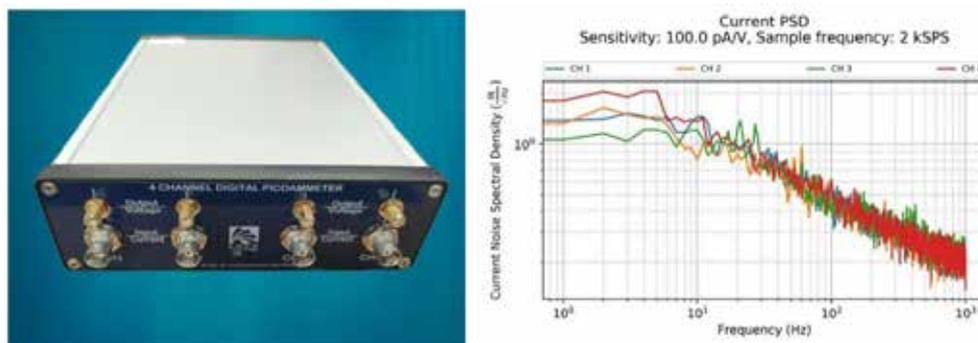


Figura 59: Esquerda: eletrônica digital de 4 canais para medidas de correntes de baixa intensidade. Direita: densidade espectral de ruído obtida na escala de medida de 250 pA.

Processamento e Análise de Dados

Reconstrução para Tomografia por Fluorescência

As reconstruções de fluorescência na linha de luz CARNAÚBA foram feitas levando em conta informações *a priori* da amostra em questão (inclusão de cristal). Neste sentido, as distribuições morfológicas dos elementos cobre, ferro e níquel puderam ser obtidas com medidas inerentes à instrumentação de varredura da CARNAÚBA, porém, utilizando a reconstrução de absorção da linha de luz MOGNO para corrigir artefatos na reconstrução do objeto. A correção de autoabsorção utilizada para a obtenção destas reconstruções faz uso de metodologia semelhante à utilizada na técnica de *Zoom Tomography* para a MOGNO. Aqui, as informações de suporte do objeto (em condição de *zoom-out*), assim como sua posição dentro do mesmo, permitem corrigir efeitos no peso da transformada de Radon atenuada, que modela o problema inverso de emissão. A solução de primeira ordem do problema faz uso de métodos iterativos para o modelo não linear³⁶.

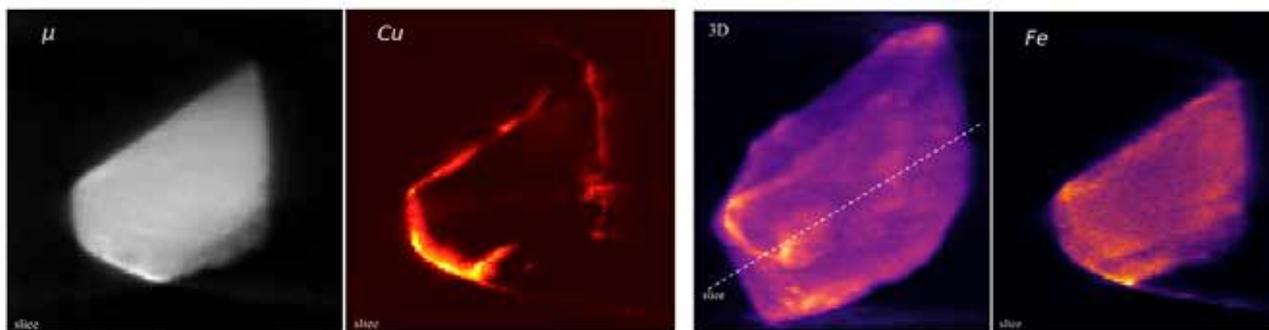


Figura 60: Reconstruções em tomografia por fluorescência na linha de luz CARNAÚBA.

Segmentação para tomografia de dupla energia

Foram estudadas as principais técnicas de parametrização da atenuação linear de materiais, considerando uma base de materiais conhecida e as diferentes interações de raios-X com a matéria, bem como técnicas baseada na decomposição de materiais usando métodos de otimização com restrição. Como resultado desta pesquisa, foram implementadas técnicas para segmentação que trabalham no espaço de fase da amostra, juntamente com a grandeza *Dual-Energy Index* e uma variação do método de biblioteca de triplas para a determinação dos materiais que compõem cada pixel da imagem de dupla energia. As implementações destes respectivos métodos foram validadas em imagens de tomografia computadorizada de dupla energia fornecidos pela Petrobras em projeto de cooperação.

Fontes de Luz síncrotron

Diversas melhorias nos aceleradores do Sirius para aumento da estabilidade do feixe de elétrons armazenado foram desenvolvidas e, após resultados positivos em testes realizados, foram implementadas na operação regular dos aceleradores. Entre as melhorias estão a operação em modo *top-up* com 100 mA em preenchimento uniforme; o aumento na transparência da injeção, ou seja, a redução de perturbações transientes na órbita do feixe armazenado durante as injeções; e a implementação do sistema de *feedback* rápido de órbita (FOFB), com atenuação de perturbações de órbita até frequência de 400 Hz [37]. Com isso, a estabilidade da órbita do feixe de elétrons no SIIRUS, integrada de 0.1 Hz a 1.0 kHz, atingiu valores de 1% e 4% do tamanho rms, respectivamente, nos planos horizontal e vertical. Estes valores são muito melhores que a meta usual de estabilidade de 10% do tamanho, geralmente estabelecida na maioria das novas fontes de luz síncrotron de 4ª geração. Testes realizados em conjunto com as linhas de luz mostram que, após a implementação das melhorias, as perturbações residuais de órbita devido ao processo de injeção não são detectadas pelos experimentos nas linhas.

36. Miqueles, E. X., & De Piero, A. R. (2010). Iterative reconstruction in x-ray fluorescence tomography based on Radon inversion. *IEEE Transactions on medical imaging*, 30(2), 438-450. 37. L. Liu et al. (2023), "Status of Sirius Operation with Users", proc. of the 14th International Particle Accelerator Conference, IPAC'23, Venice, Italy, May 2023, paper WEOGA2.

Controle e estabilidade

Operação em Modo Top-Up

O modo de operação top-up, em que a corrente é injetada frequentemente com as linhas de luz em funcionamento e, portanto, com os experimentos em curso, foi implementada como modo regular de operação para os turnos de usuários a partir de março deste ano. A implementação aconteceu após uma série de desenvolvimentos em diversos subsistemas dos aceleradores, como a conclusão do sistema de intertravamento para permitir a injeção de elétrons com o *shutter* das linhas de luz aberto, e a otimização dos parâmetros e da confiabilidade do injetor. O Sirius está operando com corrente de 100 mA no modo de preenchimento uniforme, ou seja, distribuída igualmente nos 864 pacotes. A injeção de elétrons é realizada através de um único pulso do injetor a cada 3 minutos, mantendo a corrente estável dentro de 0.3%. A tensão de bias do canhão de elétrons é utilizada como parâmetro variável para o controle da carga a ser injetada em cada pulso. Este modo de operação proporciona maior estabilidade às linhas de luz pois mantém a potência incidente nas linhas constante.

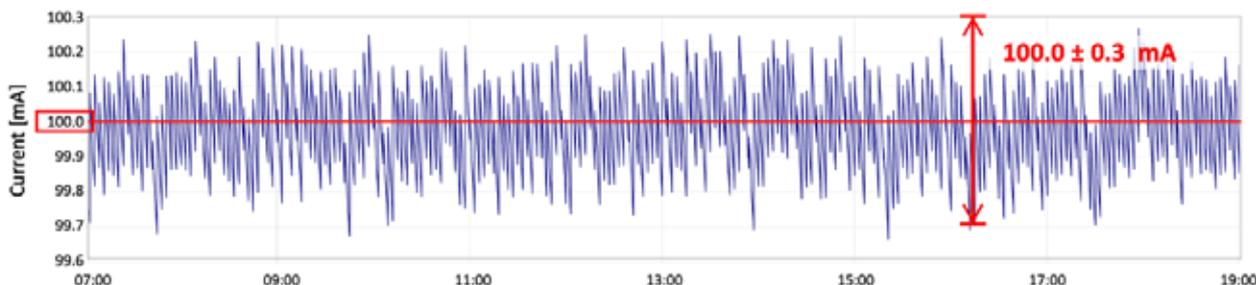


Figura 61: Corrente de operação do Sirius em modo top-up, com injeção de elétrons a partir de um pulso a cada 3 minutos.

Injeção Transparente

O esquema de injeção no anel de armazenamento do Sirius é baseado na injeção fora do eixo no plano horizontal, utilizando dois tipos de ímãs pulsados, os *septa* e o *kicker* não-linear (NLK). Ambos podem causar perturbações no feixe estocado ao pulsarem. No caso dos *septa*, há um campo magnético de fuga devido à blindagem não ser completamente efetiva e, no caso do NLK, há um campo residual devido a erros de posicionamento micrométricos dos fios de corrente que geram o campo magnético. Ambas as perturbações foram trabalhadas neste semestre para redução do efeito sobre o feixe armazenado. Além disso, outra medida, descrita abaixo, foi implementada na ótica do anel, a saber, a mudança do ponto de operação do anel para reduzir o fator de amplificação de órbita. No caso dos *septa*, foi implementada uma correção *feedforward* utilizando as corretoras rápidas disponíveis em ambos os lados do trecho de injeção, com fontes FBP convencionais das corretoras, especialmente configuradas para esse fim, para um primeiro teste rápido. No caso do NLK, foram instalados fios adicionais ao redor da câmara cerâmica para geração de um campo magnético adicional de compensação do campo residual na posição do feixe estocado, com mesma forma temporal do pulso principal. Além disso, o cabo que conecta a fonte de alta tensão pulsada aos fios do NLK foi substituída por um novo cabo com melhor blindagem a ruídos eletromagnéticos. Foi feita uma instalação temporária para os fios adicionais, para testar o conceito. Os resultados indicam que houve uma grande redução da perturbação na órbita do feixe estocado devido aos ímãs pulsados, ou seja, a injeção ficou mais transparente aos usuários das linhas de luz. Os níveis de transparência atingidos permitem operar o Sirius no modo *top-up* com periodicidade curta (3 minutos) entre injeções, e colocam o Sirius como a fonte de luz de 4ª geração com maior estabilidade de corrente e transparência de injeção existente.

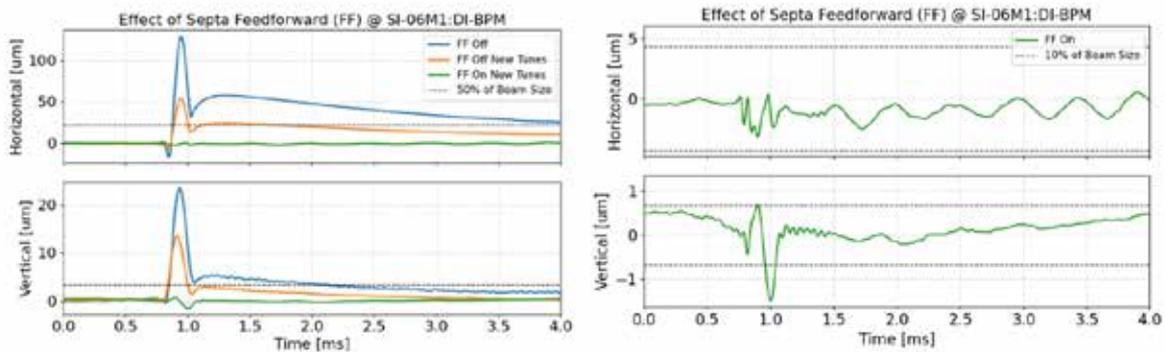


Figura 62: Perturbações na órbita do feixe armazenado medidas num trecho de baixo beta, induzidas pelo campo de fuga dos septa de injeção, com e sem a compensação feedforward. Esquerda: (azul) perturbação sem feedforward para o ponto de operação antigo, (laranja) efeito de se operar em um novo ponto de operação, com sintonias maiores, (verde) efeito da compensação feedforward no novo ponto de operação. A reta pontilhada representa 50% do tamanho rms do feixe para os planos horizontal e vertical. Direita: (verde) ampliação da escala vertical para o caso de compensação feedforward. A reta pontilhada representa 10% do tamanho rms do feixe.

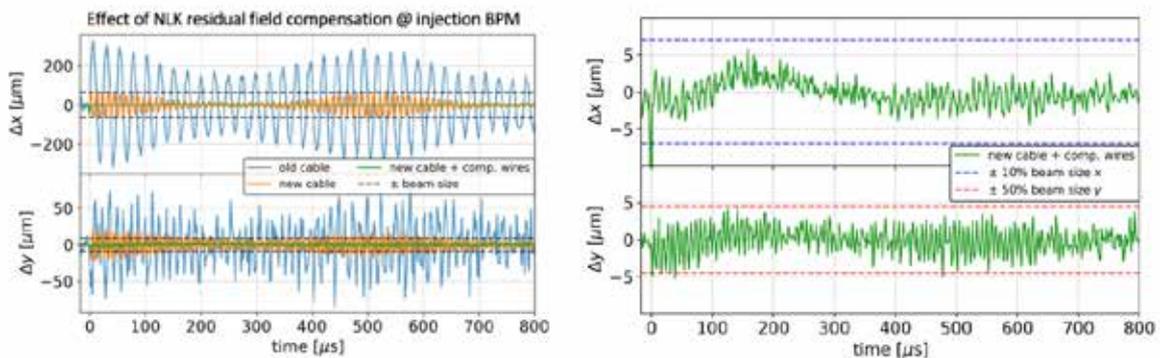


Figura 63: Perturbações na órbita do feixe armazenado medidas no trecho de injeção, induzidas pelo campo residual do NLK, com e sem as bobinas adicionais de compensação. Esquerda: (azul) perturbação anterior às mudanças, (laranja) efeito da troca de cabo, (verde) efeito da troca de cabo mais a bobina de compensação. A reta pontilhada representa um tamanho rms do feixe nos planos horizontal e vertical. Direita: (verde) ampliação da escala vertical para a curva final, com todas as compensações implementadas. As retas pontilhadas representam 10% e 50% dos tamanhos horizontal e vertical, respectivamente.

Melhorias no Sistema de correção de órbita rápida- FOFB

Foram realizadas melhorias de *software* e *gateway* FPGA no sistema de correção de órbita rápida a fim de permitir o aumento da frequência de cruzamento da rejeição a perturbações de órbita nos planos horizontal e vertical. As principais melhorias realizadas foram o aumento da taxa de atuação da malha do FOFB de 24 kHz para 48 kHz, proporcionando redução de latência da malha de controle, e a equalização das amplitudes dos sinais dos monitores de posição (BPM), que permitiu remover filtros digitais antes utilizados para suprimir transientes de chaveamento de canais de processamento dos BPMs. A relação entre valor RMS integrado entre 0.1 Hz e 1 kHz e tamanho de feixe nominal obtida foi inferior a 1% no plano horizontal e 4% no plano vertical nos BPMs do Anel. A frequência de cruzamento alcançada foi de 400 Hz, a mais alta já reportada na comunidade de aceleradores.

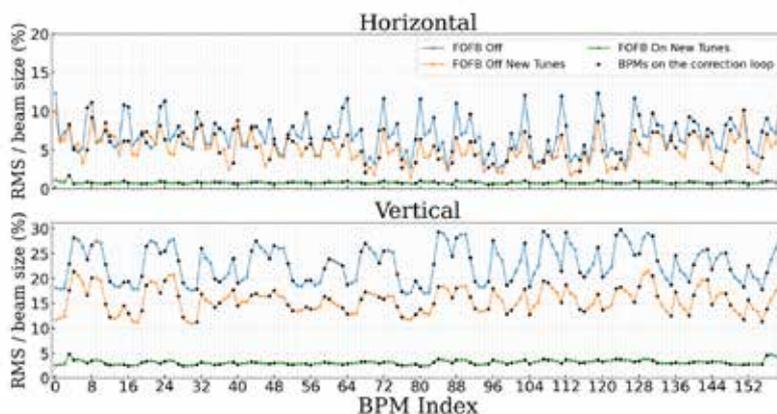


Figura 64: Estabilidade de órbita na faixa de frequências de 0.1 Hz a 1 kHz obtida a partir das melhorias no sistema FOFB e otimização de sintonias horizontal e vertical.

Também foi implementada a funcionalidade de identificação de sistemas por meio da excitação sincronizada dos atuadores do FOFB com sinais binários pseudoaleatórios (PRBS) para obtenção da resposta dinâmica da malha de controle do FOFB. Uma campanha de otimização do sistema utilizando esta nova funcionalidade está prevista para o segundo semestre de 2023, a fim de perseguir a meta de frequência de cruzamento de 1 kHz.

Dinâmica não-linear

Estudos de dinâmica não-linear para aumento da abertura dinâmica do anel de armazenamento do Sirius usando métodos *on-line* de otimização baseados no algoritmo RCDS (*Robust Conjugate Direction Search*) foram desenvolvidos e implementados. O método baseia-se na maximização de uma função objetivo medida em função da variação de parâmetros que afetam a dinâmica não-linear da máquina. Nestes estudos, foi utilizada a eficiência de injeção como função objetivo e as forças de 21 famílias de sextupolos disponíveis no Sirius como parâmetros de variação. Restrições e simplificações adicionais podem reduzir o número de graus de liberdade do problema para uma faixa entre 9 e 17. O processo de otimização foi aplicado ao ponto de operação nominal da máquina, que já apresentava abertura dinâmica suficientemente grande para uma injeção de elétrons com alta eficiência, mas que apresentava grandes variações pulso-a-pulso, indicando que havia espaço para melhoria. Além do ponto de operação nominal, também foi aplicado o método a pontos de operação com sintonia maior, em que a eficiência de injeção não era tão alta, mas que apresenta vantagem em relação à estabilidade de órbita, por apresentar um fator de amplificação de órbita menor. O processo de otimização levou a uma mudança para um novo ponto de operação nominal, com sintonia maior e maior estabilidade de órbita.

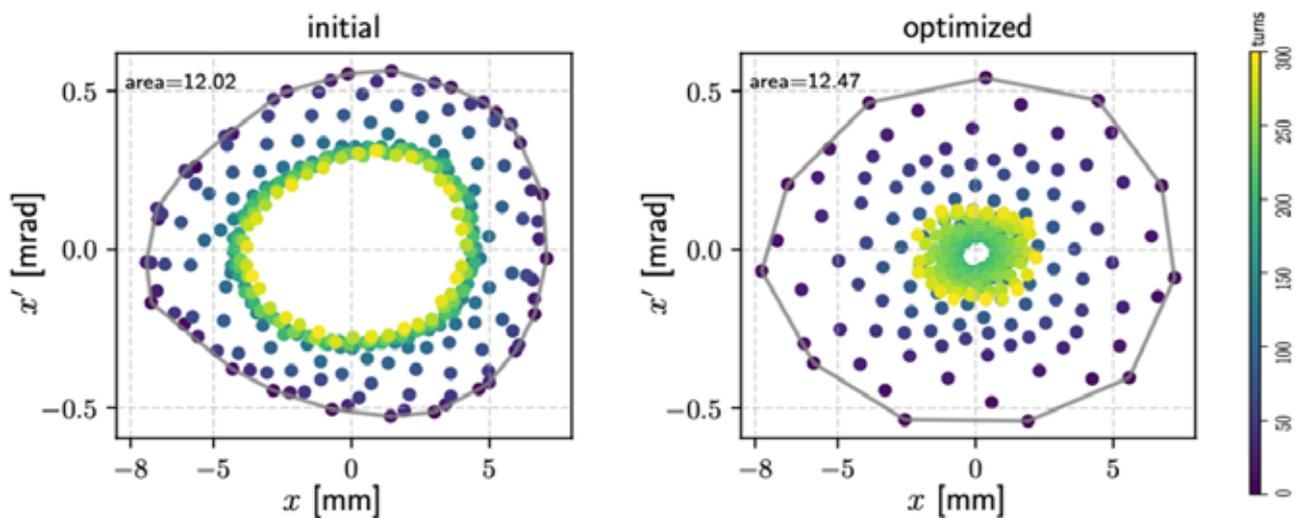


Figura 65: Medida do espaço de fase horizontal no novo ponto de operação, com sintonias $n_x = 49.16$ e $n_y = 14.22$. A medida é feita em um trecho reto de alto beta. A escala de cores mostra a posição do feixe no espaço de fase em função do número de voltas no anel após sofrer um kick.

Manipulação do espaço de fase

Um novo método semi-analítico e autoconsistente foi desenvolvido para calcular a distribuição longitudinal estacionária de um feixe de elétrons em anéis de armazenamento com perfil de preenchimento arbitrário e sob a influência de campos eletromagnéticos externos provenientes de cavidades de RF, além de campos autoinduzidos, resultado da interação do feixe com a câmara de vácuo (impedâncias). Com esse formalismo se pode calcular a efetividade de cavidades de harmônico mais alto no alongamento dos pacotes para condições genéricas de perfil de preenchimento, corrente armazenada e parâmetros geométricos da cavidade, permitindo avaliar o aumento do tempo de vida da máquina. Os resultados estão sendo preparados para submissão a periódico científico.

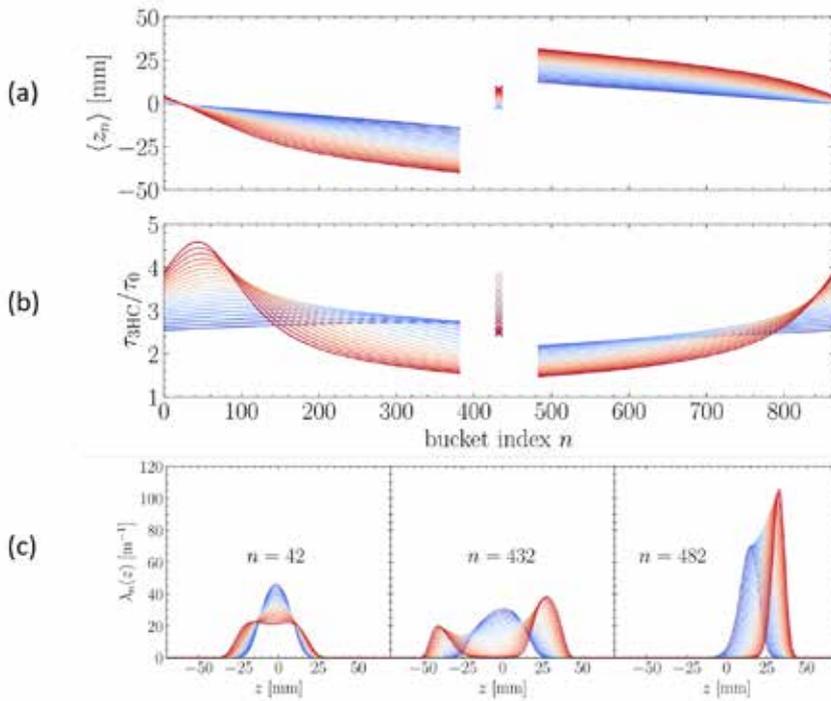


Figura 66: Simulação para um feixe de 350 mA no Sirius com preenchimento não-uniforme: um pacote central com corrente de 2mA seguido de 50 pacotes vazios de cada lado e o restante da corrente uniformemente distribuída nos pacotes restantes. As figuras mostram: (a) o centroide dos pacotes, (b) fator de aumento do tempo de vida induzido pela cavidade de terceiro harmônico prevista para ser instalada no Sirius e (c) os perfis longitudinais de alguns pacotes. Cores distintas correspondem a diferentes desintonizações da cavidade de terceiro harmônico, desde 30kHz, em vermelho, até 50kHz, em azul. Todas as fontes de impedância do anel de armazenamento foram consideradas nesse cálculo.

Diagnóstico do espaço de fase

A linha de luz CARCARÁ-X foi projetada para permitir a medida da emitância do anel de armazenamento do Sirius através da medida do tamanho do feixe de elétrons na saída de 3.5 mrad do dipolo B1. A formação da imagem do feixe de elétrons se dá através de um sistema ótico cujo elemento principal é um espelho toroidal de multicamadas que focaliza e seleciona os raios-X de 11 keV e os focaliza, formando uma imagem do feixe a uma distância de 34 m da fonte, com magnificação de 1:1. A imagem do feixe é detectada em um DVF (dispositivo visualizador de feixe) de alta resolução que contém uma tela fluorescente e uma câmera CCD. Neste semestre foram implementadas melhorias para ajuste remoto micrométrico do foco da câmera além de calibrações para possibilitar a visualização do feixe e a medida de tamanho. Os ajustes ainda estão em andamento, mas já possibilitaram a visualização contínua do feixe de elétrons a partir do sistema de controle dos aceleradores.

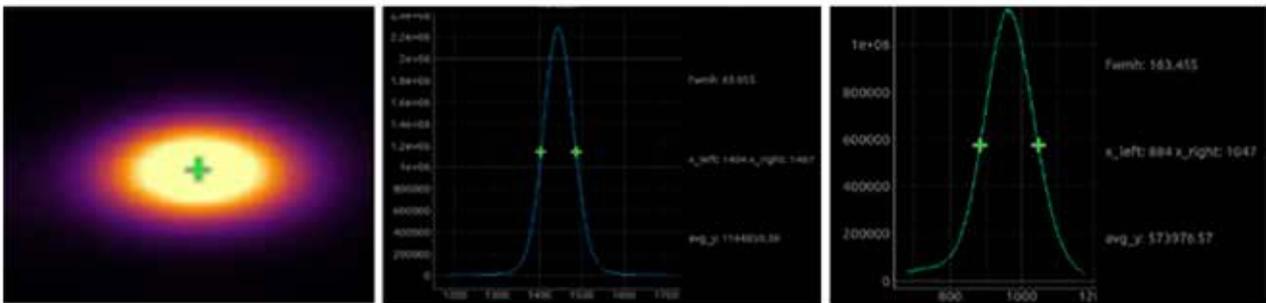


Figura 67: Imagem do feixe gerado na linha CARCARÁ-X e medida do tamanho horizontal e vertical.

Linhas de Luz e Laboratórios de Apoio

No primeiro semestre de 2023, houve avanços na montagem das linhas SAPUCAIA e QUATI, no comissionamento das linhas MOGNO, SABIÁ, PAINEIRA e CEDRO, além de novos desenvolvimentos e validação de métodos e novos modos experimentais nas 6 linhas em operação regular para usuários. Neste momento há medidas experimentais acontecendo em 10 linhas de luz. A seguir, são apresentados alguns dos destaques das 14 linhas da fase 1 do Sirius.

Linha de Luz MANACÁ

Em 2023 a linha de luz MANACÁ abriu as portas a usuários de moléculas pequenas e o potencial do Sirius para a determinação da estrutura desse tipo de amostra foi atestado por especialistas de diversas instituições do Brasil, Argentina e Uruguai. A demanda por esse tipo de experimento é alta e pode beneficiar dezenas de grupos no Brasil e América Latina. Esses avanços trazem novas possibilidades de experimentos e abrem a linha de luz MANACÁ para novas áreas de pesquisa.

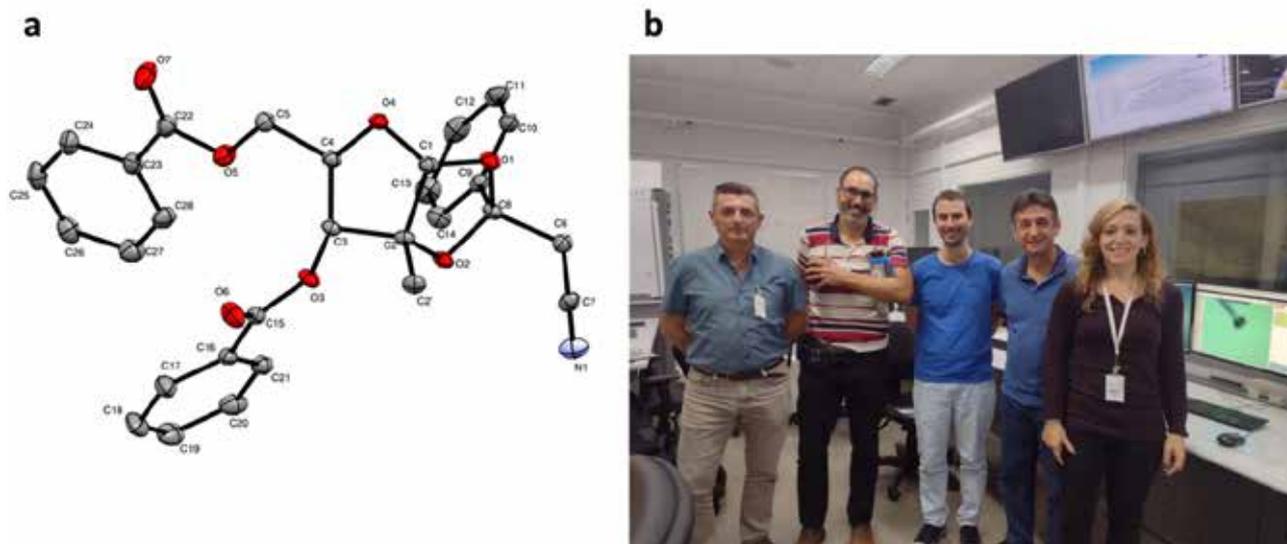


Figura 68: Estrutura de molécula pequena e visita de especialistas à linha de luz MANACÁ. A) a primeira estrutura de molécula pequena foi obtida no final de 2022 em testes utilizando cristais produzidos pelo LNBio. Os resultados foram publicados em março de 2023 (Naciuk et al., *Front. Chem.* 11, 2023). B) pesquisadores referência na área de cristalografia de moléculas pequenas realizaram experimentos na linha de luz MANACÁ para comprovar o potencial da linha para esta área e propor melhorias. Durante os testes vários resultados de alta qualidade foram obtidos. Da esquerda para direita: Prof. Javier Ellena (USP, São Carlos), Prof. Leopoldo Suescun (Udelar, Montevideo), Dr. Andrey Nascimento (MANACÁ/LNLS), Prof. Alejandro Ayala (UFC, Fortaleza) e Prof. Florencia Di Salvo (UBA, Buenos Aires).

Linha de Luz CATERETE

O método de imagem por difração de raios X coerente (CDI) foi implementado na linha de espalhamento coerente Cateretê, permitindo a geração de imagens tridimensionais de amostras grandes com resolução limitada apenas pelo comprimento de onda. O padrão de uma amostra teste de ouro com largura de 25 micrometros foi obtido através da coleta de um único padrão de espalhamento coerente. O objeto real foi reconstruído aplicando um algoritmo de recuperação de fase obtendo uma imagem tridimensional com resolução de 156 nm (Figura 69). O grande campo de visão de CDI supera uma limitação principal de estudos anteriores de CDI, onde apenas amostras pequenas podiam ser analisadas.



Figura 69: Reconstrução tridimensional da imagem do espaço real obtida pelo método CDI implementado na linha de luz de espalhamento coerente do Sirius. O objeto tem 25 micrometros de largura e resolução de 156 nanômetros.

Linha de Luz EMA

Em março de 2023 um novo magneto supercondutor que permite atingir campos magnéticos de até 11T e temperaturas tão baixas quanto 0.5 K foi instalado na linha de luz EMA. Este equipamento é único no mundo pois possui um espaço de amostra compatível com células de bigorna de diamante, permitindo assim combinar as condições extremas de temperatura e campo magnético com pressões tão altas quanto 300 GPa. Neste setup poderão ser realizadas medidas de difração de raio X e espectroscopia de absorção de raio X abrindo assim oportunidades únicas para pesquisa explorando o diagrama de fase de materiais em condições extremas.



Figura 70: Foto do ima supercondutor de 11T instalado na linha EMA.

Linha de Luz IPE

A estação RIXS teve progressos significativos no comissionamento técnico. Validou-se a rotação do espectrômetro, realizada a focalização do espelho elipsoidal (M7), o alinhamento fino da grade de difração do espectrômetro, a calibração em energia do detector e o processamento de imagens pelo método de centroide de fótons individuais. Com estes avanços, foi possível reduzir a resolução de 200 meV para 120 meV, que permite o início de experimentos científicos. Finalmente, identificou-se que o limitante da resolução é a focalização dos espelhos M1 e M4, que será otimizada em breve.

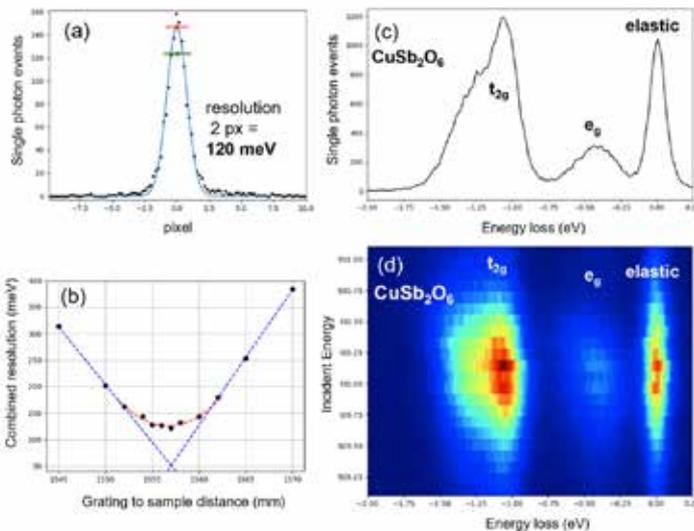


Figura 71: (a) Espectro RIXS de multicamada apresentando a melhor resolução de 120 meV a temperatura ambiente. (b) curva focal mostrando a resolução combinada medida para a grade em diferentes distâncias da amostra. (c) Espectro RIXS de uma amostra de CuSb₂O₆ mostrando excitações de campo cristalino distinguíveis da linha elástica e baixo ruído com aquisição de 25 min. (d) Mapa de energia RIXS com 21 espectros medidos em diferentes energias incidentes com tempo de aquisição total de 9h.

Linha de Luz CARNAUBA

Utilizou-se uma estrela padrão Siemens, cujos traços mais finos são de 15 nm no círculo mais interno, para caracterizar a resolução final na estação TARUMÃ da linha CARNAUBA. A reconstrução da pticografia de raios-X da fase e amplitude melhora a resolução espacial em comparação com o mapa de fluorescência de raios-X, medidos simultaneamente. Avaliando a correlação entre imagens (*Fourier Shell Correlation - FSC*) para dois conjuntos de dados independentes, a resolução espacial atinge 12 nm de acordo com o critério de $\frac{1}{2}$ bit. Isto demonstra que a resolução espacial e estabilidade já atingem os valores de projeto.

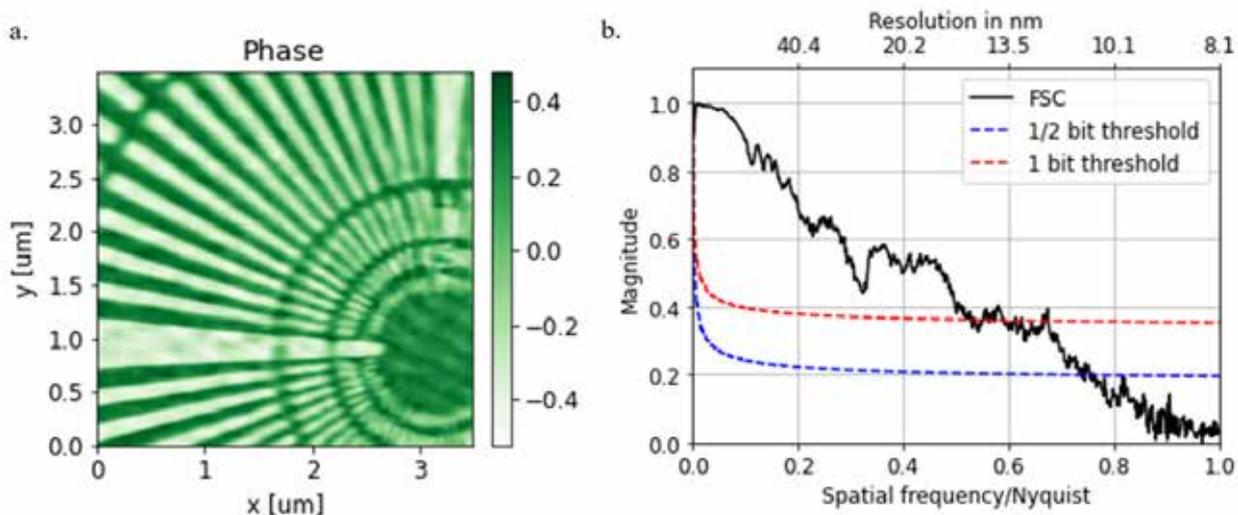


Figura 72: Reconstrução pticográfica da estrela Siemens. (a) Zoom na porção central da imagem, mostrando as estruturas mais finas da estrela, (b) Análise FSC e comparação com os critérios de limiar.

Linha de Luz MOGNO

A instalação do PIMEGA 135D, principal detector da MOGNO, foi realizada na segunda quinzena de maio de 2023. Esse é o primeiro detector deste modelo, com sensores de CdTe, instalado no Sirius. O detector está passando por diversos testes de funcionamento, para validação do seu desempenho. Esses testes são realizados pelo grupo de detectores (DET) com o detector instalado e conectado à toda a infraestrutura da linha, na sua condição final de trabalho. Assim que essa fase estiver completa, testes com amostras reais e de altas energias da Mogno (39 e 67KeV) serão iniciados.

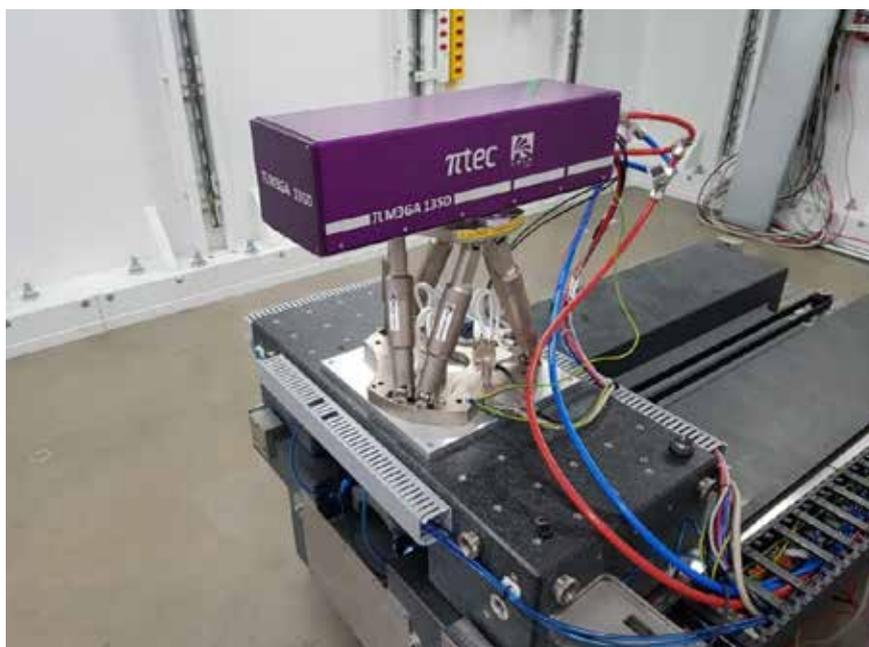


Figura 73: PIMEGA de CdTe instalado na linha Mogno

Linha de Luz IMBUIA

Dentre os principais avanços da linha IMBUIA neste semestre está o marco de desempenho da estação IMBUIA-nano a qual opera hoje de acordo com as especificações de projeto desta infraestrutura. Mesmo em operação com corrente de 100 mA (< 30% da corrente máxima prevista no Sirius), a estação IMBUIA-nano é capaz de gerar dados espectrais de nano-FTIR até 50% melhores em SNR do que os medidos no antigo acelerador UVX com 250 mA. Além disso, confirmou-se uma grande estabilidade na fonte de infravermelho permitindo experimentos com alto grau de reprodutibilidade. Em teste inicial em filme de 60 nm de blenda de Ps-PVAc/Si, a estação apresentou excelente desempenho na identificação das fases químicas em nanoescala desta blenda polimérica, como é apresentado na figura abaixo.

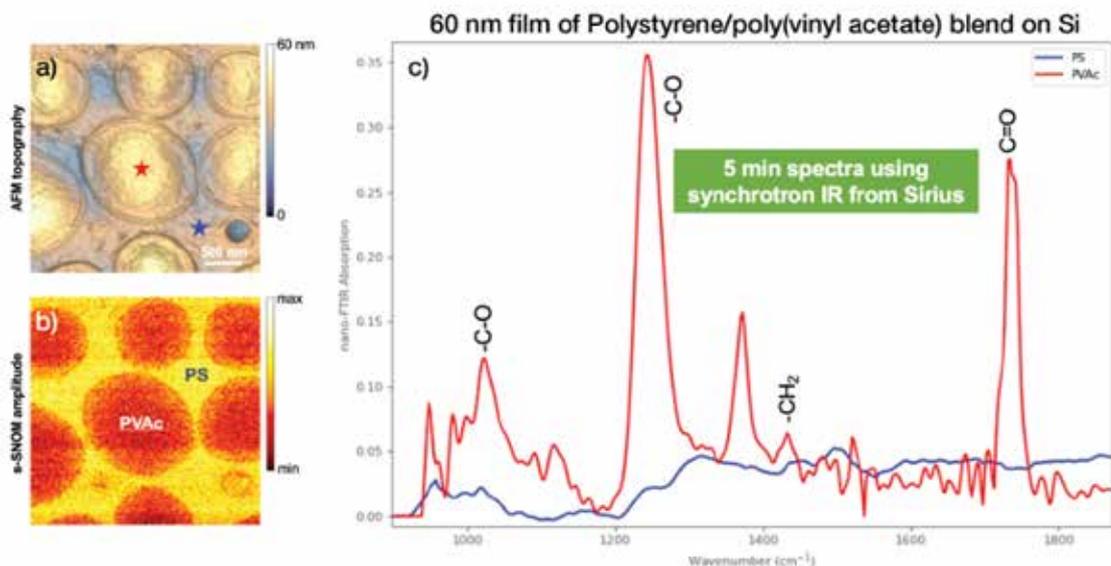


Figura 74: Medida de nano-FTIR em blenda polimérica de 60 nm de espessura de Poliestireno-Poli(vinil acetato) sobre Silício. a) Morfologia da superfície da blenda acessada por Microscopia de Força Atômica (AFM) e b) respectiva imagem de s-SNOM em banda larga utilizando infravermelho sincrotron, já com excelente contraste entre as fases do filme. c) Espectroscopia pontual com resolução de 25 nm tomadas nas marcações (estrelas) em a). Espectros de 5 minutos foram suficientes para acessar de forma decisiva as bandas de absorção das duas fases, um marco importante para a análise de nanomateriais orgânicos no Sirius.

Linha de Luz PAINEIRA

A PAINEIRA começou a operar de forma otimizada no modo de alta-resolução. Ou seja, com a aquisição dos dados em modo *fly-scan*, de forma que toda a movimentação do detector no difratômetro de raios-X e a obtenção dos sinais de intensidade pelo detector MAC da FMB Oxford operem dentro do menor tempo possível.

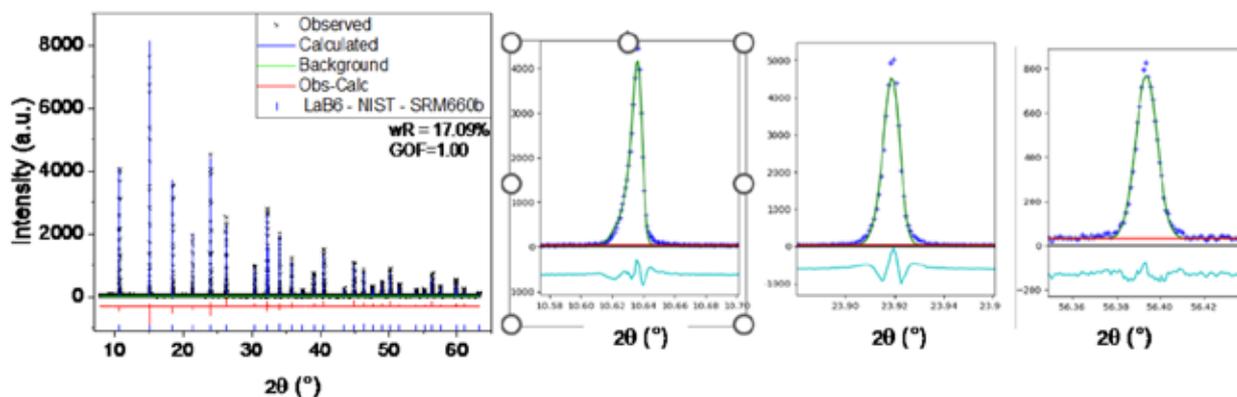


Figura 75: Refinamento Rietveld do padrão de difração de raios X da amostra padrão LaB6 (Nist 660b) obtido na linha Paineira do Sirius: a) padrão completo refinado e com os valores dos erros wR_p e GOF, atestando a qualidade do refinamento e b) destaque de três picos do difratograma raios-X da em diferentes posições angulares mostrando a determinação do perfil de pico.

Linha de Luz CEDRO

O primeiro semestre de 2023 foi dedicado às montagens para a entrega correta do feixe na janela de saída, visto que foi encontrado um problema de desvio angular do feixe na janela óptica que separa o vácuo do anel de armazenamento e linha de luz. Para corrigir tal erro, foi realizada uma montagem com uma janela adicional para compensar o desvio da primeira. Em paralelo, algumas melhorias foram executadas na câmara de espelhos e após a montagem final e alinhamento óptico, o feixe síncrotron foi visualizado na janela de saída conforme o esperado (imagem abaixo).



Figura 76: Feixe síncrotron visualizado na janela de saída da linha Cedro após ajuste de janela óptica.

Linha de Luz QUATI

A instalação do *front-end* da linha de luz QUATI está quase concluída. Um destaque importante é a instalação do espelho colimador M1, posicionado dentro da blindagem para maximizar o fluxo de fótons e controlar a máxima energia que chega à estação experimental. Atualmente, o M1 está passando pelo processo de *baking*. A expectativa é de que até setembro de 2023, a instalação do *front-end* esteja completamente finalizada, permitindo assim ter o primeiro feixe no primeiro elemento da linha ainda no segundo semestre deste ano.

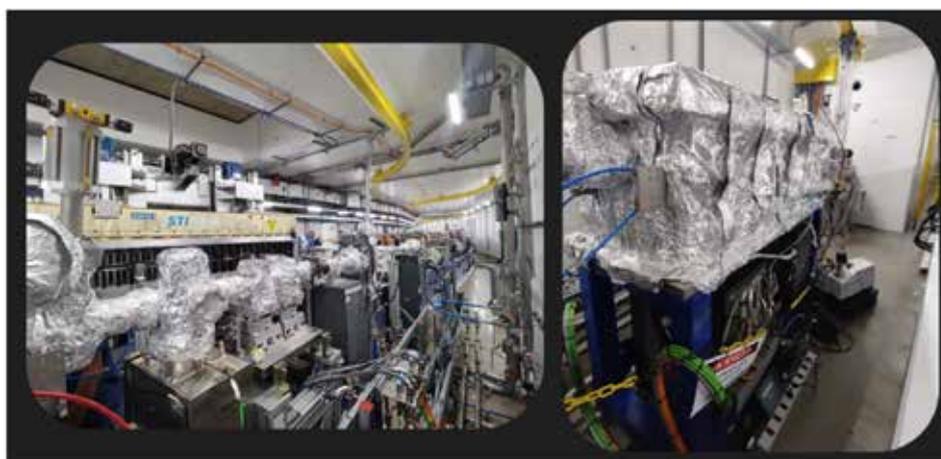


Figura 77: Componentes da linha QUATI instalados dentro da blindagem (Esquerda); câmara com M1 na posição (direita).

Linha de Luz SAPE

Foi instalado na estação experimental da linha SAPE um novo conjunto de lentes (*Scanned Angle Lens SAL*) que irá possibilitar experimentos de ARPES sem a necessidade de inclinação da amostra, com a possibilidade de um mapeamento 2D de 30 graus no cone de aceitação angular (ângulo polar e de inclinação), como na figura abaixo. Isso permitirá experimentos ARPES mais eficientes e rápidos quando essa estação experimental for instalada na linha SAPE, assim que essa estiver disponível.

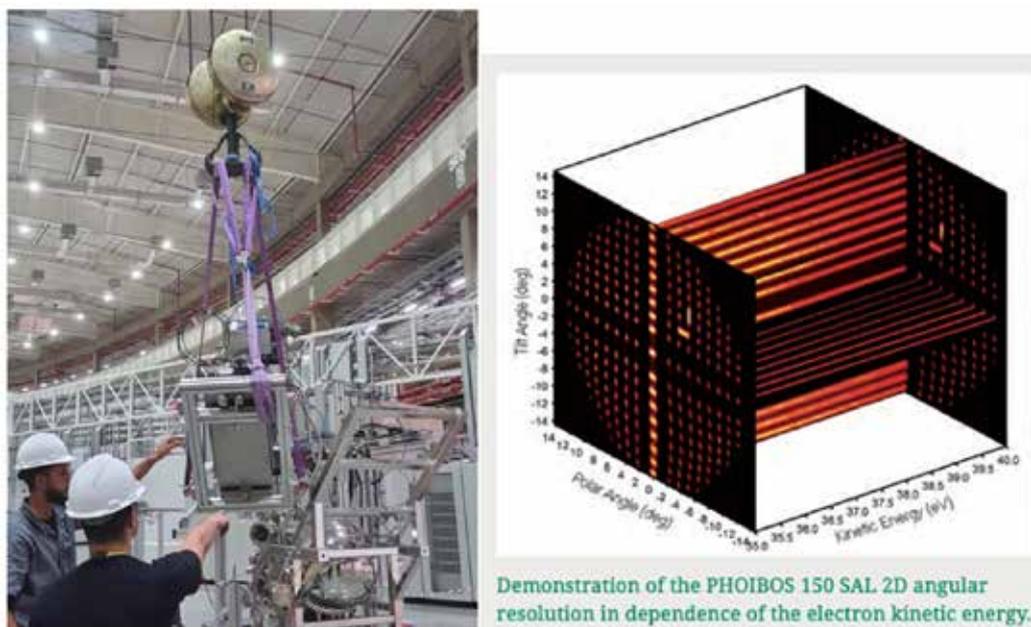


Figura 78: Instalação do novo conjunto de lentes (Scanned Angle Lens SAL) que irá possibilitar experimentos de ARPES sem a necessidade de inclinação da amostra

Linha de Luz SAPUCAIA

Neste primeiro semestre os esforços foram centrados no término da montagem da infraestrutura das cabanas A e B, além da conclusão da montagem e colocação de mobiliário da sala de controle e antessala de preparação de amostras (Figura 79a). Foi também concluído o *design* da mesa experimental com todos os diferentes *setups* que a linha abordará, com destaque para os sistemas automatizados com braços robóticos para amostras líquidas e sólidas. Também nesse período foi concluída a montagem do *frontend* da linha, e também a colocação da nossa fonte de raios-X, chamada PAPU (*Prototype Adjustable Phase Undulator*) (Figura 79b).

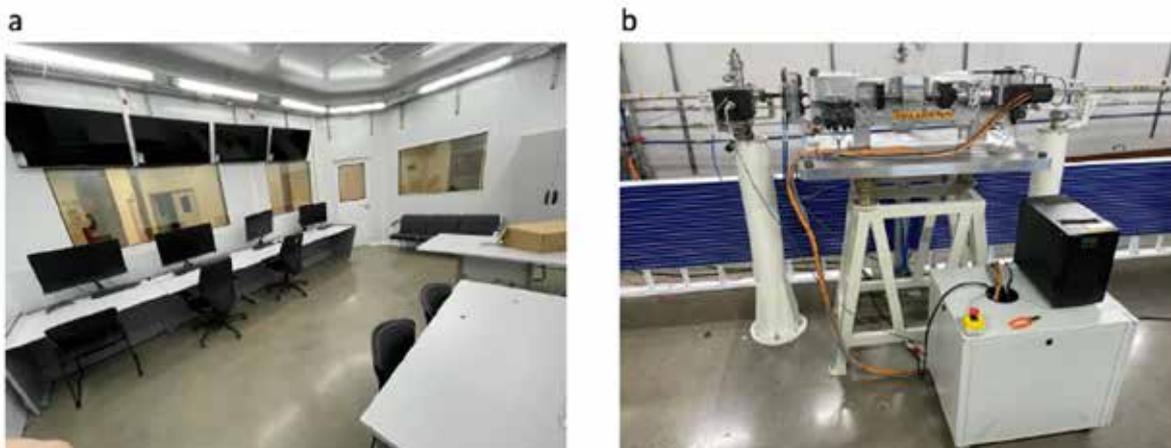


Figura 79: a) Sala de controle da linha Sapucaia e b) imagem do PAPU (Prototype Adjustable Phase Undulator).

Linha de Luz SABIA

Na linha SABIA foi obtida a primeira imagem de microscopia de fotoemissão. A parte circular da imagem, onde o ruído da medida é mais notável, corresponde a um campo de visão de 30 micrometros. As partes mais escuras são nanoilhas de permalloy em um arranjo conhecido como gelo de *spin* artificiais, produzidas no Laboratório de Magnetismo e Baixas Temperaturas, LMBT, do Instituto de Física Gleb Wataghin (IFGW) Unicamp. São hexágonos com lado de ~1 micrometro em uma rede que cobre uma região quadrada de 15 x 15 micrometros.

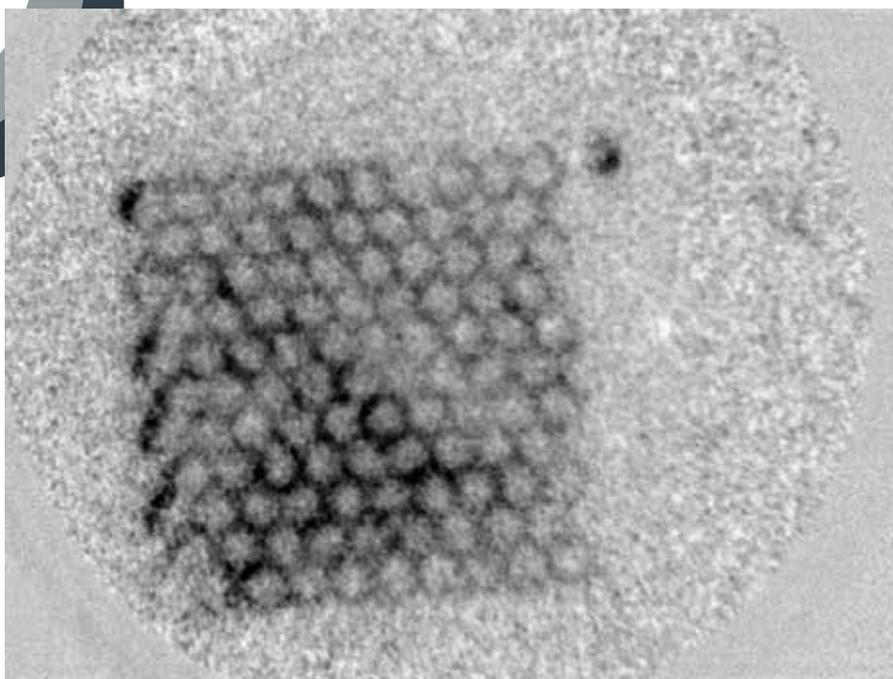


Figura 80: Primeira imagem de microscopia de fotoemissão na linha SABIA

Linha de Luz JATOBA

A linha de luz JATOBA teve os avanços concentrados no estudo e especificação dos espelhos. O *design* do primeiro espelho, por não ter uma figura óptica fixa, convergiu para um espelho cilíndrico adaptativo “dobrável” (em inglês, *bendable mirror*). O alto fluxo de fótons e a homogeneidade na qual o feixe deve chegar à estação experimental são críticos nesse projeto, assim, esses parâmetros foram priorizados frente ao tamanho e formato que o feixe apresenta na posição da amostra. Dentre os desafios ainda em discussão, está à concepção da mecânica de flexão do substrato, além da integração dessa estrutura de força com a de metrologia e de alinhamento fino do mecanismo interno. Já o segundo espelho (M2) da linha JATOBA é um espelho plano com revestimento W/Si para monocromatização do feixe, sem necessidade de um mecanismo de *bender*. Sua mecânica segue o padrão de mecanismos flexíveis de precisão adotados no Sirius.

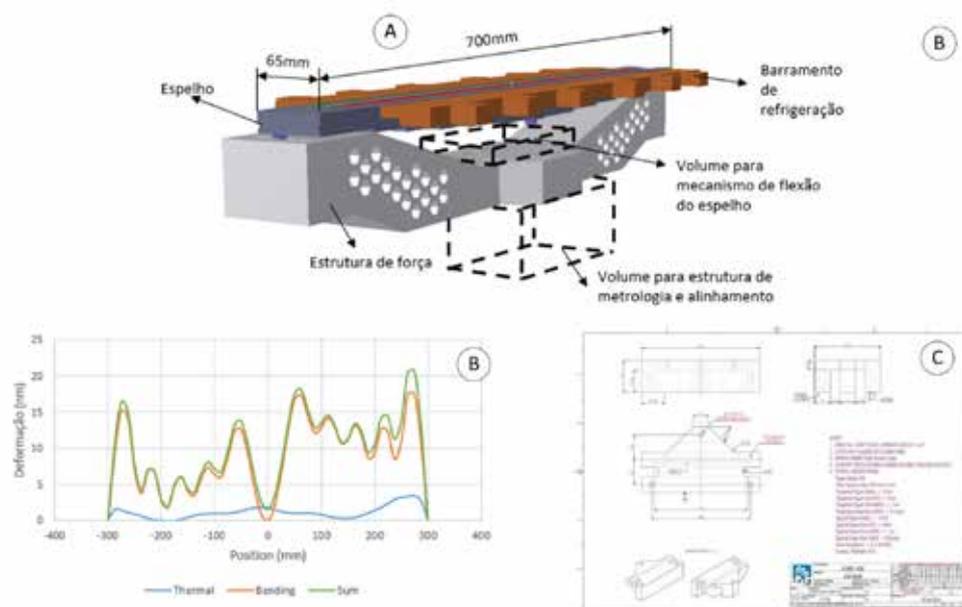


Figura 81: A - Layout de conjunto para o primeiro espelho (M1) da linha JATOBA; B - Deformações previstas para o M1; C- Desenho técnico do cristal de Silício 100 enviado ao fornecedor externo do segundo espelho (M2).

O projeto também avançou em aspectos de infraestrutura, com a conclusão do projeto executivo da cabana ótica, deixando este projeto apto a seguir com a contratação das etapas de fabricação e instalação, o que não foi levado adiante devido as limitações orçamentárias que impactaram o projeto Sirius no período.

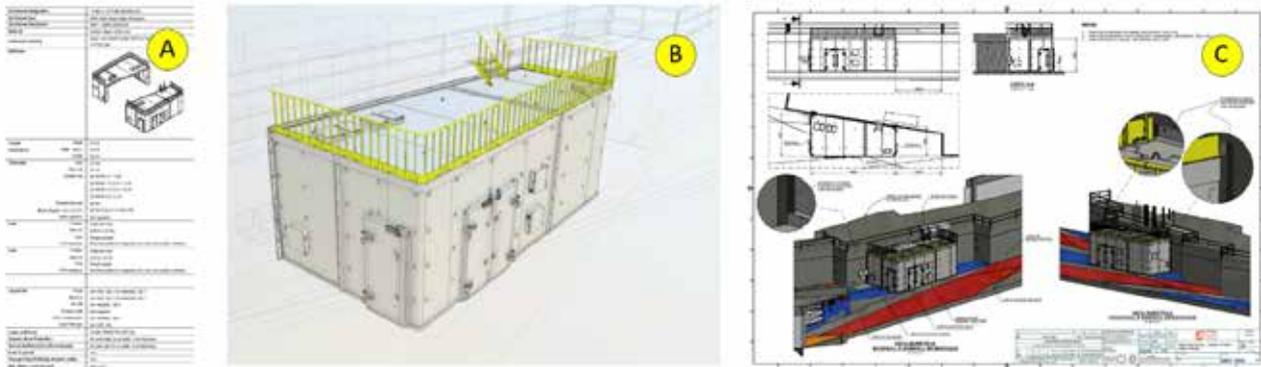


Figura 82: A – Tabela de parâmetros de projeto da cabana da linha JATOBÁ. B – Vista isométrica da cabana; C – Caderno de desenhos do projeto de fabricação da cabana pela empresa MECPRO3D.

LCTE - Laboratório de condições termodinâmicas extremas

No LCTE (Laboratório de Condições Termodinâmicas Extremas) entrou em operação no começo do ano um estereomicroscópio Leica acoplado a uma *glovebox*, que permite a visualização externa nas oculares enquanto uma amostra é manipulada internamente sob atmosfera inerte. É de vital importância para o carregamento de amostras sensíveis a umidade ou oxigênio dentro de células de pressão do tipo bigorna de diamantes, exemplificado no Programa Bolsas de Verão, cujo projeto envolveu carregar lítio metálico (que entra em combustão espontânea em contato com oxigênio) nessas células.



Figura 83: Estereomicroscópio Leica acoplado a uma *glovebox*, em operação no LCTE

LAM - Laboratório de amostras microscópicas

No final do primeiro semestre de 2023 o LAM recebeu dezenas de usuários externos e internos. Entre as metas alcançadas durante este período, destaca-se a finalização da instalação do sistema de combate a incêndio da sala do PFIB. Em relação à preparação de amostras usando o FIB, foi realizada a importação do gás Xenônio via CNPEM e atendimento de todas as propostas que dependiam exclusivamente deste processo de preparação.

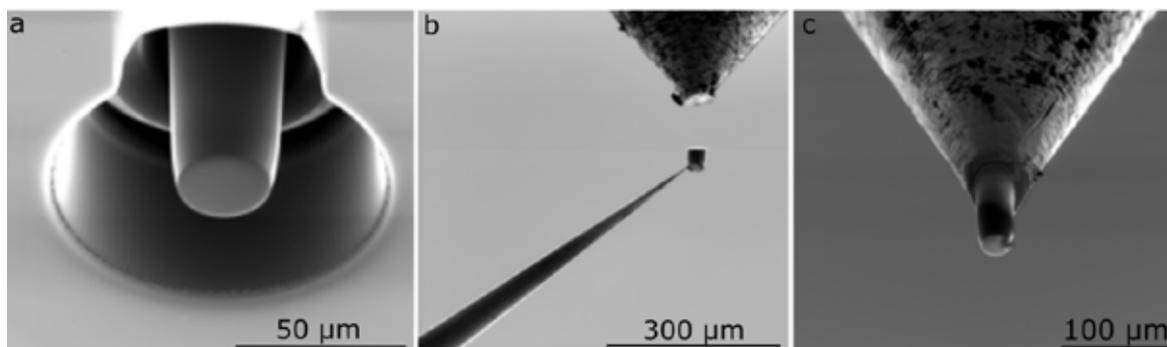


Figura 84: Processo de preparação de amostras usando o microscópio de feixe duplo feixe (PFIB). (a) Pilar esculpido a partir da superfície da amostra com o feixe de íons de Xenônio. (b) Em seguida o pilar é removido usando o nanomanipulador, e (c) soldado no Carpin da linha CARNAUBA.

L2D - Laboratório de sistemas bidimensionais

Atrasos na entrega da sala limpa do L2D não permitiram a mudança da infraestrutura de fabricação de amostras bidimensionais. Entretanto, as obras foram iniciadas e a previsão de entrega é para o segundo semestre. Na Figura 85 estão imagens com o andamento do projeto do L2D.



Figura 85: LAM-L2D: (a) projeto e (b) status da sala limpa do L2D em construção.

LCRIO - Laboratório de amostras criogênicas

As duas principais atividades realizadas no LCRIO durante o primeiro semestre estão relacionadas às otimizações do processo de *plunge freeze*, ou seja, o congelamento rápido de amostras biológicas mantendo a mesma em estado amorfo e os cortes criogênicos de tecidos que estão agora sendo realizados, inclusive, em ambiente NB2 conforme mostra a imagem abaixo.

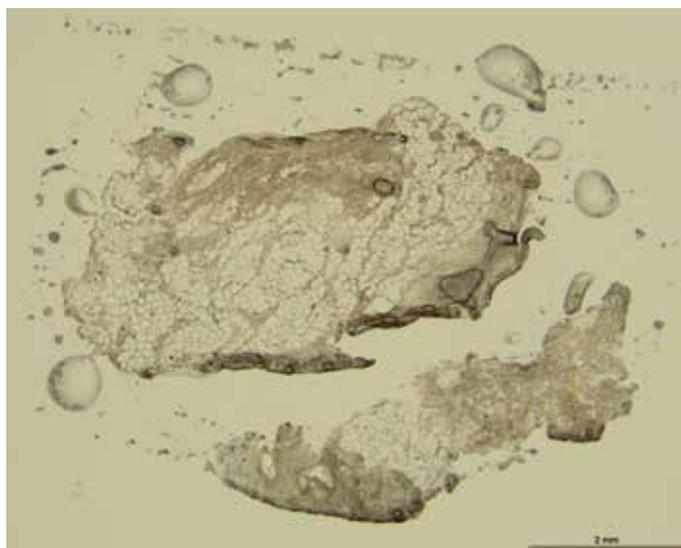


Figura 86: Imagem de corte de espessura de 10 micrômetros feito no criostato do LCRIO de amostra hiperplasia ductal extraído de uma biópsia de mama humana.

LCA - Laboratório de ciências ambientais

Dentre as atividades realizadas no LCA está a operação da câmara de crescimento de plantas (*Fitotron, Weiss Technik*), onde são feitas simulações ambientais com controle de luminosidade, ciclos de dia e noite, umidade, CO₂ e intensidade de vento, parâmetros que são críticos para o cultivo de diferentes plantas. A câmara Fitotron foi instalada no final do segundo semestre de 2022 e sua operação iniciada no primeiro semestre de 2023, já tendo acolhido vários usuários.



Figura 87: Cultivo de feijão, em cápsulas rhizobox, enriquecido com Se e Cu, em ciclo noturno na câmara de crescimento de plantas Fitotron do LCA.

LMF - Laboratório de materiais funcionais

O LMF está sendo implementado e é um laboratório de apoio para experimentos realizados nas linhas de luz do Sirius. Dois equipamentos de grande porte já foram instalados: uma capela do tipo *walk-in*, com grande poder de exaustão e à prova de fogo, que será usada para reações com gases tóxicos ou inflamáveis; e uma *glovebox* que será usada para preparação de amostras que são sensíveis a oxigênio e/ou umidade e precisam ser manuseadas em ambiente de atmosfera controlada e inerte. A *glovebox* já foi requisitada por usuários externos e utilizada para a preparação de amostras de uma proposta aprovada para a linha CARNAÚBA.



Figura 88: Capela Walk-in onde o experimento e o operador trabalham com exaustor ativo (esquerda); Glovebox para amostras sensíveis, pode ser usada por até 2 pessoas (direita).

LCOC - Laboratório de corte e orientação de cristais

No LCOC foram posicionados 3 equipamentos: um gerador de raios-x Rigaku, dotado de um anodo de cobre rotatório (8KeV monocromático) e um detector MARCCD (para difração de raios-x), voltado principalmente para caracterização de detectores, já que o feixe colimado tem tamanho sub-pixel dos sensores do detector PIMEGA ; um gerador de raios-x Siemens, com a cabana de proteção radiológica, para alinhamento de cristais (amostras) e testes com detectores em alta energia; e um difratômetro Panalytical usado no alinhamento e caracterização cristalina de amostras. Atualmente estão sendo providenciados pelos grupos de apoio as infraestruturas de água, elétrica e proteção radiológica para que esses equipamentos possam ser ligados e se tornem disponíveis para uso.



Figura 89: Setup dos novos equipamentos do LCOC

LNB - Laboratório Nanobio

O Laboratório Nanobio (LNB) está sendo implementado e, atualmente, encontra-se na etapa de montagem do mobiliário e instalações de elétrica e hidráulica. O laboratório será utilizado para sínteses químicas em experimentos realizados nas linhas de luz do Sirius e desenvolvimento de pesquisa interna. Após comissionamento das capelas de exaustão e liberação da infraestrutura, os equipamentos e materiais serão transferidos do laboratório antigo.



Figura 90: Montagem do mobiliário e instalações de elétrica e hidráulica (esquerda); capelas de exaustão (direita).

LQ - Laboratório Químico

O Laboratório Químico (LQ) foi liberado para utilização em fevereiro de 2023. Houve a entrega do sistema de exaustão externo e comissionamento das capelas de exaustão. Na segunda quinzena de fevereiro de 2023, foi realizada a mudança da antiga instalação para o novo laboratório. O laboratório se encontra em plena operação, atendendo aos usuários internos e externos nas manipulações químicas, preparação e adequação de amostras para as diferentes linhas de luz do Sirius.



Figura 91: Infraestrutura aberta (esquerda); capelas de exaustão em operação (direita).

Laboratório Nacional de Máxima Contenção Biológica (LNMCB-NB4)

Biologia Molecular de Vírus e Outros Patógenos

Foram iniciados os estudos de biologia molecular e estrutural do vírus Sabiá (SABV), partindo da clonagem, expressão e purificação de suas proteínas. O genoma do SABV é composto de dois fragmentos que codificam 4 polipeptídios. Destes foram comprados genes sintéticos otimizados para expressão em procariotos para 3 alvos iniciais, o DNA que codifica para a glicoproteína de superfície (GPC), a nucleoproteína (NP) e o fragmento que codifica para a proteína de matriz Z ligante à zinco. Para proteína Z foram desenhadas duas construções, uma contemplando somente o domínio central estruturado ligante à zinco (Zshort - 5,6 KDa), e outra com a proteína Z completa com o domínio central junto das regiões intrinsecamente desordenadas nas extremidades amino e carboxi – terminais (Zfull - 11 KDa), e assim clonadas em duas cepas bacterianas de expressão, BL21 (DE3) e Rosetta-gami 2 (DE3) pLysS. Em seguida foi realizada uma triagem de expressão em pequena escala e testadas variações de temperatura e tempo de expressão, mostrando que a construção de Zshort apresenta uma expressão superior em baixa temperatura (18° C) mas com baixa solubilidade. As amostras da triagem para a construção Zfull também apresentaram uma expressão superior em baixa temperatura, mas com uma maior solubilidade e presença da proteína na fração solúvel e retida na resina. Estas condições estão sendo replicadas para a expressão em larga escala para os demais experimentos de caracterização estrutural. Os demais alvos (GPC e NP) estão com o processo de clonagem em progresso paralelamente.

Laboratório de Treinamento

No primeiro semestre de 2023, iniciou-se as tratativas para definição de local, elaboração de projetos e contratação de empresa construtora para execução do laboratório de treinamento NB4 do CNPEM. Este laboratório também será utilizado para treinamento de equipes para trabalhos em NB3, e marcará o início das atividades de treinamentos de pesquisadores internos.

Durante o semestre, após a definição do local a ser construído (antiga sala do conselho do CNPEM, ao lado do LNBio), foram elaborados e validados os projetos, além da realização do processo de contratação da construtora. Esta contratação encontra-se na etapa final, e há a previsão de que a construção ocorra no prazo de 60 dias, após a assinatura do contrato.

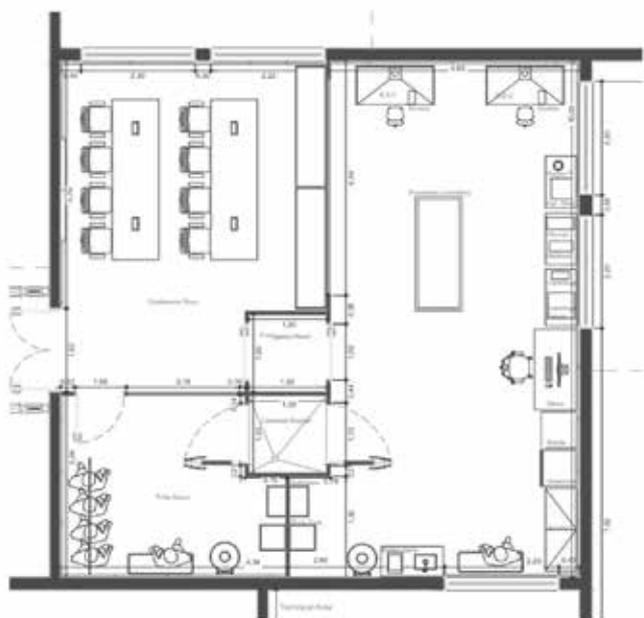


Figura 92 - Imagem da planta de construção do laboratório de treinamento NB4

Ademais, foram realizados alinhamentos técnicos para definição da paramentação a ser utilizada neste laboratório e segue em definição o sistema de ar respirável, para ser adquirido e executado nos próximos meses.

Contratação de gerenciadora

Em março de 2023, foi emitida a primeira ordem de serviço para a gerenciadora contratada pelo CNPEM, para apoiar na contratação e coordenar o desenvolvimento dos projetos do novo complexo de laboratórios a ser construído no CNPEM (Projeto Orion).

Durante este semestre, foi desenvolvido também o programa de requerimentos do projeto com base nas premissas científicas desenvolvidas pelo LNBio, nos *workshops* científicos e técnicos realizados no CNPEM, além das experiências obtidas nas visitas realizadas à laboratórios NB4 dos Estados Unidos e Europa, no final de 2022.

Atualmente, está sendo contratado o arquiteto e demais projetistas brasileiros, além de um consultor de NB4 internacional, que permitirão dar início aos projetos nas próximas semanas.

Linhas de Luz e laboratórios

Três linhas de luz e um laboratório operando em ambientes NB1 e NB2 estão sendo programados para compor a estrutura científica que fará parte do LNMCB. As três linhas de luz serão otimizadas para imageamento celular (linha SIBIPIRUNA), tecidos (linha TIMBÓ) e pequenos animais (linha HIBISCO). Já o Laboratório de Amostras Biológicas (LAB) será utilizado para otimização prévia nas preparações de amostras biológicas complexas. Embora avanços tenham ocorrido em todas as três linhas, a frente de trabalho mais avançada corresponde à linha SIBIPIRUNA. As equipes do Sirius estão focadas nesta estação experimental porque as estratégias desenvolvidas nesta linha poderão, possivelmente, ser implementadas de forma análoga às outras linhas. Abaixo são descritos os maiores avanços dentro do semestre para a linha SIBIPIRUNA e para o LAB.

..... Linha de Luz SIBIPIRUNA

A SIBIPIRUNA é uma linha de luz que irá trabalhar na faixa dos raios-X moles, visto que a estação experimental está sendo projetada para gerar imagens tridimensionais de células animais em escala nanométrica. Independente da faixa de raios-X utilizados, busca-se evitar o uso de fixadores químicos, desidratação, agentes de contraste ou seccionamento físico, eliminando modificações morfológicas relacionadas à preparação da amostra. Dessa forma, nesse primeiro semestre, o grupo centrou-se em discussões, simulações e experimentos em outros síncrotrons com o intuito de discriminar e ter clareza qual é o regime de medidas mais adequado para essa estação experimental.

Projeto conceitual do sistema de transferência e posicionamento de amostras

Os desafios da SIBIPIRUNA envolvem a produção de imagens de alta resolução isentas de artefatos, a compatibilização com os requisitos de biossegurança NB4 e a implementação de sistemas adequados para a manipulação e carregamento de amostras. Para endereçar esses desafios, uma abordagem de engenharia de sistemas baseada em modelos (MBSE) está sendo aplicada, focando na coleta de requisitos dos *stakeholders* e na formulação procedimental e sucessiva de cenários de aplicação, resultando em diretrizes de projeto mais precisas. Em paralelo, a equipe do LNLS está desenvolvendo um modelo conceitual da estação, explorando parâmetros ópticos, validando métodos de preparação de amostras e definindo as interfaces físicas entre os subsistemas, alinhados com as diretrizes de biossegurança.

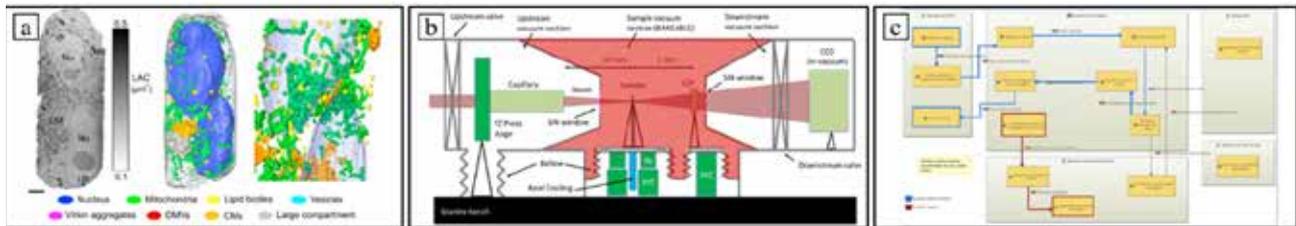


Figura 93: a) Exemplo de imagem a ser obtida na SIBIPIRUNA com corte ortogonal (à esquerda) de uma célula multinucleada inteira e renderização 3D (à direita) das organelas identificadas. Cada organela está codificada por cores da seguinte maneira: núcleo - azul, mitocôndrias - verde, corpos lipídicos - amarelo, vesículas - ciano, vírions - magenta, DMVs - vermelho, CMs - laranja e grande compartimento - cinza, adaptado de Loconte et al., 2021; b) Esquemático dos principais componentes que serão integrados à SIBIPIRUNA e interfaces de físicas entre o ambiente NB4 a linha; c) Operational Architecture Breakdown (OAB) da estação experimental da SIBIPIRUNA construído no software Capella (MBSE).

LAB – Laboratório de Amostras Biológicas

Os Laboratórios de Amostras Biológicas (LAB-NB1/NB2) estão sendo implementados, apresentam-se na etapa de montagem do mobiliário e instalações de elétrica e hidráulica. Os laboratórios serão utilizados para preparação de amostras biológicas em experimentos realizados nas linhas de luz do Sirius. Alguns equipamentos comprados já chegaram e estão armazenados para futuras instalações.



Figura 94: Montagem do mobiliário e instalações de elétrica e hidráulica (esquerda); os equipamentos armazenados no hall do Sirius para futuras instalações no LAB (direita).

Plataforma de Biotecnologia Industrial

A Plataforma de Biotecnologia Industrial (PBI) vai ampliar a infraestrutura de pesquisa e desenvolvimento (P&D) laboratorial expandindo o escopo para além do etanol com o desenvolvimento de microrganismos tanto por evolução adaptativa como por desenho racional para várias aplicações industriais seja na indústria de transformação seja na indústria extrativa. Ela também permite uma abordagem multidisciplinar para o estudo de enzimas técnicas que podem ou não serem produzidas em quantidades relevantes por microrganismos desenvolvidos no CNPEM. Para ambas as atividades a biologia sintética é central, bem como a caracterização precisa e monitoramento de sistemas biológicos em níveis atômicos e moleculares. As atividades de pesquisa e desenvolvimento devem ocorrer em vários tipos de microrganismos, como fungos filamentosos, leveduras e

bactérias e no menor tempo possível, pois ciclos de desenvolvimento de biotecnologias envolvem de alguns anos até uma década. Portanto, há uma demanda clara de paralelização e de instrumentação de alto desempenho (*high-throughput*). A PBI também atende outro importante requisito para atingir relevância industrial, que é a capacidade de testar tais sistemas biológicos em biorreatores com monitoramento e controle dos processos sempre que possível em tempo real.

Em suma, a Plataforma de Biotecnologia Industrial prevê a implantação de infraestrutura de pesquisa voltada para a descoberta, desenho, engenharia de enzimas e microrganismos e o desenvolvimento de processos em níveis de maturidade tecnológica (TRL) de 3 a 5. O foco central é na validação tecnológica, isto é, eliminar os gargalos tecnológicos e não na demonstração da cadeia completa de produção. A plataforma possui dois elementos centrais de implantação: uma infraestrutura de alto desempenho, também conhecida como *high throughput*, para o desenvolvimento de enzimas e microrganismos de relevância industrial e uma infraestrutura de escalonamento.

Neste semestre, considerando os principais equipamentos da PBI, sete já entraram em operação, dois estão aguardando modificações laboratoriais para instalação, três ainda serão entregues ao CNPEM e o restante está sendo submetido a testes de funcionalidade ou comissionamento científico. O módulo mais próximo da operação final inclui os equipamentos destinados a descoberta e desenvolvimento de enzimas e o entendimento dos mecanismos de biocatálise; sendo que aqueles que atendem ao desenvolvimento de enzimas e ao de microrganismos também estão em testes ou operação. Apenas o grupo dedicado ao desenvolvimento de microrganismos e mecanismos metabólicos e/ou processos de sistemas biológicos é que ainda serão entregues ou estão aguardando modificações laboratoriais para serem instalados, a saber: (i) protótipo de sistema automatizado, customizável e modular para evolução adaptativa em condições de crescimento controladas e com a manutenção de culturas em fase exponencial; (ii) Espectrômetro de massas acoplado a cromatografia gasosa; (iii) sistema de sensores automatizados para frascos agitados não customizável, com medidas de concentração celular em tempo real para experimentos de longa duração de evolução adaptativa de microrganismos; (iv) microbiorreatores automatizados de alto rendimento com monitoramento e controle em tempo real para *downscaling* de processos de biorreatores e (v) sistema de controle e monitoramento de fluxo de massa e gases e de parâmetros de processo. A expectativa é que no final de 2023 todos os equipamentos estejam já em operação ou em comissionamento científico.

Plataforma de Combate a Víruses Emergentes

O Projeto de Plataformas de Combate a Víruses Emergentes vem sendo executado na proposta de estruturar novas unidades laboratoriais, além da construção de um Laboratório de Nível de Biossegurança 3, dedicados ao desenvolvimento de antivirais e métodos diagnósticos para o combate a víruses emergentes. Os recursos orçamentários destinados a esta ação foram contratados por meio da Ação de Enfrentamento da Emergência de Saúde Pública de Importância Internacional Decorrente do Coronavírus (Ação 21C0), do Governo Federal.

Durante o primeiro semestre de 2023, foram concluídos os projetos executivos do setor E, nova edificação anexa ao LNBio, pela empresa projetista contratada (MSE). Este setor E contempla laboratórios científicos em NB2, além do Laboratório de Nível de Biossegurança 3. Além disso, os projetos executivos do laboratório NB3 também foram concluídos pela Solufarma, empresa contratada para elaboração dos projetos e construção do laboratório. Todos os projetos foram validados e aprovados pela equipe técnica do CNPEM.



Figura 95 - Vista em 3D do prédio do Setor E.

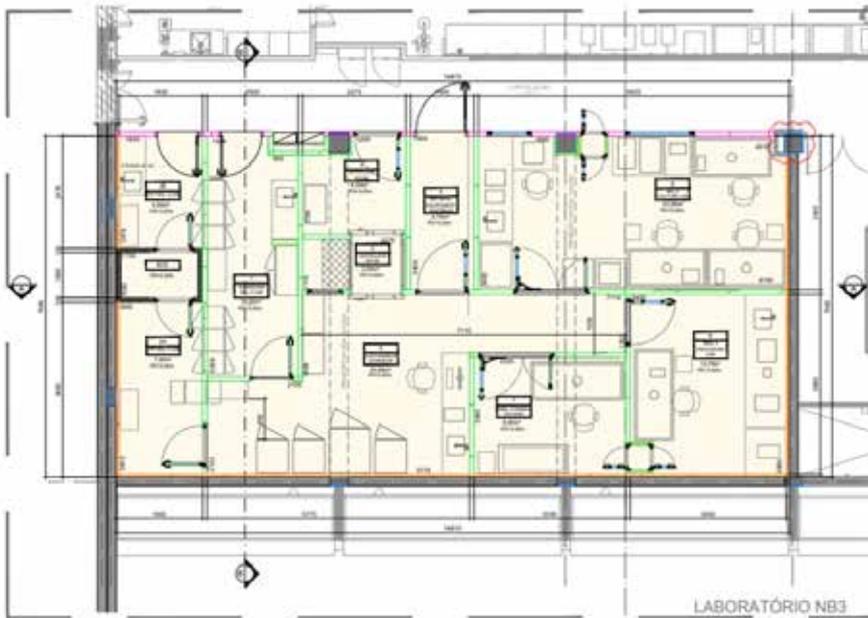


Figura 96 - Planta baixa do laboratório NB3.

Com relação às obras, a construção da edificação do Setor E – laboratórios científicos NB2 – foi substancialmente executada no primeiro semestre de 2023, tendo sido realizada a entrega provisória pela empresa construtora (CAM). Atualmente, a obra encontra-se em vistorias finais de recebimento e comissionamento, para que seja realizado o recebimento definitivo nas próximas semanas.



Figura 97 - Foto do prédio do Setor E.



Figura 98 - Foto da sala onde será montado o laboratório NB2.

Já a construção do laboratório NB3, foi iniciada em fevereiro de 2023 pela Solufarma, após as validações finais dos projetos executivos. Esta construção encontra-se em estágio avançado, com previsão de conclusão das obras em julho de 2023 e comissionamento em agosto de 2023.



Figura 99 - Foto da construção do laboratório NB3.

Centro de Tecnologias para Saúde

Em apoio a iniciativas do MCTI, o CNPEM estabeleceu um conjunto de ações integradas sob a denominação de Centro de Tecnologias para Saúde, cujo objetivo amplo é desenvolver novas tecnologias para atender demandas em saúde humana.

Neste sentido, foi iniciada a implantação de novas infraestruturas e competências, complementares a outras já existentes no CNPEM, que em conjunto desenvolverão pesquisa estratégica, relevante para o desenvolvimento de biofármacos, fármacos, terapia gênica/celular e medicina regenerativa por meio de engenharia de tecidos. A expectativa é que esta iniciativa ofereça alternativas que beneficiem indivíduos, a sociedade e a economia.

Projeto executivo dos laboratórios de Biofármacos e Engenharia de Tecidos

A expansão da infraestrutura predial do LNBio está sendo realizada em etapas, de acordo com as necessidades laboratoriais de cada programa. No primeiro semestre de 2023, os projetos executivos da fase de Retrofit (Setor A1) do Centro de Tecnologias para Saúde foram elaborados pela empresa projetista contratada (MSE). Também, neste período foi realizado o processo de contratação para a construção da fase Retrofit (Setor A1), em que a empresa Solufarma foi contratada para a execução. Essa fase contemplará as áreas destinadas a Biofármacos e Engenharia de Tecidos após a conclusão das reformas.



Figura 100. Perspectiva aérea – Projeto fase Expansão

Esta construção encontra-se em andamento, com previsão para conclusão no segundo semestre de 2023. Serão entregues laboratórios NB1 e NB2 focados em processos analíticos, de cultura, expressão gênica, cultura 3D, IPS, Biobanco, além de sala limpa onde acomodará a Plataforma Hamilton, uma plataforma automatizada para expansão de clones celulares. Nesta sala, candidatos de *Research Cell Bank* serão selecionados, expandidos e congelados.



Figura 101. Foto da obra – fase Retrofit (Setor A1)

Centro de Vivência Ilum

No primeiro semestre de 2023, dando andamento ao processo de concorrência para construção do Centro de Vivência Ilum no CNPEM, iniciado em agosto de 2022, foram realizadas as etapas de habilitação técnica e de recebimento e julgamento das propostas técnicas e comerciais. Durante este processo, observou-se a oportunidade de otimizar o projeto, e conseqüentemente os custos, realizando-se algumas mudanças e reduções no projeto. Estas alterações foram realizadas e o processo de concorrência da obra foi concluído em 01/06/2023, com a contratação da WME Engenharia para a construção do Centro de Vivência no CNPEM.

O status da construção é de avanço inicial, apenas de mobilização das infraestruturas provisórias e equipes para início das atividades. O prazo contratual é de 190 dias corridos.



Figura 102 - Foto das atividades iniciais para a construção do Centro de Vivência Ilum

Devido às mudanças realizadas nos projetos, como mencionado anteriormente, os projetistas precisaram readequar seus projetos, o que gerou uma postergação nas datas de emissões previstas inicialmente. Os projetos executivos encontram-se em revisões finais, e sendo liberados para construção pelo time técnico do CNPEM.

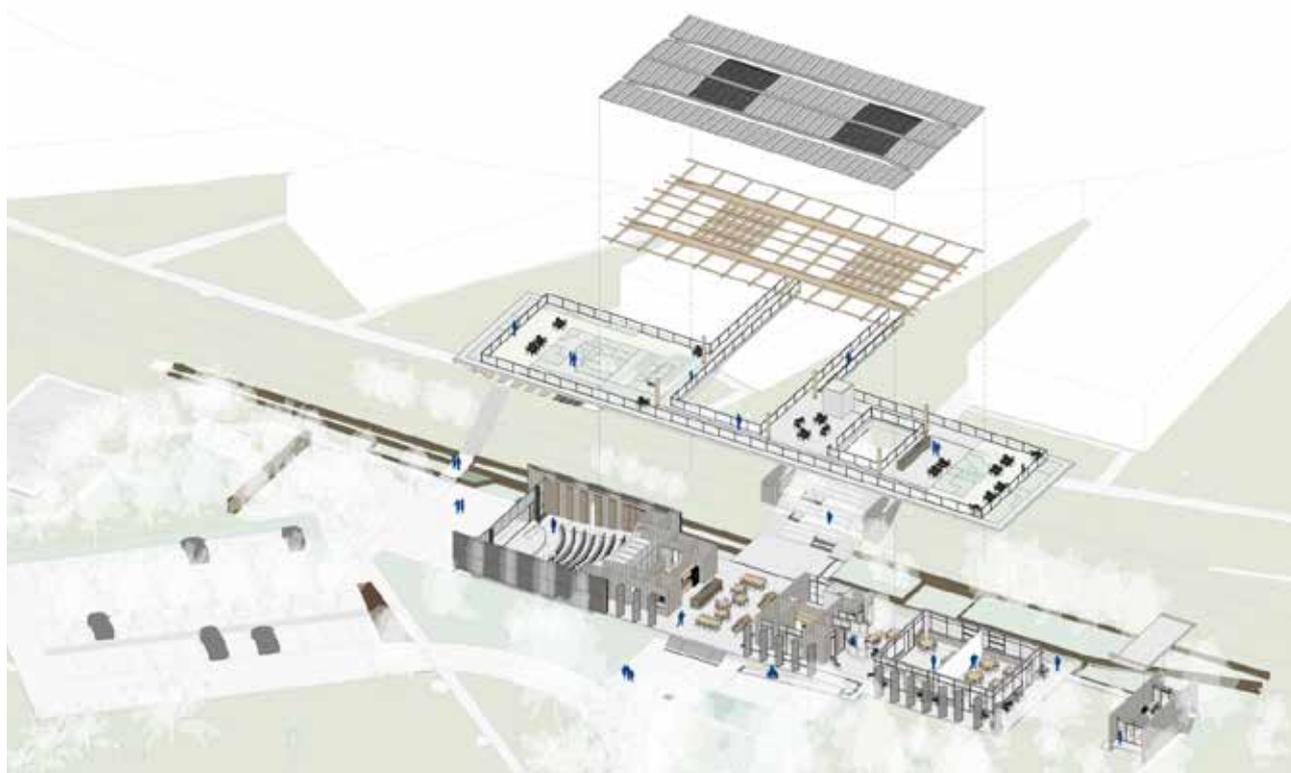


Figura 103 - Imagem de sobreposição dos pavimentos do projeto do Centro de Vivência Ilum.



Figura 104 - Vista 3D do prédio do Centro de Vivência Ilum.





**APOIO À
GERAÇÃO DE
INOVAÇÃO**

Esse capítulo descreve as principais ações relacionadas à promoção da inovação por meio de parcerias em PD&I com empresas dos setores produtivos, transferência de tecnologias e prestação de serviço tecnológico de alta complexidade.



Saúde

Medicina Regenerativa

Validação de equivalente de pele humana bioimpressa

Após encerramento em 2022 da parceria entre CNPEM e a *startup* 3DBS, que tinha o objetivo de realizar o intercâmbio de tecnologias e *know-how* para a confecção de modelos de fígado, barreira intestinal e de pele, que resultou na transferência de tecnologia para exploração comercial dos melhores modelos, iniciou-se um segundo projeto, intitulado “Validação de equivalente de pele humana bioimpressa”. O objetivo principal desta nova parceria, que conta com financiamento do Programa PAPPE/PIPE Fapesp, é validar de forma intra e interlaboratorial o modelo de epiderme reconstruída e a execução dos testes de irritação e corrosão nestes modelos, de acordo com as Guias da OCDE (Método OECD DT 431 - corrosão cutânea in vitro: teste da epiderme humana reconstituída; e Método OECD DT 439 - irritação cutânea in vitro: método de reconstrução da epiderme humana). Desta forma, pretende-se validar o modelo de epiderme humana reconstituída e solicitar a inclusão destes modelos nas guias da OCDE, como modelos padrão para o desenvolvimento dos ensaios de irritação e corrosão de epiderme para fins regulatórios.

Além do desenvolvimento do modelo de epiderme reconstruída e sua caracterização, este ano também foram desenvolvidos testes-piloto para a determinação dos ensaios de irritação e corrosão de epiderme reconstituída. Estes testes-piloto foram realizados em pequena escala, utilizando-se seis substâncias catalogadas, em dois laboratórios diferentes (3DBS e CNPEM). Os resultados estão sendo avaliados para a proposição dos protocolos finais para a execução dos testes completos, os quais estão previstos para o final do ano.

Diagnóstico

Desenvolvimento de novo teste de diagnóstico para SARS-CoV-2

Em 2023 foi concluída a parceria entre o CNPEM e a *startup* Advagen, cujo objetivo foi o desenvolvimento de um teste *point-of-care* para diagnóstico de antígenos de SARS-CoV-2 em saliva, utilizando um método menos invasivo de coleta de amostras, de forma a se obter um diagnóstico de alta sensibilidade e especificidade, que pode ser realizado em poucos minutos, sem a necessidade de instrumentação específica. Um protótipo do teste foi desenvolvido e comparado com outro teste já disponível no mercado, apresentando sensibilidade e especificidades equivalentes.

Fármacos e Biofármacos

Desenvolvimento de nova geração de moléculas com ação anticâncer a partir de produtos naturais

Em dezembro 2022 o CNPEM iniciou um segundo projeto voltado à pesquisa de moléculas com ação anticâncer a partir da biodiversidade, em parceria com o Aché e a Phytobios e com cofinanciamento da Empresa Brasileira de Pesquisa e Inovação Industrial (EMBRAPII) e Banco Nacional de Desenvolvimento Econômico e Social (BNDES). Este projeto marca uma nova fase no desenvolvimento, usando como base as moléculas e os dados biológicos e estruturais obtidos no projeto inicial que foi concluído em março de 2022. O primeiro projeto com essa finalidade realizado em parceria

com Ache e Phytobios, iniciou-se em 2018, e empregou as tecnologias inovadoras desenvolvidas no CNPEM para descoberta de fármacos a partir de produtos naturais, obtendo-se com sucesso novas moléculas e mecanismos de interação com uma proteína alvo validada contra diferentes tipos de câncer. As moléculas têm origem na biodiversidade brasileira, validando a premissa de que a biodiversidade pode oferecer novos esqueletos químicos para o desenvolvimento de fármacos, e que as tecnologias inovadoras implementadas no CNPEM viabilizam estas novas descobertas. O novo projeto, com foco na etapa hit2lead e conclusão com prova de conceito em modelo animal, tem a previsão de execução em 30 meses. Nos últimos 6 meses, as equipes de química medicinal do Ache e do CNPEM vêm trabalhando no planejamento racional e síntese de moléculas, visando otimizar as propriedades de fármaco de séries químicas selecionadas no primeiro projeto. O objetivo é o desenvolvimento de uma nova geração de fármacos para o tratamento de cânceres de difícil intervenção farmacológica.

Candidatos a fármacos alvo dirigidos para o tratamento de infecções virais por Coronavírus

Em parceria com a startup NinTX e contando com cofinanciamento da EMBRAPPII, este projeto tem por objetivo o desenvolvimento de fármacos candidatos alvo dirigidos para o tratamento de infecções virais por Coronavírus, a partir de produtos naturais. O projeto partirá de protocolos desenvolvidos pela equipe do CNPEM na plataforma de Descoberta de Fármacos a partir de produtos naturais. O projeto é realizado em fases, sendo que a primeira, iniciada em julho de 2022, teve sucesso na identificação de hits da biodiversidade brasileira para inibir as proteínas virais selecionadas. Desta forma, o primeiro desafio do projeto, que era encontrar hits nas amostras da biodiversidade analisadas, foi superado. Com isto, algumas atividades previstas para início em outubro de 2023 vêm sendo antecipadas no projeto, visando acelerar a inovação para o desenvolvimento de antivirais para o tratamento de doenças causadas por Coronavírus.

Candidatos a fármacos alvo dirigidos para o tratamento de doenças cardíacas e hepáticas

O segundo projeto em andamento que conta com a parceria com a startup NinTX e cofinanciamento da EMBRAPPII, tem por objetivo o desenvolvimento de fármacos candidatos alvo dirigidos para o tratamento de doenças cardíacas e hepáticas, a partir de produtos naturais. Iniciado em julho de 2022, o projeto parte dos resultados da pesquisa interna do CNPEM, com um alvo proteico para estas doenças, que já foi validado em modelos animais. Seguindo os métodos inovadores implementados na plataforma de descoberta de fármacos do CNPEM, o projeto já triou e está caracterizando moléculas da biodiversidade brasileira com ação neste alvo. Os resultados já obtidos até o momento são muito positivos e reforçam que o projeto derivará os primeiros fármacos e/ou fitofármacos para esse mecanismo de ação dessas doenças tão prevalentes e com poucas opções de tratamento.

Candidatos a fármacos alvo dirigidos a potencializadores de imunoterapia para tratamento oncológico

O terceiro projeto iniciado no segundo semestre de 2022 em parceria com a startup NinTX, este com cofinanciamento da parceria EMBRAPPII/BNDES, visa desenvolver fármacos potencializadores de imunoterapia para o tratamento de câncer, inspirados em produtos naturais. Partindo da pesquisa interna do CNPEM/LNBio em imuno-oncologia, o projeto triará bibliotecas inovadoras da biodiversidade brasileira, também preparadas no CNPEM, para a descoberta de imunopotencializadores. A primeira etapa do projeto foi concluída com sucesso, sendo possível o desenvolvimento de um ensaio celular in vitro, formatado para a triagem em larga escala de produtos naturais da biodiversidade brasileira, que representa a próxima etapa do projeto.

Desenvolvimento de analgésico para o tratamento de dor neuropática a partir da biodiversidade brasileira

Em abril de 2023, um novo projeto intitulado “Aliança Dor” foi firmado com cofinanciamento EMBRAPPII, no âmbito do novo modelo *Basic Funding Alliance* de Bioeconomia. O projeto contará com a participação das empresas Cristália e Phytobios e da startup NinTX, além de envolver uma segunda Unidade EMBRAPPII, na Faculdade de Medicina de Ribeirão Preto da Universidade de São

Paulo (FMRP-USP) - Unidade Integrada de Descoberta e Desenvolvimento de Fármacos. A Aliança Dor objetiva desenvolver novas moléculas ou extratos padronizados oriundos da biodiversidade brasileira que atuem em proteínas alvo, indicadas para o tratamento de dor neuropática, considerando também a modulação da microbiota no contexto desta doença crônica. O primeiro protótipo a ser gerado apresentará alto valor agregado e inserção no mercado mundial. Além disto, os resultados a serem derivados do projeto tem potencial de agregar valor aos biomas brasileiros, alavancando cadeias sustentáveis para bioeconomia e inovação em fármacos no Brasil.

COVID-19

Cristalização de Proteínas no Espaço

Um acordo de cooperação em pesquisa, desenvolvimento científico e tecnológico foi assinado em 2021 entre o CNPEM e as empresas AIRVANTIS INC e CIMED INDÚSTRIA DE MEDICAMENTOS LTDA. O objetivo deste acordo é realizar experimentos de cristalização de proteínas na Estação Espacial Internacional, através da produção e envio, por parte do CNPEM, de amostras de proteínas de interesse para serem cristalizadas em condições de microgravidade na Estação Espacial Internacional. Os cristais de proteína que eventualmente se formarem nas condições especiais de microgravidade serão enviados de volta ao CNPEM, e serão analisados na linha de luz Manacá de difração de raios X do Sirius. No presente acordo, o CNPEM terá a possibilidade de enviar até seis amostras de proteínas em estudo no LNBio à Estação Espacial Internacional por um período de até dois anos. Essa parceria poderá, portanto, viabilizar futuros experimentos de cristalização de proteína no espaço envolvidos em projetos relevantes. Inicialmente, o CNPEM enviou três amostras de proteínas do vírus SARS-CoV-2, ainda não elucidadas, que partiram do Cabo Canaveral (Falcon 9 - SpaceX), porém os experimentos de cristalização não tiveram sucesso. Em 2022, o CNPEM enviou mais três proteínas, as quais estão envolvidas na biossíntese de moléculas de interesse farmacêutico. Essas amostras retornaram à Terra no final de janeiro de 2023. Houve melhoria nos cristais obtidos nas condições de microgravidade do espaço, porém ainda não suficiente para realização de experimentos de difração de raios X.

Biossensores

Biossensor nanoestruturado para determinação da glicemia por método transdérmico não invasivo

No âmbito do programa SibratecNano – Rede de Nanodispositivos, o CNPEM desenvolve desde 2020 com a *startup* Se7e Digital, um biossensor vestível para a determinação da glicemia a partir do fluido intersticial. Esse projeto visa desenvolver uma solução inédita para o Brasil e que seja de baixo custo, capaz de detectar a glicose intersticial de forma transdérmica não-invasiva, ou seja, sem necessidade de furar a pele.

Esse projeto está sendo desenvolvido paralelamente em duas frentes: a fabricação das unidades sensoriais vestíveis e a eletrônica portátil. O processo de desenvolvimento da frente de eletrônica visa a obtenção de um sistema eletrônico portátil, que contenha um *firmware* capaz de controlar suas funções críticas e um sistema de comunicação com dispositivos móveis. Esse sistema está sendo testado para eliminação de possíveis erros, otimização do consumo de energia e uso de memória, e a atividade de operação da eletrônica de maneira contínua, demonstrando sua robustez para o monitoramento contínuo da glicemia.

No que se refere ao desenvolvimento dos sensores, o projeto tem utilizado técnicas de fabricação simples e escalonáveis, combinando tintas condutoras, nanomateriais funcionais e biorreceptores. As unidades desenvolvidas já foram validadas em testes de bancada quanto a detecção de glicose em fluido intersticial artificial. O próximo passo envolve a validação do sensoriamento utilizando a eletrônica portátil. Espera-se obter um protótipo funcional vestível até dezembro de 2023.

Odontologia

Plataforma Automatizada para a Aplicação por Spray de Revestimento Nanoestruturado para Dispositivos de Corte e Erosão

Este projeto de cooperação, iniciado em 2022, é uma parceria entre o CNPEM e a empresa nChem, que já está na segunda etapa do desenvolvimento. O objetivo é iniciar os testes do sistema automatizado de deposição de revestimento nanoestruturado (desenvolvido na primeira fase do projeto) em instrumentos cirúrgicos. O foco das atividades no primeiro semestre de 2023 foi iniciar o revestimento de brocas odontológicas utilizando o sistema automatizado e realizar análises de microscopia eletrônica de duplo feixe. Espera-se transferir este conhecimento para a empresa, que atualmente utiliza a metodologia de banho ou imersão. Portanto, os detalhes de deposição, formação de camadas e tratamentos térmicos estão sendo otimizados para que se possa obter o mesmo resultado ou melhor do que a empresa já conseguia com o uso de um produto comercial, com a vantagem de proporcionar maior reprodutibilidade e rapidez no processo. Estudos de aderência, simulando o uso dessa broca estão também em fase inicial. Para realização desses testes, um protótipo que simula o uso da broca em ossos está em construção. Após os testes de desgaste, as brocas passarão por nova bateria de microscopia para avaliar a eficácia do material aplicado. A empresa forneceu várias brocas revestidas por meio do método comercial hoje utilizado, para que fossem usadas como referência para validação do processo automatizado.

Energia

Biocombustíveis

Rota biotecnológica para aproveitamento de subprodutos agroflorestais

A agenda global para a sustentabilidade inclui ações em todos os setores econômicos, com o objetivo de adotar alternativas renováveis para substituir ou complementar as matérias-primas fósseis já em uso, reduzindo, assim, as emissões atmosféricas e mitigando impactos socioambientais adversos. Este projeto, desenvolvido em parceria com o departamento de PD&I da Equinor no Brasil, no âmbito dos compromissos da empresa com Agência Nacional de Petróleo (ANP), e cofinanciado pela EMBRAPA, atua nesta agenda com o objetivo de enfrentar os desafios na produção microbiana de hidrocarbonetos, os quais podem ser usados como biocombustíveis drop-in, a partir de resíduos lignocelulósicos florestais. Neste semestre, realizou-se experimentos em planta piloto para avaliação dos parâmetros de pré-tratamento da biomassa, em diferentes condições. Os produtos desta etapa passaram pelo processo de hidrólise enzimática, e os resultados estão sendo avaliados. A estratégia para coibir a inibição de produto, visando melhoria da hidrólise, foi racionalmente desenhada e está sendo implementada em laboratório. Paralelamente, o cultivo de consórcios microbianos e o isolamento de cepas oleaginosas estão sendo realizados para a continuidade do desenvolvimento da rota.

Biorrefinaria agroindustrial: rotas tecnológicas para valorização de subprodutos via geração de açúcares avançados e produção de biocombustíveis e bioquímicos

Uma biorrefinaria é uma planta industrial capaz de produzir uma variedade de produtos a partir da biomassa, como biocombustíveis, bioquímicos-plataforma substituintes de petroquímicos, e bioenergia. O presente projeto, que decorre de um projeto anterior bem-sucedido executado em parceria entre o CNPEM e a Sinochem Petróleo Brasil Ltda., cofinanciado pela EMBRAPA, visa resolver entraves para a produção de biocombustíveis (etanol, diesel verde e bioquerosene de aviação) e de bioquímicos (ácidos orgânicos e olefinas) a partir de subprodutos agroindustriais (materiais lignocelulósicos provenientes do milho e materiais residuais lipídicos

ácidos). Atualmente, a condição de pré-tratamento dos materiais lignocelulósicos já se encontra estabelecida na Planta Piloto do CNPEM. Adicionalmente, estratégias de engenharia genética estão sendo empregadas para diferentes classes de microrganismos, visando alcançar a despolimerização adequada do material pré-tratado para a produção de químicos sustentáveis. Adicionalmente, um sistema cell-free baseado em cascata enzimática está sendo desenvolvido em laboratório para a conversão de resíduos de destilaria em olefinas.

Avaliação de Sustentabilidade

Avaliação de Ciclo de Vida do coprocessamento de cargas renováveis em refinarias de petróleo

Esta parceria entre a Petrobras e o CNPEM, firmada em novembro de 2021, tem por objetivo realizar a Avaliação de Ciclo de Vida (ACV) de rotas de coprocessamento de intermediários energéticos derivados da biomassa, como o bio-óleo de pirólise, os óleos vegetais e gorduras, juntamente com cargas fósseis em unidades de refino de petróleo. A ideia central das rotas de coprocessamento é que uma parte do carbono de origem biogênica da biomassa possa ser incorporada em alguns dos produtos da refinaria, acelerando a transição para uma economia de baixo carbono. No primeiro semestre de 2023 foram entregues os resultados para validação de uma terceira parte da rota de coprocessamento de óleos vegetais e gordura animal em unidades de hidrotreamento (HDT) das refinarias. Esses resultados foram gerados seguindo as bases metodológicas definidas ao longo dos períodos anteriores do projeto, em concordância com as premissas da Política Nacional de Biocombustíveis (RenovaBio), instituída pela Lei nº 13.576/2017, e permitirão à empresa pleitear a inclusão da rota no escopo desta política, contribuindo para a descarbonização do setor de transportes no Brasil. Foram iniciadas as atividades para realização do ACV do coprocessamento do bio-óleo de pirólise no craqueamento catalítico fluidizado (FCC).

Óleo e Gás

Desenvolvimento de métodos de preparo de amostra e sensores na área de petróleo e gás considerando a utilização e concepção de plataformas microfluídicas

Em parceria com a Petrobras, o CNPEM vem desenvolvendo pelo quinto ano este projeto que busca utilizar plataformas microfluídicas para a identificação de insumos químicos utilizados pela indústria do petróleo. Inicialmente, as atividades envolveram o desenvolvimento de dispositivos baseados em sistemas de língua eletrônica e com métodos não seletivos. No entanto, os resultados obtidos demonstraram que estes dispositivos não gerariam medidas com reprodutibilidade satisfatória, além de não serem capazes de determinar os grupos químicos dos princípios ativos dos insumos. Dessa maneira, a equipe redirecionou os esforços para o desenvolvimento de um método eletroquímico seletivo para o controle de qualidade de inibidores de incrustação (com matéria ativa a base de fósforo), que já possibilitou a obtenção de limites de detecção da ordem de parte por bilhão do teor de fósforo, e alta sensibilidade, o que já resultou em uma publicação em revista internacional indexada.

Visando a utilização desse método em instalações *onshore* e *offshore*, a equipe focou na portabilidade do sistema como um todo. Adicionalmente, otimizou-se as condições experimentais, diminuindo o tempo de oxidação de 15 para 3 minutos, mantendo a eficiência do processo. Testes de reprodutibilidade dos resultados obtidos com amostras cedidas pela Petrobras foram realizadas num período de seis meses, obtendo-se resultados muito positivos. Os avanços obtidos culminaram no depósito de um pedido de patente, contemplando o sistema e método desenvolvido, e na publicação de outro manuscrito em revista internacional indexada. Além disso, um *software* está sendo desenvolvido em parceria com a divisão de Automação e Software – GAS para facilitar a interface do sistema de detecção com o usuário. Recentemente, o funcionamento do protótipo do sistema foi demonstrado à Petrobras, e ele será implementado em seus laboratórios.

Avaliação de estabilidade e desempenho de produtos químicos por sistemas micro/mesofluídicos

Este projeto tem por objetivo o desenvolvimento de um dispositivo para avaliação da eficiência de anti-incrustantes e desmulsificantes em diferentes condições encontradas nas atividades da indústria petrolífera. Nesta etapa do projeto foi examinada a aplicabilidade do método em um cenário real de *top side*, utilizando salmouras para a precipitação natural de sais de CaCO_3 , dispensando o uso da rotina da eletrodeposição anteriormente adotada. A plataforma é composta por bombas, um sistema de aquecimento e um dispositivo mesofluídico para misturar as soluções e as análises foram realizadas na ausência e na presença de dois produtos anti-incrustantes fornecidos pela Petrobras. Com o objetivo de simplificar ainda mais o sensor, foi desenvolvido um modelo com capilares em aço inox como eletrodos polarizáveis. Também foi avaliado o comportamento cinético da precipitação de CaCO_3 , fornecendo assim informações sobre a eficiência dos anti-incrustantes. Finalmente, foram realizados experimentos para comparar o dispositivo desenvolvido com o sistema convencional (*tube blocking test*, TBT). Os métodos concordaram entre si como indicadores do tempo necessário para as incrustações salinas acontecerem nos capilares em aço inox, enquanto o sensor impedimétrico forneceu um monitoramento mais sensível. Com a ajuda de imagens de microscopia eletrônica de varredura (MEV), foi possível correlacionar a variação de impedância com a precipitação de sal ao longo do tempo. Como resultado dessa etapa, foi realizado um depósito de pedido de patente, que contempla o desenvolvimento de um dispositivo eletroquímico em fluxo para a detecção e monitoramento da formação de incrustações *in situ* e em tempo real. Além disso, foi submetido um artigo à revista "*Desalination*" com o título "*Impedimetric sensor for continuous monitoring of scale formation kinetics*".

Sistema microfluídico do tipo "rock-on-a-chip" para estudo de injetividade

Iniciado em 2022, este projeto em parceria com a Petrobras se propõe a desenvolver dispositivos para mimetizar a estrutura porosa das rochas presentes nos reservatórios produtores de petróleo. Até o momento, foi realizada uma revisão bibliográfica e definida a metodologia de trabalho a ser adotada no projeto. Também foram iniciados os processos de aquisição de equipamentos (controladores de fluxo, microscópio, etc.) e dos insumos (chips, tubulação, conexões, etc.) necessários para a execução do projeto. A equipe também concluiu com sucesso a etapa de desenho e impressão dos chips que mimetizam um meio poroso. Foi possível determinar a molhabilidade dos materiais dos chips frente água e salmoura.

Desenvolvimento de sistemas microfluídicos para extração de espécies presentes em petróleo e separação de fases presentes em emulsões e análises subsequentes

Esta parceria, iniciada em 2018, permitiu o desenvolvimento de uma plataforma analítica para monitoramento rápido, simples e escalável de íons causadores de incrustação em amostras de petróleo bruto. Esta plataforma pode beneficiar a indústria petroquímica em sua missão de criar condições de fluxo ideais. A garantia de fluxo desempenha um papel importante na concepção de técnicas de operação seguras e eficientes ao longo das explorações de petróleo e gás. A plataforma contou com: (i) extração de solvente microfluídico ultrarrápida e eficiente mediada por turbulência (μSE); (ii) sensores impedimétricos multidimensionais de sonda única combinados com (i) e (iii) aprendizado de máquina (ML) para determinar múltiplos íons de uma única medida de impedância (Z). Os dispositivos μSE impressos em 3D foram capazes de proporcionar extrações ultrarrápidas com eficiência semelhante à alcançada por um dispersor convencional. Os sensores eletroquímicos, desenvolvidos pelo CNPEM por dois métodos de prototipagem, forneceram a multideterminação de íons em amostras de água produzida (Mg^{2+} , Ca^{2+} , Sr^{2+} e Cl^-) e amostras de petróleo bruto (Ca^{2+} e Cl^-) após realizar a abordagem μSE . Os dados de espectros de impedância foram aplicados em diversos algoritmos de *machine learning*, e a partir dos bons resultados atingidos com o uso do algoritmo *Random Forest*, que permitiu precisões gerais entre ~97 a ~102%, foi desenvolvido o aplicativo para computador, *Salt Analyzer*, capaz de compilar os espectros de impedância e exibir os resultados de forma automatizada. O projeto foi encerrado em fevereiro de 2023 e, atualmente, um modelo do sistema completo (extração e quantificação) está em fase de teste para análise cotidiana dos laboratórios alocados no Centro de Pesquisa, Desenvolvimento e Inovação Leopoldo Américo Miguez de Mello (Cenpes) da Petrobras.

Caracterização Ultrarrápida e Acurada de Reservatórios

No final de 2021, o CNPEM iniciou dois projetos em colaboração com a empresa Petrobras – um de Infraestrutura e outro de Pesquisa e Desenvolvimento (P&D) – ambos com duração de dois anos. O objetivo do projeto de Infraestrutura é a construção de umas das estações experimentais da linha MOGNO, na qual serão realizadas medidas de tomografia de raios X com resolução micro e sub-micrométricas. Nesta frente, o principal avanço é que a microestação está em processo final de design e aquisição de alguns componentes críticos, como o pórtico da microestação. Outras peças estão em fabricação, como a base de granitos de 30 metros.

O projeto de P&D prevê o uso dessa microestação para a análise de cerca de 500 amostras de rocha reservatório de petróleo, em diferentes condições experimentais, através da técnica de micro e nanotomografia de raios X. Com o comissionamento técnico da nanoestação da MOGNO, foram realizadas medidas de microtomografia de raios X com amostras cedidas pela Petrobras. Estas amostras estão no limite do campo de visão da nanoestação, e estes dados têm sido utilizados para testes de diferentes algoritmos de reconstrução. O método não supervisionado com filtros de Gabor foi testado para segmentação dessas imagens; entretanto, como as imagens reconstruídas não possuem variações na escala de cinza, o algoritmo não foi capaz de realizar a separação de regiões de diferentes porosidades. A frente de P&D também tem visado o teste de algoritmos supervisionados com aprendizado profundo de redes neurais convolucionais, para segmentação de imagens de microtomografia, considerando 3 fases: poro, matriz e microporo. Estão sendo avaliados Algoritmos para a identificação de elementos químicos através de imagens obtidas pelo método de microtomografia por *dual energy* testando-se as técnicas: decomposição, clusterização sobre o espaço de atenuação estendido e calibração estequiométrica.

Tomografia de raios X para medidas in situ de amostras de rocha em condição de reservatório

No final de 2022, dois novos projetos de Infraestrutura e P&D para a linha MOGNO do Sirius foram firmados, avançando na colaboração do CNPEM com o departamento de PD&I da empresa Equinor, e dentro dos compromissos da empresa com a Agência Nacional do Petróleo, Gás Natural e Biocombustíveis (ANP). Os projetos envolvem o desenvolvimento, instalação e comissionamento da infraestrutura necessária para estudar o fluxo multifásico de fluidos em rochas reais, através de imageamento de raios-X em condições experimentais nunca obtidas em linhas de luz de tomografia de raios-X. Adicionalmente, o projeto de P&D irá validar o uso de células de fluxo para ensaios *in situ*, sob condições controladas de pressão e temperatura, com amostras reais de rochas de diferentes tamanhos, na microestação da linha de luz Mogno, possibilitando o melhor entendimento da dinâmica do escoamento de fluidos em meios porosos. É importante destacar que essa nova infraestrutura permitirá a execução de testes 4D nunca realizados na Linha de Luz Mogno.

Essa colaboração com a Equinor está dividida em duas etapas principais: i) Infraestrutura na linha de luz MOGNO; ii) Realização de experimentos *in situ*, onde amostras de rochas serão condicionadas à alta pressão e temperatura, denominados aqui como sistema HPHT. Serão realizados experimentos utilizando protocolos validados e compartilhados pela Equinor e Universidades parceiras ao time do CNPEM. Esses experimentos realizados, sob essas condições, permitirão avaliar através da dinâmica do processo, como os fluidos são mobilizados no meio poroso em função de diversas condições de escoamento.

Desta forma, nos primeiros meses do projeto, a equipe realizou um mapeamento dos sistemas de injeção que são utilizados nos laboratórios de pesquisadores colaboradores. Neste contexto, foi realizada uma visita técnica pela equipe do CNPEM aos laboratórios da Equinor Research Center em Trondheim/Noruega, e foram realizadas visitas técnicas ao CNPEM por pesquisadores do mesmo Laboratório. Com o levantamento dos protocolos, assim como dos equipamentos utilizados, deu-se início a aquisição de alguns dos componentes para a primeira fase de teste. Dentre os equipamentos destaca-se a aquisição da bomba de injeção de fluidos em alta pressão, que é essencial para o teste de diversos componentes.

Materiais

Toxicidade e Segurança

Desenvolvimento de nova metodologia para avaliação da toxicidade e segurança de microfibrilas de celulose

Este projeto foi iniciado em 2021, sendo fruto de uma colaboração entre CNPEM com as empresas Klabin S.A e Suzano S.A, com o apoio da Associação Brasileira Técnica de Celulose e Papel (ABTCP) e cofinanciamento da Embrapii. O projeto está no segundo ano de desenvolvimento e, durante este semestre, foi possível concluir com êxito os ensaios de toxicidade. Nesta etapa, foram realizados ensaios *in vitro* com células HaCat (queratinócitos de pele humana) e outros ensaios avançados. Estão em andamento estudos teóricos com o objetivo de definir uma metodologia para regulação desses materiais de celulose no contexto nacional e internacional, bem como a realização de alguns experimentos de toxicidade complementares.

Químicos Renováveis

Desenvolvimento de biorreagente seletivo para flotação reversa de minério de ferro

No beneficiamento do minério de ferro utiliza-se tradicionalmente reagentes químicos sintéticos para modificar a superfície mineral e facilitar a separação de contaminantes por flotação. Com a preocupação em aumentar a sustentabilidade deste processo, a empresa Vale e o Instituto Tecnológico da Vale (ITV) firmaram uma colaboração em P&D com o CNPEM, cofinanciada pela EMBRAPII, para buscar desenvolver um biorreagente coletor que apresente alta seletividade para o quartzo e baixo impacto ao meio ambiente. Neste semestre foram desenvolvidas uma rota enzimática *in vitro* utilizando óleos vegetais, e uma rota biológica *in vivo* para a produção de dois biorreagentes capazes de interagir com quartzo, com resultados de flotabilidade similares aos de reagentes comerciais em testes de microflotação. Também foi desenvolvido, neste período, um novo biorreagente derivado de proteínas capaz de interagir de forma seletiva com o quartzo.





**TREINAMENTO,
EDUCAÇÃO
E EXTENSÃO**

Neste capítulo são descritos os eventos promovidos pelo CNPEM no primeiro semestre, os eventos que estão agendados para os próximos meses e os destaques do segundo ano de atividades da Ilum Escola de Ciência. Por fim, são apresentados os números associados aos jovens bolsistas que desenvolvem suas pesquisas no Centro por meio de estágio, bolsas de iniciação científica e de pós-graduação.



Eventos científicos e de capacitação

Uma das frentes de atuação do CNPEM é a capacitação e qualificação de recursos humanos em áreas científicas e tecnológicas de fronteira, através de eventos científicos, cursos de capacitação, treinamentos e ações de divulgação para o público amplo. Ao longo do primeiro semestre de 2023, foram realizados três eventos de capacitação, com 74 participantes externos, e dois eventos científicos, somando 149 participantes externos. Além disso, o CNPEM foi sede do Workshop 2023 do Sistema Nacional de Laboratórios em Nanotecnologias (SisNANO)

organizado pelo MCTI, com o intuito de divulgar os resultados do programa e debater ações do país nesse setor. Outro destaque foi a I Escola de Férias ILUM em Fabricação e Caracterização de Dispositivos, em que os alunos da Ilum tiveram seminários e práticas com os pesquisadores do CNPEM.

Para o próximo semestre estão previstos 13 eventos científicos e 10 de capacitação, em formatos variados – presencial, online ou híbrido. A seguir, a lista de eventos agendados para o segundo semestre.

Tabela 2 – Eventos científicos programados para o segundo semestre de 2023

VUVX'22 - International Conference on Vacuum Ultraviolet and X-ray Physics
 VI AFM Workshop & minicurso Gwyddion
 Interpore Brasil
 VII Curso de Introdução – Nanotecnologia & Nanotoxicologia (Intronanotox)
 Tutoriais de Machine Learning (técnicas fundamentais e aplicações em biologia)
 Material Informatic
 XVIII Escola Brasileira de Estrutura Eletrônica (EBEE)
 XII Proteomics Workshop
 X4-MECS : X-rays for magnetic, Electronic and Crystalline Structures
 XayNan 2023
 33ª Reunião Anual de Usuários (RAU)
 Groundwater Remediation using Nano/biotechnology with focus on the Contaminated Resources (GRUN 2023)
 SYNBIOS: Synchrotron nano-bio interfaces

Tabela 3 - Eventos de capacitação programados para o segundo semestre de 2023

SPSAS-NanoA&E - São Paulo School of Advanced Science on Nanotechnology, Agriculture & Environment
 Escola Ricardo Rodrigues de Luz Síncrotron (ER2LS)
 Escola Sirius para Professores de Ensino Médio (ESPEM)
 Curso de Caracterização de Biomassa
 Fundamentos em Microscopia Eletrônica de Transmissão
 I SEM-FIB Workshop - I Workshop de Microscopia Eletrônica de Varredura e Duplo Feixe
 Curso de Caracterização Química de Bagaço e Palha de Cana-de-açúcar
 Fronteiras em Imagens Biológicas
 Workshop on Cryo-EM Data Analysis
 7ª Edição - Curso para Operação de Biorreatores de Bancada

Linha do Tempo dos Eventos de Capacitação e Científicos de 2023

Curso Introdutório Fluka



23 janeiro – 08 de março

Virtual

62 participantes externos

30 horas

Capacitação

Entre 23 de janeiro e 8 de março, o Laboratório Nacional de Luz Síncrotron (LNLS) ofereceu o curso introdutório de FLUKA, que é código aberto Monte Carlo de interação e transporte de fótons, hádrons e léptons. Nesse curso de 30 horas foram apresentados aos participantes os principais tópicos envolvendo a simulação com FLUKA. O conteúdo foi baseado no material do curso oferecido pelo CERN, assim como na experiência do CNPEM utilizando esse código em diversas aplicações nos últimos anos.

Programa CNPEM de capacitação para trabalho em laboratório NB3 - 2ª edição

31 Janeiro – 03 de fevereiro

Presencial

2 participantes externos

24 horas

Capacitação

Durante quatro dias, profissionais da saúde foram treinados para uso das instalações, equipamentos e procedimentos relacionados a estrutura de Laboratórios de Nível de Biossegurança (NB3). Nessas infraestruturas de alta contenção biológica são manipulados microrganismos patogênicos, o que exige preparo específico dos profissionais que trabalham diretamente com esses agentes. Durante a formação, os participantes participaram de atividades teórica e práticas.



IV IBSB: Brazilian Czyme Research Meeting

08 de fevereiro

Presencial

62 participantes externos

Científico



No dia 08 de fevereiro foi realizada a 4ª Edição do Brazilian CAZYme Research Meeting, um dos eventos da série promovida pelo Industrial Biotechnology and Syntetic Biology (IBSB) organizados pelo Laboratório Nacional de Biorrenováveis (LNBR). O objetivo do encontro é discutir os principais tópicos das pesquisas em enzimológica de carboidratos conduzidas no Brasil. Nessa edição, o evento aconteceu no formato presencial e reuniu alunos da graduação, pós graduação, pesquisadores e profissionais interessados em enzimas industriais. Um dos destaques dessa edição foi a participação do Professor Bernard Henrissat, da Univerisdade Técnica da Dinamarca (DTU), fundador da CAZy database e um dos principais nomes desse campo de pesquisa.

II Simpósio Licuri: Oportunidades para Negócios em Bioeconomia

13 de abril

Híbrido

87 participantes externos

Científico

O simpósio tem como objetivo promover, apresentar e divulgar o desenvolvimento de novos bioprodutos a partir do óleo extraído da amêndoa do licuri, conhecida como palmeira sertaneja. O Seminário, que aconteceu no formato híbrido, é organizado pelo Centro Nacional de Pesquisa em Energia e Materiais (CNPEM) em parceria com o Programa Cadeias Produtivas da Bioeconomia. O evento também viabiliza parceiras e novas oportunidades de negócios referente a cadeia produtiva do licuri.



6ª edição - Curso Para Operação de Biorreatores de Bancada

25-28 de abril

Presencial

10 participantes externos

32 horas

Capacitação



O Laboratório Nacional de Biorrenováveis (LNBR) promoveu o Curso para Operação de Biorreatores de Bancada entre os dias 25 e 28 de abril. O objetivo é capacitar os participantes na calibração, configuração, montagem, monitoramento e operação de biorreatores fermentativos agitados mecanicamente (*Stirred Tank Reactor* – STR). Nessa formação, foram realizadas atividades teóricas e a formação prática para os participantes, cujas turmas são reduzidas para melhor entendimento do conteúdo.



Processo seletivo 2023

Em fevereiro, a Ilum Escola de Ciência finalizou o segundo processo seletivo do Bacharelado em Ciência e Tecnologia. O processo de seleção recebeu 1.185 inscrições, sendo aprovados 40 candidatos na primeira chamada. Os aprovados são de 13 estados diferentes do Brasil, sendo 37% oriundos do Nordeste.



Figura 105 - Alunos ingressantes do Processo Seletivo 2023

Oficinas de Conhecimento

No primeiro semestre a Ilum deu início às atividades extensionistas dos alunos, como previsto na Integração Curricular da Extensão, com a realização das “Oficinas de Conhecimento”, que visam transferir o conhecimento adquirido pelos alunos nos componentes curriculares da Ilum para a sociedade. As atividades oferecidas durante as oficinas constituem situações de aprendizagem dinâmicas possibilitando relatos de experiências vividas pelos alunos da Ilum e construção de conhecimentos. As oficinas

são realizadas aos sábados pela manhã e são voltadas aos alunos do Ensino Médio indicados por coordenadores pedagógicos de Escolas Públicas da região de Campinas. Os temas de discussão durante as atividades realizadas são vários, entre eles: interações intermoleculares, origem das cores, e microscopias de força atômica (AFM) e de tunelamento com varredura (STM), imagem e ação em matemática, eletroforese do DNA, procurando tardígrados e caracterização do grafeno.



Figura 106 - Alunos durante as atividades das Oficinas de Conhecimento

Futuras Cientistas

Em janeiro de 2023, a Ilum recebeu uma aluna e uma professora do Ensino Médio como parte do programa Futuras Cientistas do Centro de Tecnologias Estratégicas do Nordeste (Cetene), que estimula o contato de alunas e professoras da rede pública de ensino com as áreas de Ciência, Tecnologia, Engenharia e Matemática. O principal objetivo

do programa é contribuir com a equidade de gênero no mercado profissional. As participantes ficaram imersas nos laboratórios da Ilum e elaboraram projetos na área de síntese e caracterização de nanomateriais. O projeto foi coordenado pela Profa. Valéria Marangoni e contou também com a participação dos técnicos, professores e alunas da Ilum.



Figura 107 - Participantes do Projeto Futuras Cientistas

Destaques na Infraestrutura Laboratorial da Ilum

No primeiro semestre, foi adquirido um potenciostato e diversos acessórios, como LEDs, que irão possibilitar a realização de experimentos de fotocatalise e eletroquímica. A entrega do equipamento está prevista

para julho de 2023 e os experimentos irão integrar o projeto previsto para o segundo semestre de 2023 na disciplina Laboratório Avançado III, cujo tema será Energia e Sustentabilidade.

Iniciação Científica

Na Ilum as atividades de pesquisa dos estudantes estão contempladas nas 5 disciplinas de Iniciação à Pesquisa desenvolvidas nos laboratórios do CNPEM sob orientação de seus pesquisadores. Além disso, nesse primeiro semestre de 2023, dois estudantes foram contemplados com bolsas da Fapesp para desenvolver projetos na área de síntese de nanomateriais. Demais alunos

foram contemplados com bolsas de Iniciação Científica do INCT – *Materials Informatics* com projetos abrangendo os seguintes temas: desvendando o odor; defeitos em dicalcogenetos de metais de transição; inverso de novos vidros bioativos; caracterização *in silico* de adesivos de látex e lignina; parâmetros termodinâmicos como *input* em regressores de propriedades de moléculas e materiais.

Visita de pesquisador do EMBL-EBI

Nesse primeiro semestre de 2023, o Dr. Sameer Velankar visitou a Ilum a convite do Professor Hernandes Carvalho e ministrou uma aula aos alunos ingressantes. Sammer é diretor da Base de Dados de Inteligência

Artificial do European Bioinformatics Institute (EMBL-EBI) e um dos criadores do AlphaFold, um programa de inteligência artificial que realiza previsões da estrutura de proteínas.

30º Programa Bolsas de Verão

Anualmente, o CNPEM realiza o Programa Bolsas de Verão (PBV) com o intuito de difundir a ciência e estimular jovens estudantes a seguirem carreiras científicas e de desenvolvimento tecnológico. Durante os dias 6 de janeiro e 24 de fevereiro deste ano, aconteceu a 30ª edição do evento, após o hiato provocado pela pandemia de Covid-19. O evento recebe, exclusivamente, alunos da graduação das áreas de Ciências Exatas e da Terra e Ciências Biológicas e da

Saúde, de instituições brasileiras e dos demais países da América Latina e Caribe. No decorrer do Programa, os alunos desenvolvem um plano de trabalho de um projeto de pesquisa multi e/ou interdisciplinar proposto pelos pesquisadores do CNPEM e, ao final, apresentam os resultados em formato de seminário e de um relatório final de pesquisa. Em 2023, o Programa contou com 32 participantes, sendo que até a edição de 2020 o PBV recebeu 400 estudantes.



Programa Unificado de Estágios (PUE)

O Programa Unificado de Estágios do CNPEM (PUE) é voltado para estudantes de cursos técnicos e universitários que buscam oportunidades em áreas científicas, tecnológicas e administrativas. Seu caráter de aprendizagem e desenvolvimento através do constante acompanhamento das atividades realizadas

pelos estagiários é um dos pontos principais do programa. Até o fim do primeiro semestre de 2023, 150 jovens estudantes realizaram atividades de apoio em diversas áreas do CNPEM, concentrando-se em mecatrônica e eletroeletrônica (nível técnico) e engenharias (nível superior).

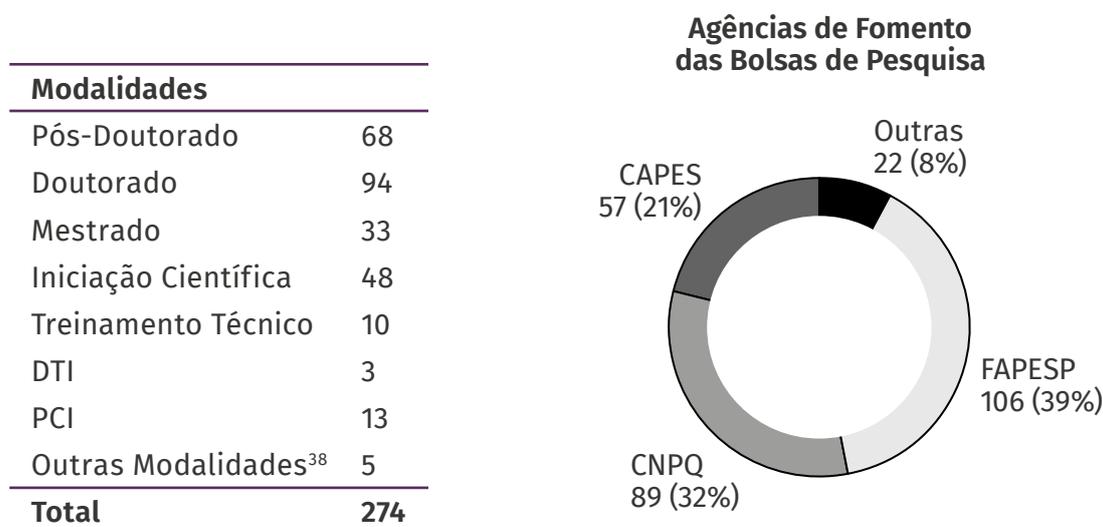
Tabela 4 - Distribuição do quadro de estagiários no primeiro semestre de 2023

	LNLS	LN BIO	LN BR	LN NANO	DAT	ILUM	DSC	DG	Total Geral
Estagiário N. Superior	47	8	20	21	17	2	8	1	124
Estagiário N. Técnico	15	1		1	9	-	-	-	26
TOTAL GERAL	62	9	20	22	26	2	8	1	150

Pesquisadores Colaboradores

O CNPEM, por meio de seu conjunto de instalações e competências singulares, também atua em atividades de apoio aos programas de pós-graduação nas mais diversas áreas temáticas, por meio de orientações e supervisões realizadas pelos pesquisadores em temas pertinentes aos programas científicos e tecnológicos desenvolvidos nos Laboratórios Nacionais. Ao longo do primeiro semestre de 2023, o CNPEM contribuiu para a formação e capacitação de 296

pesquisadores colaboradores que atuaram em 309 projetos em diferentes níveis. Esses projetos contaram com 274 bolsas de pesquisa durante o ano, distribuídas nas modalidades destacadas no quadro a seguir. O número de pesquisadores colaboradores, projetos e bolsas diferem entre si pois, além de alterações de modalidade ou agência de fomento por um mesmo pesquisador, existiram 35 projetos sem bolsa concedida por agência de fomento no período.



38. Outras modalidades compreendem bolsas concedidas para Pesquisadores Visitantes (3 FAPESP e 1 CAPES), e para Estagiário Serrapilheira (1 FUNARBE).



The background of the page is a blurred photograph of a document. On the left side, there are several colorful sticky tabs in shades of blue, red, and yellow. The main part of the document shows a line graph with a grid. Two lines are visible: a green one and a red one. The x-axis is labeled with the months 'APR', 'MAY', and 'JUN'. The text 'ANEXO I - INDICADORES DE DESEMPENHO' is overlaid in large, bold, white letters at the bottom of the page.

ANEXO I - INDICADORES DE DESEMPENHO

ANEXO I - Indicadores de Desempenho

ID	Indicador	Eixos de Atuação	Peso	Qualificação	Meta	Resultado 2023
01	Taxa geral de ocupação das instalações	Todos	01	Eficácia	70%	40%
02	Taxa de ocupação das instalações por usuários externos	Eixo 1	01	Eficácia	20%	13%
03	Beneficiários externos das instalações abertas	Eixo 1	01	Eficácia	800	591
04	Propostas realizadas por usuários externos nas instalações abertas	Eixo 1	03	Eficácia	450	293
05	Índice de satisfação dos usuários externos	Eixo 1	02	Efetividade	85%	100%
06	Artigos publicados de pesquisadores externos	Eixo 1	04	Efetividade	0,75	1,43
07	Taxa de publicação da pesquisa interna	Eixo 2	04	Efetividade	2	1
08	Qualidade da produção científica interna	Eixo 2	01	Efetividade	50%	49%
09	Taxa de coautoria internacional	Eixo 2	01	Efetividade	30%	50%
10	Parcerias em projetos de P&D com instituições de ensino e pesquisa	Eixo 2	02	Eficiência	20	23
11	Parcerias em projetos de PD&I	Eixo 3	02	Eficiência	30	30
12	Recursos associados à inovação	Eixo 3	02	Eficiência	8%	21%
13	Tecnologias protegidas	Eixos 2 e 3	01	Efetividade	8	5
14	Horas de capacitação de pesquisadores externos	Eixo 4	02	Eficácia	200	86
15	Número de pesquisadores externos capacitados	Eixo 4	02	Eficácia	270	74
16	Eventos científicos	Eixo 4	02	Eficácia	8	2
17	Pesquisadores de outras regiões capacitados pelo CNPEM	Eixo 4	01	Eficácia	80	21
18	Propostas realizadas por usuários externos nas linhas de luz do Sirius	Eixo 1	1	Eficácia	150	111
19	Confiabilidade da nova Fonte de Luz Síncrotron (Sirius)	Todos	1	Eficácia	90%	94%

Indicador 1:																																							
Taxa geral de ocupação das instalações																																							
Eixos de Atuação: Eixo 1 – Instalações abertas a usuários externos Eixo 2 – Pesquisa e desenvolvimento <i>in-house</i> Eixo 3 – Apoio à geração de inovação Eixo 4 – Treinamento, educação e extensão																																							
Objetivo Estratégico do CG: Prover e manter infraestrutura nacional de classe mundial para pesquisa, desenvolvimento e inovação nas suas áreas de atuação disponibilizada à comunidade de pesquisa acadêmica e industrial.																																							
Finalidade: Medir a taxa de ocupação das instalações dos Laboratórios Nacionais do CNPEM, no ano de referência, por usuários externos, P&D <i>in-house</i> , interação com empresas e atividades de treinamento, educação e difusão.																																							
Descrição: Razão entre o número total de horas efetivamente utilizadas nas atividades mencionadas e o número total de horas planejadas para utilização, sendo retiradas as horas de manutenção e paradas programadas das instalações. Consideram-se no cálculo todos os usuários (internos e externos) em atividades relacionadas aos quatro eixos de atuação do CNPEM.																																							
Fórmula de cálculo: $\frac{\text{Número de horas efetivamente utilizadas no período}}{\text{Horas previstas de disponibilidade para uso das instalações no período}}$																																							
Tipo: Uso	Peso: 1	Unidade: Percentual	Qualificação: Eficácia																																				
Meta 2023:			70%																																				
Resultado 1º sem. de 2023:			40%																																				
Histórico:																																							
<table border="1"> <thead> <tr> <th>Ano</th> <th>Taxa de Ocupação (%)</th> <th>Meta (%)</th> </tr> </thead> <tbody> <tr><td>2013</td><td>68%</td><td>70%</td></tr> <tr><td>2014</td><td>81%</td><td>70%</td></tr> <tr><td>2015</td><td>73%</td><td>70%</td></tr> <tr><td>2016</td><td>73%</td><td>70%</td></tr> <tr><td>2017</td><td>83%</td><td>70%</td></tr> <tr><td>2018</td><td>89%</td><td>70%</td></tr> <tr><td>2019</td><td>83%</td><td>70%</td></tr> <tr><td>2020</td><td>50%</td><td>70%</td></tr> <tr><td>2021</td><td>72%</td><td>70%</td></tr> <tr><td>2022</td><td>70%</td><td>70%</td></tr> <tr><td>2023</td><td>40%</td><td>70%</td></tr> </tbody> </table>				Ano	Taxa de Ocupação (%)	Meta (%)	2013	68%	70%	2014	81%	70%	2015	73%	70%	2016	73%	70%	2017	83%	70%	2018	89%	70%	2019	83%	70%	2020	50%	70%	2021	72%	70%	2022	70%	70%	2023	40%	70%
Ano	Taxa de Ocupação (%)	Meta (%)																																					
2013	68%	70%																																					
2014	81%	70%																																					
2015	73%	70%																																					
2016	73%	70%																																					
2017	83%	70%																																					
2018	89%	70%																																					
2019	83%	70%																																					
2020	50%	70%																																					
2021	72%	70%																																					
2022	70%	70%																																					
2023	40%	70%																																					
Comentário: O número de horas disponíveis para uso das instalações é estimado no início do ano e considera as agendas de todas as instalações abertas no portal SAU Online do CNPEM. As horas disponibilizadas para uso das instalações abertas, denominador do indicador, é o produto dos dias úteis pelo número de horas dos turnos diários da instalação, menos a previsão de horas de manutenção e paradas programadas. As horas efetivamente utilizadas são aquelas associadas às propostas de pesquisa externas e internas																																							

agendadas e realizadas e a registros do tempo utilizado na execução de projetos em parceria com empresas, prestações de serviços, treinamento, entre outros eventos especiais.

Em 2023 foram disponibilizadas 80 mil horas para uso das instalações e contabilizadas 32 mil horas de uso, o que corresponde a uma taxa de ocupação de 40%.

Este indicador não inclui o Sirius.

Indicador 2:																																							
Taxa de ocupação das instalações por usuários externos																																							
Eixos de Atuação:																																							
Eixo 1 – Instalações abertas a usuários externos																																							
Objetivo Estratégico do CG:																																							
Prover e manter infraestrutura nacional de classe mundial para pesquisa, desenvolvimento e inovação nas suas áreas de atuação disponibilizada à comunidade de pesquisa acadêmica e industrial.																																							
Finalidade:																																							
Medir a ocupação dos Laboratórios Nacionais do CNPEM por usuários externos no período de referência																																							
Descrição:																																							
Razão entre o número de horas efetivamente utilizadas por usuários externos e o número de horas totais disponibilizadas para todos os eixos de atuação																																							
Fórmula de cálculo:																																							
$\frac{\text{Número de horas efetivamente utilizadas por usuários externos no período}}{\text{Horas previstas de disponibilidade para uso das instalações no período}}$																																							
Tipo: Uso	Peso: 1	Unidade: Percentual	Qualificação: Eficácia																																				
Meta 2023:			20%																																				
Resultado 1º sem. de 2023:			13%																																				
Histórico:																																							
<table border="1" style="margin: 10px auto; border-collapse: collapse;"> <thead> <tr> <th>Ano</th> <th>Resultado (%)</th> <th>Meta (%)</th> </tr> </thead> <tbody> <tr><td>2013</td><td>48%</td><td>48%</td></tr> <tr><td>2014</td><td>47%</td><td>47%</td></tr> <tr><td>2015</td><td>45%</td><td>45%</td></tr> <tr><td>2016</td><td>42%</td><td>42%</td></tr> <tr><td>2017</td><td>43%</td><td>43%</td></tr> <tr><td>2018</td><td>51%</td><td>51%</td></tr> <tr><td>2019</td><td>38%</td><td>40%</td></tr> <tr><td>2020</td><td>6%</td><td>6%</td></tr> <tr><td>2021</td><td>13%</td><td>13%</td></tr> <tr><td>2022</td><td>22%</td><td>15%</td></tr> <tr><td>2023</td><td>13%</td><td>20%</td></tr> </tbody> </table>				Ano	Resultado (%)	Meta (%)	2013	48%	48%	2014	47%	47%	2015	45%	45%	2016	42%	42%	2017	43%	43%	2018	51%	51%	2019	38%	40%	2020	6%	6%	2021	13%	13%	2022	22%	15%	2023	13%	20%
Ano	Resultado (%)	Meta (%)																																					
2013	48%	48%																																					
2014	47%	47%																																					
2015	45%	45%																																					
2016	42%	42%																																					
2017	43%	43%																																					
2018	51%	51%																																					
2019	38%	40%																																					
2020	6%	6%																																					
2021	13%	13%																																					
2022	22%	15%																																					
2023	13%	20%																																					
Comentário:																																							
<p>As horas disponibilizadas para uso das instalações no período, denominador do indicador, é o produto dos dias úteis pelo número de horas dos turnos diários da instalação, menos a previsão de horas de manutenção e de paradas programadas. O número de horas de uso das instalações para atendimento de propostas externas de pesquisa é medido por meio das horas agendadas com essa finalidade no portal SAU Online do CNPEM. No cálculo do indicador são consideradas apenas as propostas realizadas. No primeiro semestre de 2023, foram utilizadas cerca de 10 mil horas de equipamentos por pesquisadores externos, resultando numa taxa de ocupação de 13% neste eixo de atuação.</p>																																							
Este indicador não inclui o Sirius.																																							

Indicador 3:																																										
Beneficiários externos das instalações abertas																																										
Eixo de Atuação:																																										
Eixo 1 – Instalações abertas a usuários externos																																										
Objetivo Estratégico do CG:																																										
Prover e manter infraestrutura nacional de classe mundial para pesquisa, desenvolvimento e inovação nas suas áreas de atuação disponibilizada à comunidade de pesquisa acadêmica e industrial.																																										
Finalidade:																																										
Medir o universo de pesquisadores externos beneficiados pelo uso das instalações abertas do CNPEM, no ano de referência.																																										
Descrição:																																										
Número de beneficiários externos identificados nas propostas de pesquisa realizadas nas instalações abertas do CNPEM. Para esse cálculo, são considerados os pesquisadores que utilizaram diretamente as instalações e/ou integraram o grupo de pesquisa que realizou a proposta.																																										
Fórmula de cálculo:																																										
<i>Número total de beneficiários externos das instalações abertas do CNPEM no período</i>																																										
Tipo: Uso	Peso: 1	Unidade: Número Absoluto	Qualificação: Eficácia																																							
Meta 2023:			800																																							
Resultado 1º sem. de 2023:			591																																							
Histórico:																																										
<table border="1"> <thead> <tr> <th>Ano</th> <th>Resultado</th> <th>Meta</th> </tr> </thead> <tbody> <tr><td>2012</td><td>1812</td><td>1600</td></tr> <tr><td>2013</td><td>1894</td><td>1700</td></tr> <tr><td>2014</td><td>1865</td><td>1700</td></tr> <tr><td>2015</td><td>1911</td><td>1700</td></tr> <tr><td>2016</td><td>2122</td><td>1700</td></tr> <tr><td>2017</td><td>2246</td><td>1700</td></tr> <tr><td>2018</td><td>2503</td><td>1700</td></tr> <tr><td>2019</td><td>1554</td><td>1800</td></tr> <tr><td>2020</td><td>353</td><td>1600</td></tr> <tr><td>2021</td><td>515</td><td>1600</td></tr> <tr><td>2022</td><td>888</td><td>750</td></tr> <tr><td>2023</td><td>591</td><td>800</td></tr> </tbody> </table>				Ano	Resultado	Meta	2012	1812	1600	2013	1894	1700	2014	1865	1700	2015	1911	1700	2016	2122	1700	2017	2246	1700	2018	2503	1700	2019	1554	1800	2020	353	1600	2021	515	1600	2022	888	750	2023	591	800
Ano	Resultado	Meta																																								
2012	1812	1600																																								
2013	1894	1700																																								
2014	1865	1700																																								
2015	1911	1700																																								
2016	2122	1700																																								
2017	2246	1700																																								
2018	2503	1700																																								
2019	1554	1800																																								
2020	353	1600																																								
2021	515	1600																																								
2022	888	750																																								
2023	591	800																																								

Comentário:

A metodologia de cálculo deste indicador prevê a contabilização do número de pesquisadores externos beneficiados com a realização das propostas de pesquisa no CNPEM. Considera-se cada pesquisador uma única vez, ainda que ele tenha utilizado mais de uma instalação ou que esteja envolvido em mais de uma proposta de pesquisa. Assim, a somatória dos beneficiários por instalação é superior ao número total de pesquisadores beneficiados contabilizado no indicador.



Este indicador não inclui o Sirius.

Indicador 4:																																													
Propostas realizadas por usuários externos nas instalações abertas																																													
Eixo de Atuação: Eixo 1 - Instalações abertas a usuários externos																																													
Objetivo Estratégico do CG: Prover e manter infraestrutura nacional de classe mundial para pesquisa, desenvolvimento e inovação nas suas áreas de atuação disponibilizada à comunidade de pesquisa acadêmica e industrial.																																													
Finalidade: Medir o número de propostas realizadas nas instalações abertas do CNPEM.																																													
Descrição: Propostas realizadas por usuários externos nas instalações abertas do CNPEM, no ano de referência.																																													
Fórmula de cálculo: <i>Número total de propostas externas realizadas no período</i>																																													
Tipo: Uso	Peso: 3	Unidade: Número Absoluto	Qualificação: Eficácia																																										
Meta 2023:			450																																										
Resultado 1º sem. de 2023:			293																																										
Histórico:																																													
<table border="1"> <thead> <tr> <th>Ano</th> <th>Resultado</th> <th>Meta</th> </tr> </thead> <tbody> <tr><td>2011</td><td>917</td><td>917</td></tr> <tr><td>2012</td><td>906</td><td>906</td></tr> <tr><td>2013</td><td>937</td><td>937</td></tr> <tr><td>2014</td><td>949</td><td>949</td></tr> <tr><td>2015</td><td>991</td><td>991</td></tr> <tr><td>2016</td><td>1069</td><td>1069</td></tr> <tr><td>2017</td><td>1086</td><td>1086</td></tr> <tr><td>2018</td><td>1265</td><td>1265</td></tr> <tr><td>2019</td><td>753</td><td>900</td></tr> <tr><td>2020</td><td>168</td><td>870</td></tr> <tr><td>2021</td><td>249</td><td>870</td></tr> <tr><td>2022</td><td>499</td><td>870</td></tr> <tr><td>2023</td><td>293</td><td>450</td></tr> </tbody> </table>				Ano	Resultado	Meta	2011	917	917	2012	906	906	2013	937	937	2014	949	949	2015	991	991	2016	1069	1069	2017	1086	1086	2018	1265	1265	2019	753	900	2020	168	870	2021	249	870	2022	499	870	2023	293	450
Ano	Resultado	Meta																																											
2011	917	917																																											
2012	906	906																																											
2013	937	937																																											
2014	949	949																																											
2015	991	991																																											
2016	1069	1069																																											
2017	1086	1086																																											
2018	1265	1265																																											
2019	753	900																																											
2020	168	870																																											
2021	249	870																																											
2022	499	870																																											
2023	293	450																																											
Comentário: No período foram computadas 293 propostas de pesquisa externas realizadas nas instalações abertas do CNPEM.																																													
Este indicador não inclui o Sirius.																																													

Indicador 5:																																													
Índice de satisfação dos usuários externos																																													
Eixo de Atuação: Eixo 1 – Instalações abertas a usuários externos																																													
Objetivo Estratégico do CG: Prover e manter infraestrutura nacional de classe mundial para pesquisa, desenvolvimento e inovação nas suas áreas de atuação disponibilizada à comunidade de pesquisa acadêmica e industrial.																																													
Finalidade: Medir a satisfação dos usuários das instalações abertas de modo sistemático e periódico.																																													
Descrição: O indicador mede o índice de satisfação dos usuários externos com a utilização das instalações abertas do CNPEM, no ano de referência, com base em questão específica do formulário aplicado na realização da proposta de pesquisa.																																													
Fórmula de cálculo: $\frac{\text{Número de respostas "muito satisfeito" e "satisfeito" no período}}{\text{Número total de respostas no período}}$																																													
Tipo: Desempenho e Uso	Peso: 2	Unidade: Percentual	Qualificação: Efetividade																																										
Meta 2023:			85%																																										
Resultado 1º sem. de 2023:			100%																																										
Histórico:																																													
<table border="1"> <thead> <tr> <th>Ano</th> <th>Resultado (%)</th> <th>Meta (%)</th> </tr> </thead> <tbody> <tr><td>2011</td><td>85%</td><td>85%</td></tr> <tr><td>2012</td><td>94%</td><td>85%</td></tr> <tr><td>2013</td><td>95,2%</td><td>85%</td></tr> <tr><td>2014</td><td>95%</td><td>85%</td></tr> <tr><td>2015</td><td>97%</td><td>85%</td></tr> <tr><td>2016</td><td>92%</td><td>85%</td></tr> <tr><td>2017</td><td>95,2%</td><td>85%</td></tr> <tr><td>2018</td><td>96,1%</td><td>85%</td></tr> <tr><td>2019</td><td>99%</td><td>85%</td></tr> <tr><td>2020</td><td>100%</td><td>85%</td></tr> <tr><td>2021</td><td>96%</td><td>85%</td></tr> <tr><td>2022</td><td>92%</td><td>85%</td></tr> <tr><td>2023</td><td>100%</td><td>85%</td></tr> </tbody> </table>				Ano	Resultado (%)	Meta (%)	2011	85%	85%	2012	94%	85%	2013	95,2%	85%	2014	95%	85%	2015	97%	85%	2016	92%	85%	2017	95,2%	85%	2018	96,1%	85%	2019	99%	85%	2020	100%	85%	2021	96%	85%	2022	92%	85%	2023	100%	85%
Ano	Resultado (%)	Meta (%)																																											
2011	85%	85%																																											
2012	94%	85%																																											
2013	95,2%	85%																																											
2014	95%	85%																																											
2015	97%	85%																																											
2016	92%	85%																																											
2017	95,2%	85%																																											
2018	96,1%	85%																																											
2019	99%	85%																																											
2020	100%	85%																																											
2021	96%	85%																																											
2022	92%	85%																																											
2023	100%	85%																																											
Comentário: No primeiro semestre de 2023, 18 pesquisadores externos responsáveis pela execução de propostas de pesquisa preencheram o formulário de satisfação e todos escolheram as opções de resposta “muito satisfeito” ou “satisfeito” com o uso das instalações, resultando em índice de satisfação de 100%.																																													
Este indicador não inclui o Sirius.																																													

Indicador 6:																																							
Artigos publicados por pesquisadores externos																																							
Eixo de Atuação: Eixo 1 – Instalações abertas a usuários externos																																							
Objetivo Estratégico do CG: Prover e manter infraestrutura nacional de classe mundial para pesquisa, desenvolvimento e inovação nas suas áreas de atuação disponibilizada à comunidade de pesquisa acadêmica e industrial.																																							
Finalidade: Aferir resultados das atividades de pesquisa realizadas por pesquisadores externos, decorrentes do uso das instalações abertas do CNPEM, no ano de referência.																																							
Descrição: Razão entre o número de artigos de pesquisadores externos ao CNPEM que decorreu do uso das instalações no ano X, indexados na base <i>Web of Science</i> nos anos x, x+1, x+2, e o número de propostas realizadas no ano X.																																							
Fórmula de cálculo: $\frac{\text{Número de artigos de pesq. externos na base WoS nos anos } x, x + 1, x + 2}{\text{Número de propostas realizadas no ano } X}$																																							
Tipo: Uso	Peso: 4	Unidade: Razão	Qualificação: Efetividade																																				
Meta 2022:			0,75																																				
Resultado 1º sem. de 2022:			1,43																																				
Histórico:																																							
<table border="1"> <thead> <tr> <th>Ano</th> <th>Resultado</th> <th>Meta</th> </tr> </thead> <tbody> <tr><td>2013</td><td>0,69</td><td>0,75</td></tr> <tr><td>2014</td><td>0,82</td><td>0,75</td></tr> <tr><td>2015</td><td>0,79</td><td>0,75</td></tr> <tr><td>2016</td><td>0,79</td><td>0,75</td></tr> <tr><td>2017</td><td>0,77</td><td>0,75</td></tr> <tr><td>2018</td><td>0,77</td><td>0,75</td></tr> <tr><td>2019</td><td>0,75</td><td>0,75</td></tr> <tr><td>2020</td><td>0,71</td><td>0,75</td></tr> <tr><td>2021</td><td>1,11</td><td>0,75</td></tr> <tr><td>2022</td><td>3,9</td><td>0,75</td></tr> <tr><td>2023</td><td>1,43</td><td>0,75</td></tr> </tbody> </table>				Ano	Resultado	Meta	2013	0,69	0,75	2014	0,82	0,75	2015	0,79	0,75	2016	0,79	0,75	2017	0,77	0,75	2018	0,77	0,75	2019	0,75	0,75	2020	0,71	0,75	2021	1,11	0,75	2022	3,9	0,75	2023	1,43	0,75
Ano	Resultado	Meta																																					
2013	0,69	0,75																																					
2014	0,82	0,75																																					
2015	0,79	0,75																																					
2016	0,79	0,75																																					
2017	0,77	0,75																																					
2018	0,77	0,75																																					
2019	0,75	0,75																																					
2020	0,71	0,75																																					
2021	1,11	0,75																																					
2022	3,9	0,75																																					
2023	1,43	0,75																																					

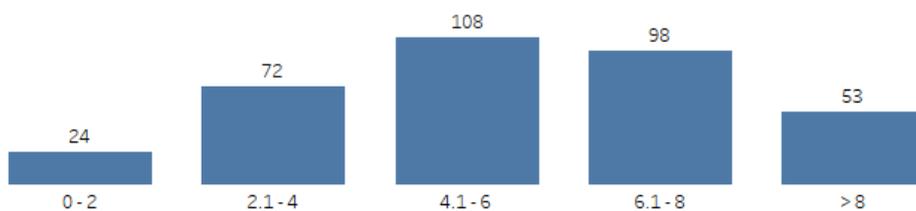
Comentário:

Para o ano de 2023, o indicador mede a produtividade científica dos beneficiários das propostas externas realizadas no CNPEM em 2021. Foram considerados todos os artigos publicados em 2021, 2022 e 2023 por pesquisadores envolvidos nas propostas de pesquisa externas a partir do uso das instalações do CNPEM em 2021. Na contabilização das publicações são incluídas apenas aquelas que fazem citação ao uso de instalações dos Laboratórios Nacionais.

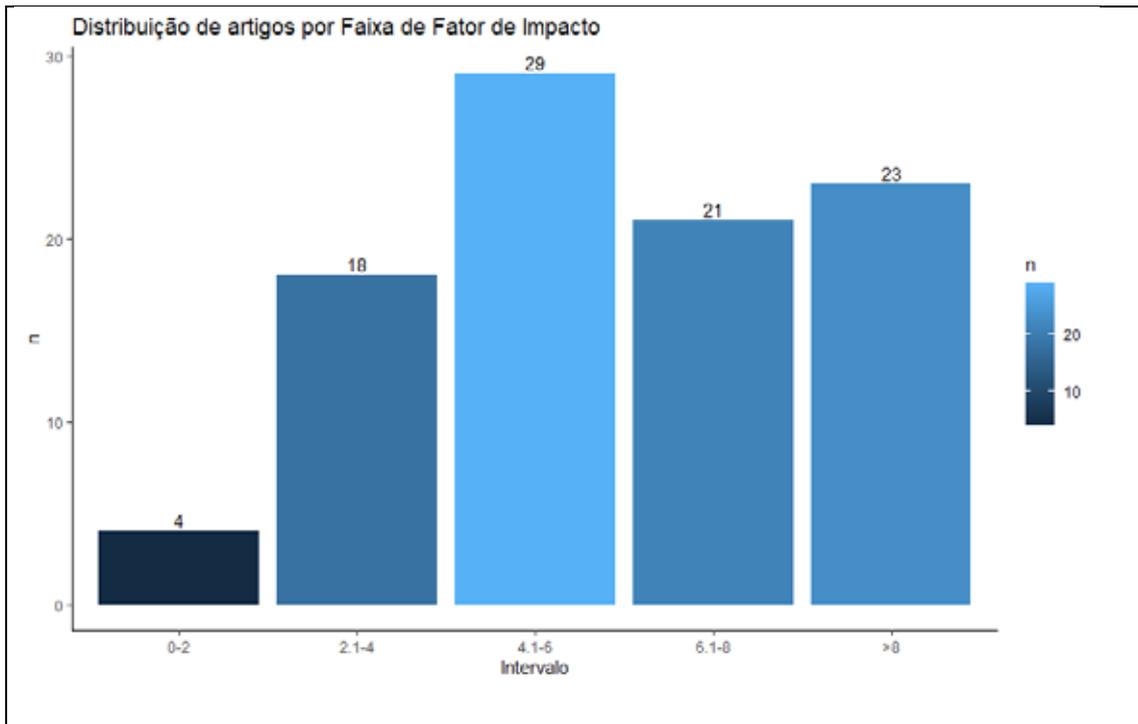
Vale observar que ao contrário de outras instituições de pesquisa que medem exclusivamente a produção científica de seus próprios funcionários, o Laboratório Nacional aberto deve aferir também os resultados obtidos por seus usuários externos, impondo desafios à metodologia de busca. O CNPEM recebe diretamente de seus beneficiários a relação de artigos publicados a partir do uso das instalações, via Portal de Usuários e/ou diretamente pela biblioteca. Contudo, como o número de beneficiários que reporta suas publicações não é totalmente satisfatório, essas informações são utilizadas para checagem no processo de busca. É possível que o número total de artigos reportado esteja subestimado devido a ausência de citações diretas ao CNPEM, impossibilitando a contabilização.

O número total de artigos computados entre 2021 e 2023 é 355 e o número de propostas realizadas em 2021, 249. O resultado apurado para o indicador totaliza taxa de 1,43. Para este indicador é realizado um cálculo composto, onde tanto a quantidade de publicações como a quantidade de propostas realizadas no ano de 2021 são importantes. Desde 2022, a alta taxa da publicação externa reflete a diminuição das propostas realizadas no ano computado, devido ao encerramento da operação para usuários da antiga fonte de luz síncrotron UVX em 2019 e, principalmente, pela redução drástica de propostas atendidas no período da pandemia de COVID-19.

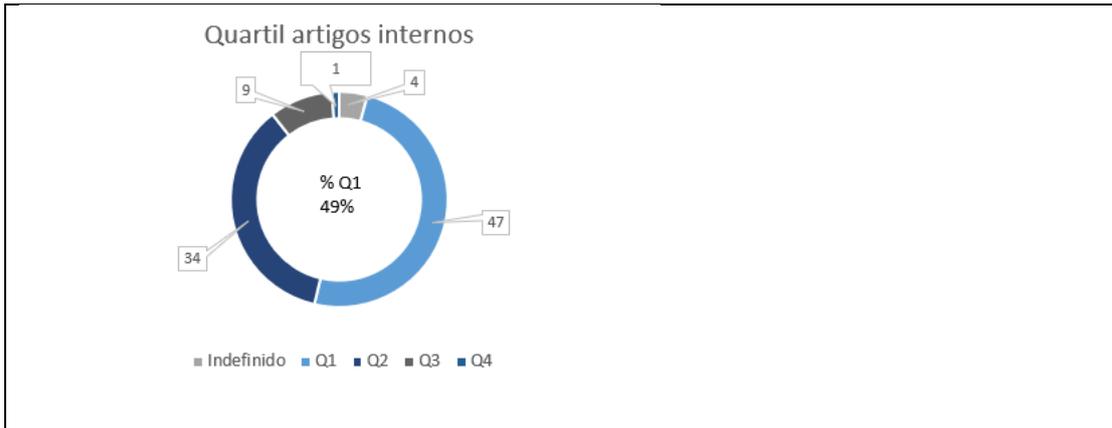
Distribuição de Artigos por Faixa de Fator de Impacto



Indicador 7:																																													
Artigos publicados por pesquisadores internos																																													
Eixo de Atuação: Eixo 2 – Pesquisa e desenvolvimento <i>in-house</i>																																													
Objetivo Estratégico do CG: Realizar e difundir pesquisa própria, desenvolvimento e inovação em nível dos melhores laboratórios similares no mundo, em áreas previstas na Política Nacional de Ciência, Tecnologia e Inovação.																																													
Finalidade: Aferir resultados das atividades de pesquisa interna realizadas por pesquisadores e especialistas do CNPEM envolvidos com essas atividades.																																													
Descrição: Razão entre o número de artigos publicados por pesquisadores e especialistas do CNPEM em periódicos indexados na base <i>Web of Science</i> , no ano de referência, e o número de pesquisadores e especialistas considerados.																																													
Fórmula de cálculo: $\frac{\text{Número de artigos de pesq. e especialistas internos na base WoS no período}}{\text{Número de pesquisadores e especialistas internos no período}}$																																													
Tipo: Uso	Peso: 4	Unidade: Razão	Qualificação: Efetividade																																										
Meta 2023:			2																																										
Resultado 1º sem. de 2023:			1																																										
Histórico:																																													
<table border="1"> <thead> <tr> <th>Ano</th> <th>Resultado</th> <th>Meta</th> </tr> </thead> <tbody> <tr><td>2011</td><td>2,1</td><td>2,1</td></tr> <tr><td>2012</td><td>2,34</td><td>2,1</td></tr> <tr><td>2013</td><td>2,1</td><td>2,1</td></tr> <tr><td>2014</td><td>1,95</td><td>2,1</td></tr> <tr><td>2015</td><td>1,9</td><td>2,1</td></tr> <tr><td>2016</td><td>2,2</td><td>2,1</td></tr> <tr><td>2017</td><td>2,5</td><td>2,1</td></tr> <tr><td>2018</td><td>2,1</td><td>2,1</td></tr> <tr><td>2019</td><td>2,5</td><td>2,1</td></tr> <tr><td>2020</td><td>2,4</td><td>2,1</td></tr> <tr><td>2021</td><td>2,3</td><td>2,1</td></tr> <tr><td>2022</td><td>1,8</td><td>2,1</td></tr> <tr><td>2023</td><td>1</td><td>2</td></tr> </tbody> </table>				Ano	Resultado	Meta	2011	2,1	2,1	2012	2,34	2,1	2013	2,1	2,1	2014	1,95	2,1	2015	1,9	2,1	2016	2,2	2,1	2017	2,5	2,1	2018	2,1	2,1	2019	2,5	2,1	2020	2,4	2,1	2021	2,3	2,1	2022	1,8	2,1	2023	1	2
Ano	Resultado	Meta																																											
2011	2,1	2,1																																											
2012	2,34	2,1																																											
2013	2,1	2,1																																											
2014	1,95	2,1																																											
2015	1,9	2,1																																											
2016	2,2	2,1																																											
2017	2,5	2,1																																											
2018	2,1	2,1																																											
2019	2,5	2,1																																											
2020	2,4	2,1																																											
2021	2,3	2,1																																											
2022	1,8	2,1																																											
2023	1	2																																											
Comentário: Para efeito de apuração do indicador, considera-se uma lista de 93 pesquisadores internos que, no primeiro semestre de 2023, foram responsáveis pela publicação de 95 artigos científicos indexados na base <i>Web of Science</i> , o que levou ao resultado de 1 artigo por pesquisador.																																													



Indicador 8:																											
Qualidade da produção científica interna																											
Eixo de Atuação: Eixo 2 – Pesquisa e desenvolvimento <i>in-house</i>																											
Objetivo Estratégico do CG: Realizar e difundir pesquisa própria, desenvolvimento e inovação em nível dos melhores laboratórios similares no mundo, em áreas previstas na Política Nacional de Ciência, Tecnologia e Inovação.																											
Finalidade: Aferir resultados das atividades de pesquisa interna realizadas por pesquisadores e especialistas do CNPEM envolvidos com essas atividades.																											
Descrição: Razão entre número de artigos publicados por pesquisadores/especialistas internos classificados no Quartil 1 e número total de artigos publicados (indexados na base WoS).																											
Fórmula de cálculo: $\frac{\text{Número de artigos de pesq. e especialistas internos classificados no Quartil 1}}{\text{Número total de artigos publicados}}$																											
Tipo: Uso	Peso: 1	Unidade: Razão	Qualificação: Efetividade																								
Meta 2023:			50%																								
Resultado 1º sem. de 2023:			49%																								
Histórico: Este indicador passou a compor o Quadro de Indicadores e Metas do Contrato de Gestão em 2017.																											
<table border="1"> <caption>Histórico do Indicador (2017-2023)</caption> <thead> <tr> <th>Ano</th> <th>Resultado (%)</th> <th>Meta (%)</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>2017</td> <td>53%</td> <td>50%</td> </tr> <tr> <td>2018</td> <td>53%</td> <td>50%</td> </tr> <tr> <td>2019</td> <td>44%</td> <td>50%</td> </tr> <tr> <td>2020</td> <td>50%</td> <td>50%</td> </tr> <tr> <td>2021</td> <td>57%</td> <td>50%</td> </tr> <tr> <td>2022</td> <td>55%</td> <td>50%</td> </tr> <tr> <td>2023</td> <td>49%</td> <td>50%</td> </tr> </tbody> </table>				Ano	Resultado (%)	Meta (%)	2017	53%	50%	2018	53%	50%	2019	44%	50%	2020	50%	50%	2021	57%	50%	2022	55%	50%	2023	49%	50%
Ano	Resultado (%)	Meta (%)																									
2017	53%	50%																									
2018	53%	50%																									
2019	44%	50%																									
2020	50%	50%																									
2021	57%	50%																									
2022	55%	50%																									
2023	49%	50%																									
Comentário: A medida utilizada afere a qualidade da produção científica interna, por meio do padrão de quartis do <i>Journal of Citation Report (JCR)</i> . Vale ressaltar que a classificação por quartis é realizada a partir dos fatores de impacto das revistas, respeitando as diferenças entre áreas do conhecimento. Em 2023, 47 dos 95 artigos publicados, por pesquisadores internos, foram classificados no primeiro quartil de Fator de Impacto, correspondendo a 49% da produção científica total.																											



Indicador 9:																											
Taxa de coautoria internacional																											
Eixo de Atuação: Eixo 2 – Pesquisa e desenvolvimento <i>in-house</i>																											
Objetivo Estratégico do CG: Realizar e difundir pesquisa própria, desenvolvimento e inovação em nível dos melhores laboratórios similares no mundo, em áreas previstas na Política Nacional de Ciência, Tecnologia e Inovação.																											
Finalidade: Medir o esforço de cooperação dos Laboratórios Nacionais com instituições de ensino e pesquisa, voltado ao fortalecimento da capacidade mútua de solução de problemas científicos e tecnológicos.																											
Descrição: Razão entre o número de artigos publicado por pesquisadores internos (indexados na base WoS) com coautor filiado a instituições internacionais e o número total de artigos publicado por pesquisadores internos (indexados na base WoS).																											
Fórmula de cálculo: $\frac{\text{Número de artigos de pesq. e especialistas internos com coautoria internacional}}{\text{Número total de artigos publicados}}$																											
Tipo: Uso	Peso: 1	Unidade: Razão	Qualificação: Efetividade																								
Meta 2023:			30%																								
Resultado 1º sem. de 2023:			50%																								
Histórico: Este indicador passou a compor o Quadro de Indicadores e Metas do Contrato de Gestão em 2017.																											
<table border="1"> <caption>Dados do Gráfico de Histórico</caption> <thead> <tr> <th>Ano</th> <th>Resultado (%)</th> <th>Meta (%)</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>2017</td> <td>41%</td> <td>30%</td> </tr> <tr> <td>2018</td> <td>34%</td> <td>30%</td> </tr> <tr> <td>2019</td> <td>41%</td> <td>30%</td> </tr> <tr> <td>2020</td> <td>42%</td> <td>30%</td> </tr> <tr> <td>2021</td> <td>33%</td> <td>30%</td> </tr> <tr> <td>2022</td> <td>44%</td> <td>30%</td> </tr> <tr> <td>2023</td> <td>50%</td> <td>30%</td> </tr> </tbody> </table>				Ano	Resultado (%)	Meta (%)	2017	41%	30%	2018	34%	30%	2019	41%	30%	2020	42%	30%	2021	33%	30%	2022	44%	30%	2023	50%	30%
Ano	Resultado (%)	Meta (%)																									
2017	41%	30%																									
2018	34%	30%																									
2019	41%	30%																									
2020	42%	30%																									
2021	33%	30%																									
2022	44%	30%																									
2023	50%	30%																									
Comentário: O indicador mede o número total de artigos publicados por pesquisadores internos que apresenta coautores vinculados a organizações internacionais. Em 2023, 48 publicações contaram com autores internacionais, envolvendo 69 instituições estrangeiras de 24 países.																											

Indicador 10:																																										
Parcerias em projetos de P&D com instituições de ensino e pesquisa																																										
Eixo de Atuação: Eixo 2 – Pesquisa e desenvolvimento <i>in-house</i>																																										
Objetivo Estratégico do CG: Implantar e gerir a infraestrutura do CNPEM, visando ganhos de eficiência e eficácia mediante mecanismos de gestão, informação e difusão.																																										
Finalidade: Medir o esforço de cooperação dos Laboratórios Nacionais com instituições de ensino e pesquisa, voltado ao fortalecimento da capacidade mútua de solução de problemas científicos e tecnológicos.																																										
Descrição: Para a apuração deste indicador são contabilizados acordos de cooperação e contratos formalizados com instituições de ensino e pesquisa, vigentes no ano de referência.																																										
Fórmula de cálculo: <i>Número total de acordos e contratos com instituições de ensino e pesquisas vigentes no período</i>																																										
Tipo: Desempenho	Peso: 2	Unidade: Número Absoluto	Qualificação: Eficiência																																							
Meta 2023:			20																																							
Resultado 1º sem. de 2023:			23																																							
Histórico:																																										
<table border="1"> <caption>Dados do Gráfico de Histórico</caption> <thead> <tr> <th>Ano</th> <th>Resultado</th> <th>Meta</th> </tr> </thead> <tbody> <tr><td>2012</td><td>14</td><td>20</td></tr> <tr><td>2013</td><td>16</td><td>20</td></tr> <tr><td>2014</td><td>23</td><td>20</td></tr> <tr><td>2015</td><td>32</td><td>20</td></tr> <tr><td>2016</td><td>34</td><td>20</td></tr> <tr><td>2017</td><td>29</td><td>20</td></tr> <tr><td>2018</td><td>27</td><td>20</td></tr> <tr><td>2019</td><td>26</td><td>20</td></tr> <tr><td>2020</td><td>26</td><td>20</td></tr> <tr><td>2021</td><td>22</td><td>20</td></tr> <tr><td>2022</td><td>22</td><td>20</td></tr> <tr><td>2023</td><td>23</td><td>20</td></tr> </tbody> </table>				Ano	Resultado	Meta	2012	14	20	2013	16	20	2014	23	20	2015	32	20	2016	34	20	2017	29	20	2018	27	20	2019	26	20	2020	26	20	2021	22	20	2022	22	20	2023	23	20
Ano	Resultado	Meta																																								
2012	14	20																																								
2013	16	20																																								
2014	23	20																																								
2015	32	20																																								
2016	34	20																																								
2017	29	20																																								
2018	27	20																																								
2019	26	20																																								
2020	26	20																																								
2021	22	20																																								
2022	22	20																																								
2023	23	20																																								
Comentário: No primeiro semestre o resultado do indicador supera a meta pactuada para o ano. No período, o CNPEM teve 23 acordos com instituições de ensino e pesquisa, no Brasil e no exterior.																																										
LN	Instituicao_Parceira	Início da Vigência	Fim dea Vigência																																							
LNLS	CONICET - Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas	Out/2012	Out/2027																																							
LNLS	CERN - European Organization for Nuclear Research	Jan/2013	Jan/2033																																							
LN BIO	MS - Ministério da Saúde	Dez/2013	Nov/2023																																							
LN BIO	BOLDRINI - Centro Infantil de Investigação Hematológicas Dr. Domingos A. Boldrini	Dez/2011	Dez/2023																																							

	Rheabiotech Desenvolvimento, Produção e Comercialização de Produtos de Biotecnologia LTDA		
LNNANO	FINEP - Financiadora de Estudos e Projetos	Mar/2018	Mar/2023
LNLS	FINEP - Financiadora de Estudos e Projetos	Mar/2018	Set/2023
LN BIO	MS - Ministério da Saúde	Mar/2019	Abr/2024
LNLS	MPG - Max-Planck-Gesellschaft zur Förderung der Wissenschaften	Mai/2019	Abr/2024
LNLS	KAUST - King Abdullah University of Science and Technology	Mar/2020	Jun/2023
LNNANO	MCTIC - Ministério da Ciência, Tecnologia, Inovações e Comunicações	Mar/2020	Mar/2024
LNLS	GSI - Helmholtzzentrum für Schwerionenforschung GmbH	Fev/2020	Fev/2025
LN BIO	IDPC - Instituto Dante Pazzanese Cardiologia	Jun/2020	Jun/2025
	FAJ - Fundação Adib Jatene		
LN BIO	MS - Ministério da Saúde	Out/2021	Dez/2024
LN BIO	MS - Ministério da Saúde	Out/2021	Dez/2024
LN BIO	MS - Ministério da Saúde	Fev/2022	Fev/2025
LNLS	FINEP - Financiadora de Estudos e Projetos	Mai/2022	Mai/2025
	UFV - Universidade Federal de Viçosa		
CNPEM	FINEP - Financiadora de Estudos e Projetos	Nov/2022	Nov/2025
	FUSP - Fundação de Apoio à Universidade de São Paulo		
	USP - Universidade de São Paulo		
	Instituto Presbiteriano Mackenzie		
LNLS	CERN - European Organization for Nuclear Research	Fev/2022	Fev/2023
CNPEM	Silicon Valley - Silicon Valley Community Foundation	Dez/2021	Nov/2024
LNLS	CERN - European Organization for Nuclear Research	Out/2022	Dez/2023
LNNANO	CSIC - Agência Estatal Consejo Superior de Investigaciones Científicas M.P.	Fev/2023	Fev/2026
	IPM - Institut Pasteur de Montevideo		
	UPCH - Universidad Peruana Cayetano Heredia		
	UNL - Universidade Nova de Lisboa		
	I3S - Instituto de Investigação e Inovação em Saúde da Universidade do Porto		
	UFRJ - Universidade Federal do Rio de Janeiro		
CNR - Consiglio Nazionale Delle Ricerche			
LN BIO	MS - Ministério da Saúde	Abr/2022	Abr/2025
LN BIO	IAEA - International Atomic Energy Agency	Jun/2023	Jul/2028

Indicador 11:																																													
Parcerias em projetos PD&I																																													
Eixo de Atuação:																																													
Eixo 3 – Apoio à geração de inovação																																													
Objetivo Estratégico do CG:																																													
Implantar e gerir a infraestrutura do CNPEM, visando ganhos de eficiência e eficácia mediante mecanismos de gestão, informação e difusão.																																													
Finalidade:																																													
Medir o esforço de cooperação dos Laboratórios Nacionais com empresas para o fortalecimento da capacidade de inovação no País.																																													
Descrição:																																													
Para a apuração deste indicador serão contabilizados acordos de cooperação formalizados com empresas, vigentes no ano de referência.																																													
Fórmula de cálculo:																																													
<i>Número total de acordo com empresas vigentes no período</i>																																													
Tipo: Desempenho	Peso: 2	Unidade: Número Absoluto	Qualificação: Eficiência																																										
Meta 2023:			30																																										
Resultado 1º sem. de 2023:			30																																										
Histórico:																																													
<table border="1" style="display: none;"> <thead> <tr> <th>Ano</th> <th>Resultado</th> <th>Meta</th> </tr> </thead> <tbody> <tr><td>2011</td><td>23</td><td>16</td></tr> <tr><td>2012</td><td>24</td><td>24</td></tr> <tr><td>2013</td><td>32</td><td>24</td></tr> <tr><td>2014</td><td>39</td><td>39</td></tr> <tr><td>2015</td><td>42</td><td>39</td></tr> <tr><td>2016</td><td>45</td><td>39</td></tr> <tr><td>2017</td><td>45</td><td>39</td></tr> <tr><td>2018</td><td>40</td><td>39</td></tr> <tr><td>2019</td><td>43</td><td>39</td></tr> <tr><td>2020</td><td>34</td><td>35</td></tr> <tr><td>2021</td><td>34</td><td>35</td></tr> <tr><td>2022</td><td>40</td><td>35</td></tr> <tr><td>2023</td><td>30</td><td>30</td></tr> </tbody> </table>				Ano	Resultado	Meta	2011	23	16	2012	24	24	2013	32	24	2014	39	39	2015	42	39	2016	45	39	2017	45	39	2018	40	39	2019	43	39	2020	34	35	2021	34	35	2022	40	35	2023	30	30
Ano	Resultado	Meta																																											
2011	23	16																																											
2012	24	24																																											
2013	32	24																																											
2014	39	39																																											
2015	42	39																																											
2016	45	39																																											
2017	45	39																																											
2018	40	39																																											
2019	43	39																																											
2020	34	35																																											
2021	34	35																																											
2022	40	35																																											
2023	30	30																																											
Comentário:																																													
O resultado do indicador no primeiro semestre supera a meta pactuada. No período, o CNPEM teve 30 projetos vigentes em parceria com empresas de diversos portes e setores de aplicação.																																													
LN	Nome Instituição/Empresa	Setor de Aplicação	Início da Vigência	Fim da Vigência																																									
LNLS	ADEST Técnicas para soldagem de Metais Ltda	Petróleo e Gás	Jun/2007	Nov/2027																																									
LNBR	Rhodia Poliamida e Especialidades Ltda	Química Verde	Out/2011	Out/2024																																									
LNBR	Empresa Brasileira de Pesquisa Agropecuária	Agricultura e Agropecuária	Dez/2016	Jun/2024																																									
LN BIO	Phytobios Pesquisa, Desenvolvimento e Inovação Ltda	Química Verde	Set/2017	Set/2032																																									
LNNANO	Petróleo Brasileiro S.A.	Petróleo e Gás	Jun/2018	Fev/2023																																									

LNNANO	Petróleo Brasileiro S.A.	Petróleo e Gás	Mar/2019	Mar/2024
LNBR	Petróleo Brasileiro S.A.	Energias Renováveis	Abr/2019	Abr/2024
	Embraer S.A.			
	Fibria Celulose S.A.			
	Klabin S.A.			
	IPT - Instituto de Pesquisas Tecnológicas do Estado de São Paulo S.A.			
	FEI - Fundação Educacional Inaciana Padre Sabóia de Medeiros			
	UNICAMP - Universidade Estadual de Campinas			
	UFRJ - Universidade Federal do Rio de Janeiro			
	INT - Instituto Nacional De Tecnologia			
	UFU - Universidade Federal de Uberlândia			
	UFV - Universidade Federal de Viçosa			
	FAPESP - Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de São Paulo			
	UFPE - Universidade Federal de Pernambuco			
	UNIFEI - Universidade Federal de Itajubá			
	UFSM – Universidade Federal de Santa Maria			
	FAPEMIG - Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de Minas Gerais			
	FACEPE - Fundação de Amparo à Ciência e Tecnologia do Estado de Pernambuco			
FAPERGS - Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado do Rio Grande do Sul				
FUNARBE - Fundação Arthur Bernardes				
LNNANO	FUNDEP - Fundação de Desenvolvimento da Pesquisa	Materiais Avançados	Jun/2020	Jun/2023
	SE7E Digital Sistema e Tecnologia Ltda			
LNBR	Vale S.A.	Química Verde	Dez/2020	Nov/2023
	EMBRAPII - Empresa Brasileira de Pesquisa e Inovação Industrial			
	Centro Nacional de Pesquisa em Energia e Materiais			
	ITV - Associação Instituto Tecnológico Vale			
LNNANO	Klabin S.A.	Química Verde	Mai/2021	Nov/2023
	Suzano S.A.			
	EMBRAPII - Empresa Brasileira de Pesquisa e Inovação Industrial			
	Centro Nacional de Pesquisa em Energia e Materiais			
	Associação Brasileira Técnica de Celulose e Pap			
LNNANO	Petróleo Brasileiro S.A.	Petróleo e Gás	Set/2021	Mar/2025
LNLS	Petróleo Brasileiro S.A.	Instrumentação Avançada	Set/2021	Set/2023
LNBIO	Cimed Indústria de Medicamentos LTDA	Fármacos e Medicamentos	Out/2021	Out/2023
	AIRVANTIS			
LNBR	Petróleo Brasileiro S.A.	Energias Renováveis	Nov/2021	Mai/2023
LNLS	Petróleo Brasileiro S.A.	Petróleo e Gás	Out/2021	Out/2023
LNBIO	3D Biotechnology Solutions - 3DBS	Métodos e Dispositivos para a Área da Saúde	Nov/2021	Mar/2024
LNBIO	Nintx Pesquisa e Desenvolvimento LTDA	Fármacos e Medicamentos	Mai/2022	Nov/2023

	EMBRAPII - Empresa Brasileira de Pesquisa e Inovação Industrial			
	Centro Nacional de Pesquisa em Energia e Materiais			
LNBIO	Nintx Pesquisa e Desenvolvimento LTDA	Fármacos e Medicamentos	Jun/2022	Mar/2024
	EMBRAPII - Empresa Brasileira de Pesquisa e Inovação Industrial			
	Centro Nacional de Pesquisa em Energia e Materiais			
LNBIO	Advagen Biotech LTDA	Métodos e Dispositivos para a Área da Saúde	Ago/2021	Abr/2023
CNPEM	Companhia Brasileira de Metalurgia e Mineração	Materiais Avançados	Jul/2022	Jul/2023
LNNANO	Petróleo Brasileiro S.A.	Petróleo e Gás	Jul/2022	Jul/2025
LNBIO	Nintx Pesquisa e Desenvolvimento LTDA	Fármacos e Medicamentos	Jul/2022	Abr/2024
	EMBRAPII - Empresa Brasileira de Pesquisa e Inovação Industrial			
	Centro Nacional de Pesquisa em Energia e Materiais			
LNBR	Sinochem Petróleo Brasil Ltda	Energias Renováveis	Ago/2022	Fev/2025
	EMBRAPII - Empresa Brasileira de Pesquisa e Inovação Industrial			
	Centro Nacional de Pesquisa em Energia e Materiais			
LNBR	EQUINOR BRASIL ENERGIA LTDA.	Energias Renováveis	Jul/2022	Jul/2026
	EMBRAPII - Empresa Brasileira de Pesquisa e Inovação Industrial			
	Centro Nacional de Pesquisa em Energia e Materiais			
CNPEM	PI-TECNOLOGIA LTDA	Instrumentação Avançada	Abr/2022	Set/2024
	Centro Nacional de Pesquisa em Energia e Materiais			
LNNANO	FUNDEP - Fundação de Desenvolvimento da Pesquisa	Materiais Avançados	Out/2022	Out/2024
	NCHEMI Engenharia de Materiais Ltda			
LNBIO	Phytobios Pesquisa, Desenvolvimento e Inovação Ltda	Fármacos e Medicamentos	Out/2022	Mar/2025
	EMBRAPII - Empresa Brasileira de Pesquisa e Inovação Industrial			
	Centro Nacional de Pesquisa em Energia e Materiais			
	Aché Laboratórios Farmacêuticos S.A.			
LNLS	EQUINOR BRASIL ENERGIA LTDA.	Energias Renováveis	Dez/2022	Dez/2026
LNLS	EQUINOR BRASIL ENERGIA LTDA.	Energias Renováveis	Dez/2022	Dez/2026
LNBIO	CRISTÁLIA PRODUTOS QUÍMICOS FARMACÊUTICAS LTDA	Fármacos e Medicamentos	Jun/2023	Jun/2026
	Phytobios Pesquisa, Desenvolvimento e Inovação Ltda			
	Nintx Pesquisa e Desenvolvimento LTDA			
	Centro Nacional de Pesquisa em Energia e Materiais			
	USP - Universidade de São Paulo			
	Fundação de Apoio ao Ensino, Pesquisa e Assistência do HCFMRP-USP			
	EMBRAPII - Empresa Brasileira de Pesquisa e Inovação Industrial			

Indicador 12:																																							
Recursos associados à inovação																																							
Eixo de Atuação: Eixo 3 – Apoio à geração de inovação																																							
Objetivo Estratégico do CG: Implantar e gerir a infraestrutura do CNPEM, visando ganhos de eficiência e eficácia mediante mecanismos de gestão, informação e difusão.																																							
Finalidade: Aferir o volume de recursos associados a projetos de parceria e contratos de prestação de serviços envolvendo empresas dos setores de agricultura, indústria e serviços.																																							
Descrição: Razão entre o volume de recursos associados a projetos de parceria e contratos de prestação de serviços diretamente relacionados à inovação e o volume de recursos recebidos, no ano de referência.																																							
Fórmula de cálculo: $\frac{\text{Recursos de projetos e contratos com empresas recebidos no período}}{\text{Recursos totais recebidos no período}}$																																							
Tipo: Desempenho	Peso: 2	Unidade: Percentual	Qualificação: Eficiência																																				
Meta 2023:			8%																																				
Resultado 1º sem. de 2023:			21%																																				
Histórico:																																							
<table border="1"> <thead> <tr> <th>Ano</th> <th>Resultado (%)</th> <th>Meta (%)</th> </tr> </thead> <tbody> <tr><td>2013</td><td>12%</td><td>8%</td></tr> <tr><td>2014</td><td>16%</td><td>8%</td></tr> <tr><td>2015</td><td>25%</td><td>8%</td></tr> <tr><td>2016</td><td>13%</td><td>8%</td></tr> <tr><td>2017</td><td>16%</td><td>8%</td></tr> <tr><td>2018</td><td>11%</td><td>8%</td></tr> <tr><td>2019</td><td>18%</td><td>8%</td></tr> <tr><td>2020</td><td>10%</td><td>8%</td></tr> <tr><td>2021</td><td>28%</td><td>8%</td></tr> <tr><td>2022</td><td>14%</td><td>8%</td></tr> <tr><td>2023</td><td>21%</td><td>8%</td></tr> </tbody> </table>				Ano	Resultado (%)	Meta (%)	2013	12%	8%	2014	16%	8%	2015	25%	8%	2016	13%	8%	2017	16%	8%	2018	11%	8%	2019	18%	8%	2020	10%	8%	2021	28%	8%	2022	14%	8%	2023	21%	8%
Ano	Resultado (%)	Meta (%)																																					
2013	12%	8%																																					
2014	16%	8%																																					
2015	25%	8%																																					
2016	13%	8%																																					
2017	16%	8%																																					
2018	11%	8%																																					
2019	18%	8%																																					
2020	10%	8%																																					
2021	28%	8%																																					
2022	14%	8%																																					
2023	21%	8%																																					
Comentário: Em 2023 foram recebidos cerca de R\$ 17 milhões provenientes de projetos em parceria com empresas e de contratos de prestação de serviços voltados à inovação. No mesmo ano, o CNPEM recebeu um volume de R\$ 84 milhões de todas as fontes, sendo 42 milhões provenientes do Contrato de Gestão. O resultado apurado para o indicador supera a meta pactuada, atingindo 21%.																																							

Indicador 12

Data base: 30/06/2023

Recursos de Projetos e Contratos com empresas	17.491
Convênios com Inovação	16.861
Devolução de Convênios e Projetos	-616
Prestação de Serviços	1.246
Recursos Totais Recebidos	83.674
Contrato de Gestão - 2023	42.000
Convênios e Projetos	26.979
Devolução de Convênios e Projetos	-1.447
Prestação de Serviço	1.246
Rendimento Financeiro	7.695
Outras Receitas	1.761
Auxílios Individuais (Recursos executados)	5.441

Indicador 12: 21%

Indicador 13:																																										
Tecnologias protegidas																																										
Eixo de Atuação:																																										
Eixo 2 – Pesquisa e desenvolvimento <i>in-house</i>																																										
Eixo 3 – Apoio à geração de inovação																																										
Objetivo Estratégico do CG:																																										
Realizar e difundir pesquisa própria, desenvolvimento e inovação em nível dos melhores laboratórios similares no mundo, em áreas previstas na Política Nacional de Ciência, Tecnologia e Inovação.																																										
Finalidade:																																										
Aferir resultados das atividades de pesquisa e desenvolvimento próprias dos Laboratórios Nacionais do CNPEM.																																										
Descrição:																																										
Para a apuração deste indicador são contabilizados pedidos de patentes, registros de <i>software</i> e modelos de utilidade depositados no Instituto Nacional de Propriedade industrial ou em outros escritórios de patentes, no ano de referência.																																										
Fórmula de cálculo:																																										
<i>Número total de pedidos de propriedade intelectual depositados no período</i>																																										
Tipo: Desempenho	Peso: 1	Unidade: Número Absoluto	Qualificação: Efetividade																																							
Meta 2023:			8																																							
Resultado 1º sem. de 2023:			5																																							
Histórico:																																										
<table border="1"> <thead> <tr> <th>Ano</th> <th>Resultado</th> <th>Meta</th> </tr> </thead> <tbody> <tr><td>2012</td><td>6</td><td>6</td></tr> <tr><td>2013</td><td>10</td><td>6</td></tr> <tr><td>2014</td><td>9</td><td>9</td></tr> <tr><td>2015</td><td>9</td><td>9</td></tr> <tr><td>2016</td><td>5</td><td>9</td></tr> <tr><td>2017</td><td>11</td><td>9</td></tr> <tr><td>2018</td><td>8</td><td>9</td></tr> <tr><td>2019</td><td>16</td><td>9</td></tr> <tr><td>2020</td><td>18</td><td>9</td></tr> <tr><td>2021</td><td>23</td><td>9</td></tr> <tr><td>2022</td><td>16</td><td>8</td></tr> <tr><td>2023</td><td>5</td><td>8</td></tr> </tbody> </table>				Ano	Resultado	Meta	2012	6	6	2013	10	6	2014	9	9	2015	9	9	2016	5	9	2017	11	9	2018	8	9	2019	16	9	2020	18	9	2021	23	9	2022	16	8	2023	5	8
Ano	Resultado	Meta																																								
2012	6	6																																								
2013	10	6																																								
2014	9	9																																								
2015	9	9																																								
2016	5	9																																								
2017	11	9																																								
2018	8	9																																								
2019	16	9																																								
2020	18	9																																								
2021	23	9																																								
2022	16	8																																								
2023	5	8																																								
Comentário:																																										
No primeiro semestre de 2023 o CNPEM depositou 5 novos pedidos de propriedade intelectual, sendo 6 patentes e 1 certificado de adição.																																										

Processo	Título PI	Data Registro	LN
BR102023004464-6	Nanocompósitos porosos de celulose nanofibrilada oxidada e látex de borracha natural compreendendo óxidos de metais antimicrobianos, processos de sua produção e usos	Mar/2023	LNNANO
BR102023005372-6	Processo de produção de composição de óxidos a partir de soluções poliméricas contendo um ou mais cátions, Composição de óxidos e Processo de deposição de filme fino sobre substrato	Mar/2023	LNNANO
BR102023008457-5	Sistema Fotoeletroquímico com Monitoramento de Parâmetros Físico-Químicos	Mai/2023	LNNANO
BR512023001444-3	NP3 Blob Label	Mai/2023	LNBIO
BR102023011680-3	Sensor impedimétrico mesofluídico para análise de incrustações em aço inox	Jun/2023	LNNANO

Indicador 14:																											
Horas de capacitação de pesquisadores externos																											
Eixo de Atuação: Eixo 4 – Treinamento, educação e extensão																											
Objetivo Estratégico do CG: Implantar e gerir a infraestrutura do CNPEM, visando ganhos de eficiência e eficácia mediante mecanismos de gestão, informação e difusão.																											
Finalidade: Medir o esforço dos Laboratórios Nacionais na capacitação de pesquisadores da comunidade científica e tecnológica brasileira.																											
Descrição: Número total de horas de eventos de capacitação organizados pelo CNPEM																											
Fórmula de cálculo: <i>Número total horas de eventos de capacitação organizados pelo CNPEM</i>																											
Tipo: Uso	Peso: 2	Unidade: Número Absoluto	Qualificação: Eficácia																								
Meta 2023:			200																								
Resultado 1º sem. de 2023:			86																								
Histórico: Este indicador passou a compor o Quadro de Indicadores e Metas do Contrato de Gestão em 2017.																											
<table border="1"> <thead> <tr> <th>Ano</th> <th>Resultado</th> <th>Meta</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>2017</td> <td>239</td> <td>300</td> </tr> <tr> <td>2018</td> <td>442</td> <td>300</td> </tr> <tr> <td>2019</td> <td>372</td> <td>300</td> </tr> <tr> <td>2020</td> <td>60</td> <td>300</td> </tr> <tr> <td>2021</td> <td>176</td> <td>300</td> </tr> <tr> <td>2022</td> <td>242</td> <td>200</td> </tr> <tr> <td>2023</td> <td>86</td> <td>200</td> </tr> </tbody> </table>				Ano	Resultado	Meta	2017	239	300	2018	442	300	2019	372	300	2020	60	300	2021	176	300	2022	242	200	2023	86	200
Ano	Resultado	Meta																									
2017	239	300																									
2018	442	300																									
2019	372	300																									
2020	60	300																									
2021	176	300																									
2022	242	200																									
2023	86	200																									
Comentário: No primeiro semestre de 2023 foram realizados 3 eventos, com 74 participantes externos, contabilizando 86 horas de capacitação.																											
<table border="1"> <thead> <tr> <th>LN</th> <th>Evento</th> <th>Horas</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>LNLS</td> <td>Curso Introdutório Fluka</td> <td>30 horas</td> </tr> <tr> <td>CNPEM</td> <td>Programa CNPEM de Capacitação para Trabalho em Laboratório NB3 - 2ª edição</td> <td>24 horas</td> </tr> <tr> <td>LNBR</td> <td>6ª Edição - Curso para Operação de Biorreatores de Bancada</td> <td>32 horas</td> </tr> </tbody> </table>				LN	Evento	Horas	LNLS	Curso Introdutório Fluka	30 horas	CNPEM	Programa CNPEM de Capacitação para Trabalho em Laboratório NB3 - 2ª edição	24 horas	LNBR	6ª Edição - Curso para Operação de Biorreatores de Bancada	32 horas												
LN	Evento	Horas																									
LNLS	Curso Introdutório Fluka	30 horas																									
CNPEM	Programa CNPEM de Capacitação para Trabalho em Laboratório NB3 - 2ª edição	24 horas																									
LNBR	6ª Edição - Curso para Operação de Biorreatores de Bancada	32 horas																									

Indicador 15:																											
Número de pesquisadores externos capacitados																											
Eixo de Atuação: Eixo 4 – Treinamento, educação e extensão																											
Objetivo Estratégico do CG: Implantar e gerir a infraestrutura do CNPEM, visando ganhos de eficiência e eficácia mediante mecanismos de gestão, informação e difusão.																											
Finalidade: Medir o esforço dos Laboratórios Nacionais na capacitação de pesquisadores da comunidade científica e tecnológica brasileira.																											
Descrição: Número total pesquisadores externos capacitados em eventos organizados pelo CNPEM																											
Fórmula de cálculo: <i>Número total de pesquisadores externos capacitados em eventos de capacitação organizados pelo CNPEM</i>																											
Tipo: Uso	Peso: 2	Unidade: Número Absoluto	Qualificação: Eficácia																								
Meta 2023:			270																								
Resultado 1º sem. de 2023:			74																								
Histórico: Este indicador passou a compor o Quadro de Indicadores e Metas do Contrato de Gestão em 2017.																											
<table border="1"> <caption>Dados do Gráfico de Histórico</caption> <thead> <tr> <th>Ano</th> <th>Resultado</th> <th>Meta</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>2017</td> <td>296</td> <td>270</td> </tr> <tr> <td>2018</td> <td>613</td> <td>270</td> </tr> <tr> <td>2019</td> <td>559</td> <td>270</td> </tr> <tr> <td>2020</td> <td>42</td> <td>270</td> </tr> <tr> <td>2021</td> <td>1149</td> <td>0</td> </tr> <tr> <td>2022</td> <td>524</td> <td>270</td> </tr> <tr> <td>2023</td> <td>74</td> <td>270</td> </tr> </tbody> </table>				Ano	Resultado	Meta	2017	296	270	2018	613	270	2019	559	270	2020	42	270	2021	1149	0	2022	524	270	2023	74	270
Ano	Resultado	Meta																									
2017	296	270																									
2018	613	270																									
2019	559	270																									
2020	42	270																									
2021	1149	0																									
2022	524	270																									
2023	74	270																									
Comentário: No primeiro semestre foram realizados 3 eventos que capacitaram 74 pesquisadores externos. Para o segundo semestre de 2023 estão agendados 10 eventos de capacitação.																											

Tabela 1 - Eventos de capacitação programados para o segundo semestre de 2023

SPSAS-NanoA&E - São Paulo School of Advanced Science on Nanotechnology, Agriculture & Environment
Escola Ricardo Rodrigues de Luz Síncrotron (ER2LS)
Escola Sirius para Professores de Ensino Médio (ESPEM)
Curso de Caracterização de Biomassa
Fundamentos em Microscopia Eletrônica de Transmissão
I SEM-FIB Workshop - I Workshop de Microscopia Eletrônica de Varredura e Duplo Feixe
Curso de Caracterização Química de Bagaço e Palha de Cana-de-açúcar
Fronteiras em Imagens Biológicas
Workshop on Cryo-EM Data Analysis
7ª Edição - Curso para Operação de Biorreatores de Bancada

Indicador 16:																																				
Eventos científicos																																				
Eixo de Atuação: Eixo 4 – Treinamento, educação e extensão																																				
Objetivo Estratégico do CG: Implantar e gerir a infraestrutura do CNPEM, visando ganhos de eficiência e eficácia mediante mecanismos de gestão, informação e difusão																																				
Finalidade: Medir o número de eventos científicos promovidos pelo CNPEM direcionados à comunidade científica e tecnológica brasileira.																																				
Descrição: Para a apuração deste indicador é contabilizado o número de eventos de grande porte (acima de 50 participantes), de caráter científico, realizados pelo CNPEM no ano de referência - exceto cursos de capacitação envolvendo participantes externos.																																				
Fórmula de cálculo: <i>Número de eventos científicos do período</i>																																				
Tipo: Uso	Peso: 2	Unidade: Número Absoluto	Qualificação: Eficácia																																	
Meta 2023:			8																																	
Resultado 1º sem. de 2023:			2																																	
Histórico:																																				
<table border="1"> <caption>Dados do Gráfico de Histórico</caption> <thead> <tr> <th>Ano</th> <th>Resultado</th> <th>Meta</th> </tr> </thead> <tbody> <tr><td>2014</td><td>9</td><td>9</td></tr> <tr><td>2015</td><td>6</td><td>6</td></tr> <tr><td>2016</td><td>8</td><td>8</td></tr> <tr><td>2017</td><td>9</td><td>9</td></tr> <tr><td>2018</td><td>8</td><td>8</td></tr> <tr><td>2019</td><td>15</td><td>15</td></tr> <tr><td>2020</td><td>4</td><td>4</td></tr> <tr><td>2021</td><td>8</td><td>4</td></tr> <tr><td>2022</td><td>11</td><td>8</td></tr> <tr><td>2023</td><td>2</td><td>8</td></tr> </tbody> </table>				Ano	Resultado	Meta	2014	9	9	2015	6	6	2016	8	8	2017	9	9	2018	8	8	2019	15	15	2020	4	4	2021	8	4	2022	11	8	2023	2	8
Ano	Resultado	Meta																																		
2014	9	9																																		
2015	6	6																																		
2016	8	8																																		
2017	9	9																																		
2018	8	8																																		
2019	15	15																																		
2020	4	4																																		
2021	8	4																																		
2022	11	8																																		
2023	2	8																																		
Comentário: No primeiro semestre de 2023 o CNPEM realizou 2 eventos científicos.																																				
<table border="1"> <thead> <tr> <th>LN</th> <th>Título</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>LNBR</td> <td>IV IBSB: Brazilian CAZyme Research Meeting</td> </tr> <tr> <td>CNPEM</td> <td>II Simpósio Licuri: Oportunidades para negócios em Bioeconomia</td> </tr> </tbody> </table>				LN	Título	LNBR	IV IBSB: Brazilian CAZyme Research Meeting	CNPEM	II Simpósio Licuri: Oportunidades para negócios em Bioeconomia																											
LN	Título																																			
LNBR	IV IBSB: Brazilian CAZyme Research Meeting																																			
CNPEM	II Simpósio Licuri: Oportunidades para negócios em Bioeconomia																																			

Para o segundo semestre de 2023 estão programados 13 eventos científicos.

Tabela 2 – Eventos científicos programados para o segundo semestre de 2023

VUVX'22 - International Conference on Vacuum Ultraviolet and X-ray Physics
VI AFM Workshop & minicurso Gwyddion
Interpore Brasil
VII Curso de Introdução – Nanotecnologia & Nanotoxicologia (Intronanotox)
Tutoriais de Machine Learning (técnicas fundamentais e aplicações em biologia)
Material Informatic
XVIII Escola Brasileira de Estrutura Eletrônica (EBEE)
XII Proteomics Workshop
X4-MECS : X-rays for magnetic, Electronic and Crystalline Structures
XayNan 2023
33ª Reunião Anual de Usuários (RAU)
Groundwater Remediation using Nano/biotechnology with focus on the Contaminated Resources (GRUN 2023)
SYNBIOS: Synchrotron nano-bio interfaces

Indicador 17:
Pesquisadores de outras regiões do país capacitados pelo CNPEM

Eixo de Atuação:
 Eixo 4 – Treinamento, educação e extensão

Objetivo Estratégico do CG:
 Implantar e gerir a infraestrutura do CNPEM, visando ganhos de eficiência e eficácia mediante mecanismos de gestão, informação e difusão

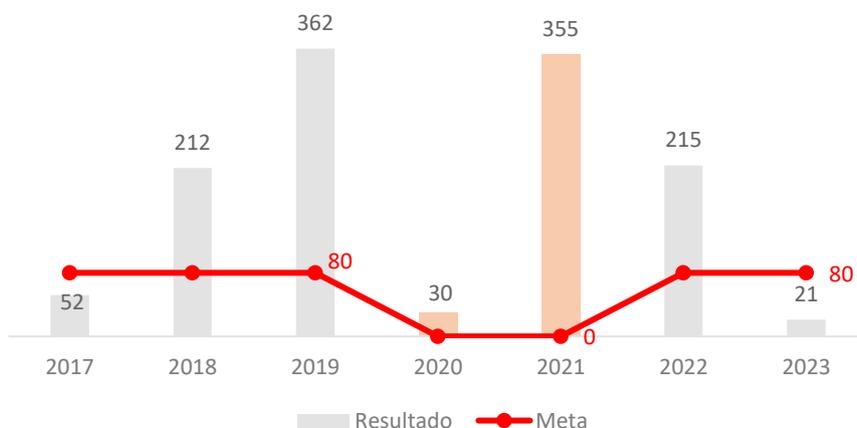
Finalidade:
 Medir o número de participantes em eventos de capacitação do CNPEM provenientes das regiões norte, nordeste, sul e centro-oeste.

Descrição:
 Número total pesquisadores externos provenientes das regiões norte, nordeste, sul e centro-oeste capacitados em eventos (cursos, seminários e workshops) realizados no Campus do CNPEM ou em outras regiões (fora da região sudeste).

Fórmula de cálculo:
Número total de pesquisadores externos capacitados em eventos organizados pelo CNPEM fora da região Sudeste.

Tipo: Uso	Peso: 1	Unidade: Número Absoluto	Qualificação: Eficácia
Meta 2023:			80
Resultado 1º sem. de 2023:			21

Histórico: Este indicador passou a compor o Quadro de Indicadores e Metas do Contrato de Gestão em 2017.



Comentário:
 Dentre os três eventos de capacitação que somaram 74 participantes externos, 21 participantes de instituições brasileiras eram de fora da região sudeste.



Indicador 18:												
Propostas realizadas por usuários externos nas linhas de luz do Sirius												
Eixo de Atuação:												
Eixo 1 – Instalações abertas a usuários externos												
Objetivo Estratégico do CG:												
Prover e manter infraestrutura nacional de classe mundial para pesquisa, desenvolvimento e inovação nas suas áreas de atuação disponibilizada à comunidade de pesquisa acadêmica e industrial.												
Finalidade:												
Medir o número de propostas realizadas nas linhas de luz do Sirius.												
Descrição:												
Propostas realizadas por usuários externos nas linhas de luz do Sirius, no ano de referência.												
Fórmula de cálculo:												
Número total de propostas externas realizadas no período												
Tipo: Uso	Peso: 1	Unidade: Número Absoluto	Qualificação: Eficácia									
Meta 2023:			150									
Resultado 1º sem. de 2023:			111									
Histórico: Este indicador passou a compor o Quadro de Indicadores e Metas do Contrato de Gestão em 2022.												
<table border="1"> <caption>Dados do Gráfico de Histórico</caption> <thead> <tr> <th>Ano</th> <th>Resultado</th> <th>Meta</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>2022</td> <td>113</td> <td>100</td> </tr> <tr> <td>2023</td> <td>111</td> <td>150</td> </tr> </tbody> </table>				Ano	Resultado	Meta	2022	113	100	2023	111	150
Ano	Resultado	Meta										
2022	113	100										
2023	111	150										
Comentário:												
<p>Este indicador foi incluído para relatar os primeiros resultados do Sirius no atendimento de usuários externos. Como neste ano foram atendidas propostas da primeira chamada regular para 5 linhas do Sirius, sendo que as demais estão em fase de comissionamento e montagem, optou-se por um indicador separado para o acompanhamento do Projeto. Portanto, os resultados do Sirius não são contabilizados nos demais indicadores associados ao Eixo 1. A meta pactuada para o ano de 2023 é o atendimento de 150 propostas de usuários externos nas linhas de luz do Sirius. Neste primeiro semestre foram realizadas 111 propostas externas nas linhas Carnaúba, Cateretê, Cedro, Ema, Imbuia, Ipê, Manacá, Mogno.</p>												

Indicador 19:																														
Confiabilidade da nova Fonte de Luz Síncrotron (Sirius)																														
Eixo de Atuação:																														
Eixo 1 – Instalações abertas a usuários externos																														
Eixo 2 – Pesquisa e desenvolvimento <i>in-house</i>																														
Eixo 3 – Apoio à geração de inovação																														
Eixo 4 – Treinamento, educação e extensão																														
Objetivo Estratégico do CG:																														
Prover e manter infraestrutura nacional de classe mundial para pesquisa, desenvolvimento e inovação nas suas áreas de atuação disponibilizada à comunidade de pesquisa acadêmica e industrial.																														
Finalidade:																														
Aferir a capacidade do atendimento técnico da fonte de luz síncrotron aos usuários externos, dentro dos prazos e períodos programados nos agendamentos de realização dos experimentos, estabelecendo padrão de comparação internacional.																														
Descrição:																														
Razão entre as horas de luz síncrotron entregues aos usuários no tempo programado e as horas previstas na programação de operação da fonte de luz síncrotron.																														
Fórmula de cálculo:																														
<i>Horas entregues no período / Horas previstas no período</i>																														
Tipo: Uso	Peso: 1	Unidade: Percentual	Qualificação: Eficácia																											
Meta 2023:			90%																											
Resultado 1º sem. de 2023:			94%																											
Histórico:																														
<table border="1"> <caption>Histórico de Confiabilidade</caption> <thead> <tr> <th>Ano</th> <th>Fonte de Luz</th> <th>Confiabilidade (%)</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>2014</td> <td>UVX</td> <td>98%</td> </tr> <tr> <td>2015</td> <td>UVX</td> <td>98%</td> </tr> <tr> <td>2016</td> <td>UVX</td> <td>98%</td> </tr> <tr> <td>2017</td> <td>UVX</td> <td>95%</td> </tr> <tr> <td>2018</td> <td>UVX</td> <td>98%</td> </tr> <tr> <td>2019</td> <td>UVX</td> <td>97%</td> </tr> <tr> <td>2022</td> <td>Sirius</td> <td>96%</td> </tr> <tr> <td>2023</td> <td>Sirius</td> <td>94%</td> </tr> </tbody> </table>				Ano	Fonte de Luz	Confiabilidade (%)	2014	UVX	98%	2015	UVX	98%	2016	UVX	98%	2017	UVX	95%	2018	UVX	98%	2019	UVX	97%	2022	Sirius	96%	2023	Sirius	94%
Ano	Fonte de Luz	Confiabilidade (%)																												
2014	UVX	98%																												
2015	UVX	98%																												
2016	UVX	98%																												
2017	UVX	95%																												
2018	UVX	98%																												
2019	UVX	97%																												
2022	Sirius	96%																												
2023	Sirius	94%																												
Comentário:																														
Em 2014 a 2019, este indicador era empregado para a fonte de luz UVX, o qual foi descontinuado em 2019 com o descomissionamento do antigo acelerador.																														
Com o início da operação da nova fonte de luz, esta métrica volta ao quadro de indicadores, porém calculando a confiabilidade da nova fonte de luz Sirius. No primeiro semestre de 2023 a fonte de luz entregou 1681 horas dentro do prazo, sendo que estavam programadas 1785 horas de feixe para as linhas entre janeiro e junho de 2023, o que representa uma confiabilidade de 94%.																														

Estatísticas de operação para o 1º semestre de 2023 (dados até 30/06/2023)

Horas programadas de feixe para linhas	1785 h
Horas entregues dentro do horário programado	1681.4 h
Total de horas entregues	1734.3 h
Confiabilidade	94.2 %
Tempo médio entre falhas (MTBF)	35.0 h
Tempo médio para recuperação (MTTR)	2.03 h

**CENTRO NACIONAL
DE PESQUISA EM
ENERGIA E MATERIAIS**



@cnpem | cnpem.br