

EVQ 2024, Descrição detalhada dos minicursos

Minicurso 1: Uso de espectrometria de massas e RMN ^1H de compostos paramagnéticos na caracterização de complexos de coordenação

Processo: 22/03478-8

Responsável: Profa. Dra. Sofia Nikolaou, FFCLRP-USP

OBJETIVOS: Este minicurso tem por objetivo apresentar a caracterização de complexos de coordenação dos metais do bloco d com as técnicas de espectrometria de massas, com ênfase na fonte de ionização por spray eletrolítico (ESI); e de ressonância magnética nuclear de ^1H (RMN ^1H) em solução, com ênfase em complexos paramagnéticos.

JUSTIFICATIVA: Este minicurso foi idealizado com o intuito de apresentar duas técnicas instrumentais, a espectrometria de massas e a ressonância magnética nuclear de hidrogênio e suas aplicações em um contexto específico, ou seja, seu uso na caracterização de complexos de coordenação com metais do bloco d, especificamente no caso da RMN ^1H , para complexos paramagnéticos. A ideia é apresentar a perspectiva do químico inorgânico na aplicação dessas duas técnicas e as particularidades desse uso impostas pela natureza diversa dos compostos de coordenação em relação aos compostos orgânicos. Visa-se instrumentalizar os alunos a utilizar essas técnicas no ambiente de seus estágios, trabalhos de Iniciação Científica e eventualmente em futuros cursos de pós-graduação, além de auxiliá-los na resolução de exercícios/problemas ao longo da graduação.

CONTEÚDO: Serão apresentados os conceitos básicos da fenomenologia envolvida nas técnicas, descrição sucinta da aparelhagem, preparo de amostra, os passos necessários para a análise de espectros de compostos inorgânicos, uma série de exemplos ilustrativos e, por fim, visando avaliar o aproveitamento dos alunos, serão realizadas duas rodadas de exercícios em sala de aula, cada uma delas focando uma das técnicas.

BIBLIOGRAFIA:

Para espectrometria de massas:

- William Henderson, J. Scott McIndoe, Mass Spectrometry of Inorganic and Organometallic Compounds. Willey, 1 edition, 2005.
- Alguns periódicos especializados:

Journal of Mass Spectrometry - JMS

Journal of the American Society for Mass Spectrometry - JASMS

International Journal of Mass Spectrometry - IJMS

Mass Spectrometry Reviews - MSR

European Journal of Mass Spectrometry - EMS

Rapid Communication in Mass Spectrometry - RCMS

Para RMN ^1H :

•I. Bertini, C. Luchinat, Coordination Chemistry Reviews, 150, (1996), Pages 1-292. (mínimo: capítulos 1 e 2)

•Horst Friebolin, Basic one and two dimensional NMR spectroscopy, 40 edição, Wiley – VCH. (mínimo: capítulo 1)

Minicurso 2: The role of biomolecule interactions in determining the fate and behaviour of nanoscale materials (natural, anthropogenic and engineered)

Responsável: Profa. Dra. Iseult Lynch, University of Birmingham.

The program includes an emphasis on understanding the features of nanomaterials that influence the corona composition, the evolution of the corona as the nanomaterials traffic or are transported between environments or biological compartments, and the use of chemoinformatics to design and predict the corona and its implications for human and environmental health. Each of the 4 sessions will include some hands-on activities to help students to apply the knowledge gained to real-world challenges.

Nanoscale materials play a crucial role in various fields, including personalised medicine, precision agriculture and environmental remediation. Understanding how these materials interact with biomolecules is essential for predicting their fate, behaviour, and potential impacts on living organisms and the environment. This summer school will delve into the fundamental concepts and advanced research in this interdisciplinary field, exploring how nanomaterials properties are influenced by their surroundings as well as impacting on their surroundings.

The program will consist of four engaging and interactive sessions each of 3 hours, covering a range of topics, starting with an introduction to nanoscale materials, biomolecules, and their interactions. Participants will explore the diverse sources and types of natural, anthropogenic, and engineered nanoscale materials, with a specific focus on emerging topics and particle-based pollutants of concern such as nanoplastics and pollutant mixtures. Moreover, the program will explore the evolution of the corona as nanomaterials move between different environments, such as biological fluids, soil, and water systems.

Throughout the summer school, participants will actively engage in hands-on activities and group discussions. This interactive learning approach will foster critical thinking and problem-solving skills, enabling participants to apply the knowledge gained during the program to real-world scenarios.

By the end of this 12-hour summer school, chemistry undergraduates will have a comprehensive understanding of the role of biomolecule interactions in determining the fate and behaviour of nanoscale materials, and will be prepared to contribute to the advancement of this rapidly evolving field and make informed

decisions regarding the development and utilization of nanoscale materials in various applications.

Join us for this exciting journey into the world of biomolecule-nanoscale material interactions, and discover the immense potential they hold for shaping the future of chemistry and beyond.

Lecture 1: Introduction to bio-nano interactions – the protein, metabolite and complete corona, the environmental or eco-corona – impacts of nanoscale materials on biological systems and systems on nanoscale materials

Participants will examine the features of nanomaterials that influence the corona composition, and gain insights into how the composition and properties of the corona change in response to varying conditions, including pH, temperature, and ionic strength. They will also investigate the role of environmental factors in shaping the fate and behaviour of nanoscale materials in different applications. Chemoinformatics approaches, including computational methods, to analyze and predict the interactions between nanomaterials and biomolecules will be introduced, and a first hands-on activity will explore design of safe functionalised carbon nanotubes with low protein binding and low toxicity.

Lecture 2: Proteostasis, adverse outcome pathways and the role of chemistry and chemoinformatics approaches to predicting and manipulating the biomolecule corona

Building on the introductory session, we will delve into the role of signalling biomolecules in adverse outcome pathways (AOPs) and cellular proteostasis. Participants will explore how nanoscale materials can disrupt cellular signalling pathways, leading to adverse effects on organisms and ecosystems. They will examine the concept of AOPs, which describe the sequence of events from initial molecular interactions to adverse outcomes at the organism level. Given the potential for nanomaterials to transport proteins to cellular locations they should not be in and thus to disrupt cellular proteostasis (the maintenance of protein structure and function), the role of proteostasis and oxidative stress in mitigating the potential toxic effects of nanomaterials. Participants will learn about the role of signalling biomolecules, such as transcription factors and kinases, in regulating proteostasis and coordinating cellular responses to nanomaterial-induced stress.

Understanding these processes will provide participants with valuable insights into the molecular mechanisms underlying nanomaterial toxicity and guide the development of safer nanomaterials for various applications. A hands-on activity will identify proteins linked to specific adverse outcomes and AOPs.

Lecture 3: *Daphnia* as a model for exploring population and ecosystem level signalling pathways – kairomones and the eco-corona.

Here, we will delve further into the concept of the eco-corona, focusing on the interactions of nanomaterials with complex environmental organisms and ecosystems. Participants will explore the role of the eco-corona in determining the fate, behavior, and potential ecological effects of nanoscale materials using *Daphnia magna*, a keystone species in freshwater ecosystems, as a tool for assessing kairomone signaling and population and ecosystem effects of nanoscale materials. Building on the previous lecture, we explore an AOP related to chronic starvation in daphnids resulting from particles getting stuck in the gut leading to reduced growth and development and impaired reproduction. The hands-on component will include applying a simple Dynamic Energy Budget model to predict the impact of particles with different coronas on daphnia reproduction.

Lecture 4: Nano-enabled agriculture – utilizing bio-nano interactions and nanoscale materials for precision agriculture – enhanced nutrient use efficiency, enhance climate resilience & more.

Emerging application of nanoscale materials and the role of biomolecule interactions in precision agriculture will be explored. Participants will discover how nanomaterials can be utilized to enhance crop productivity, nutrient delivery, and pest management while minimizing environmental impact. Discussions will encompass the design and optimization of nanomaterials for targeted delivery, controlled release, and sensing applications in agriculture. The hands-on component will explore the role of biomolecules in particle root transport and translocation.

Minicurso 3: Renewable Carbon Sources: Their Origin, Challenges and how to Reuse them

Responsável: Prof. Dr. Arjan W. Kleij, Institute of Chemical Research of Catalonia (ICIQ)

Our societies face significant sustainability challenges due to an uncontrolled release of anthropogenic carbon emissions mostly in the form of carbon dioxide. In order to enable a transition to carbon-low or even more desirably carbon-neutral chemical processes, we need to drastically change our way of consumption and end-of-life product disposal. This calls for an increasing focus on a circular use of our feedstock, products and waste streams in order to sustain our ecosystems, health and prosperity. Key to achieving these objectives is a strategy that can be widely applied in various fields of chemical science, and catalysis has already proven to be a versatile enabling technology that contributes to the development of a circular chemistry. In this short course, several types of carbon-rich feedstock will be discussed in terms of their origin, availability and cost. These raw materials can be upgraded by a proper design of catalytic processes that help to convert low-cost molecules into value-added intermediates with examples of potential applications in fine-chemical, pharmaceutical and polymer products. Another aspect that will be highlighted is the use of catalytic recycling and repurposing of the atoms of end-of-life products and plastics, thereby providing inspiring technologies that can diffuse into our way of life and evolve our mindsets with respect to a sustainable environment.

References

1. Diéguez, M.; Kleij, A. W. Catalysis for Enabling Carbon Dioxide Utilization, In: "Advances in Catalysis", Elsevier, 2022, vol.70, p. 2-236.
2. Kleij, A. W. Cyclization Reactions with CO₂, In: "The Chemical Transformations of C1 Compounds", X. F. Wu, B. Han, K. Ding, Z. Liu (eds.), Wiley-VCH, Weinheim, 2022, ch. 22, p. 973-1002.
3. Brandolese, A.; Kleij, A. W. Catalyst Engineering Empowers the Creation of Biomass-Derived Polyesters and Polycarbonates, *Acc. Chem. Res.* 2022, 55, 1634-1645.
4. Della Monica, F.; Kleij, A.W. From terpenes to sustainable and functional polymers, *Polymer Chem.* 2020, 11, 5109-5127.

5. Gomez, J. E.; Kleij, A. W. Catalytic nonreductive valorization of carbon dioxide into fine chemicals. In: *Advances in Organometallic Chemistry*, Ch. 3, 2019, vol. 71, p. 175-226.

Minicurso 4: Gestão e Planejamento de Carreira

Responsável: Profa. Dra. Ligia Carolina Oliveira-Silva, UFU

1. EMENTA

Carreiras, conceitos e tendências: a evolução do conceito de carreira e sua aplicação para pessoas e organizações. Gestão de carreira e processos de tomada de decisão. Autoconhecimento, exploração e planejamento de carreira. Intervenções de carreira e estabelecimento de metas. Projeto de Carreira.

2. OBJETIVO

Proporcionar ao/à aluno/a o aprofundamento das perspectivas teórico-práticas que envolvem a gestão da carreira, apresentando os diferentes contextos, técnicas e estratégias de intervenção em carreira e contribuindo para o processo de planejamento de carreira enquanto profissional.

3. RESUMO

A gestão e o planejamento de carreira incluem autoavaliação de interesses, valores e habilidades, compreensão das etapas na tomada de decisão de carreira e aprendizagem as aptidões de empregabilidade necessárias para obter e manter um emprego. Diante dos moldes atuais de trabalho, o conhecimento acerca do contexto que envolve as decisões profissionais e as múltiplas possibilidades de trajetórias de carreira apresenta-se como essencial para o bem-estar de quem trabalha. A orientação de carreira é um processo importante em um mundo dinâmico e pouco previsível, em que crises profissionais podem ocorrer em diferentes momentos da vida. Mostra-se necessária especialmente em momentos de transição na trajetória profissional, tal como a passagem da universidade para o mercado de trabalho, auxiliando as pessoas a planejar seu vínculo com o trabalho, prevendo as desestabilizações do sistema e oferecendo suporte para eventuais momentos de crise. A construção de uma carreira é um processo que inclui um complexo conjunto de decisões individuais e de determinações públicas presentes na cultura da sociedade, que tem nos contextos social, político, econômico e cultural, fortes fontes de influência. A trajetória profissional construída também gera mudanças nos papéis sociais e na identidade, representando fonte de poder e sendo o meio pelo qual os indivíduos se relacionam com as estruturas sociais. Desenvolver uma identidade profissional concomitantemente ao processo de construção de uma carreira é uma das questões mais inquietantes entre os indivíduos da sociedade

contemporânea, de forma que, quando a tarefa de articular a identidade em termos ocupacionais não é feita de modo adequado, as pessoas, ainda que estabeleçam e alcancem metas por elas definidas, poderão então perceber tais metas como insignificantes caso não estejam alinhadas com seus valores, interesses, habilidades e expectativas. Assim, ainda que a orientação de carreira trabalhe com o estabelecimento de metas, pois parte do pressuposto de que os objetivos regulam a ação humana, ela compreenderá que o processo de definição e escolha de uma meta exige autoconhecimento e conhecimento acerca das possibilidades do mundo do trabalho. Para tanto, o conhecimento acerca de gestão e planejamento de carreira implica na construção de um projeto de carreira se estruture em reflexões acerca do presente, do futuro desejado e dos meios para alcançá-lo, não sendo reduzido a desejos ou intenções vagas, mas sendo composto pela construção de estratégias de ação. Por isso, a importância de incentivar formandos e profissionais a refletirem sobre seus objetivos de carreira e como alcançá-los, delimitando focos de ação, estratégias e alternativas. Entende-se necessário incentivar a reflexão acerca do futuro profissional para além dos ditames de uma cultura imediatista, com o objetivo de melhor lidar com os eventos profissionais presentes e futuros. Considerando a relevância do processo de tomada de decisões profissionais coerentes e posterior adaptação à carreira escolhida, o minicurso contribuirá para desenvolver junto aos alunos os conhecimentos, habilidades e atitudes que permitirão encarar situações de indecisão, transição, reavaliação ou afastamento da carreira.

4. CONTEÚDO PROGRAMÁTICO

- Carreira: Origens, conceitos e definições;
- Desenvolvimento de carreira, gestão da carreira e processos de tomada de decisão;
- Autogestão de carreira X Carreira Organizacional;
- Autoconhecimento, exploração e planejamento de carreira;
- Inserção, ascensão e transição de carreira;
- Gestão da carreira com populações diversas: Condições sociais, pessoais e econômicas;
- Estabelecimento de metas de carreira e de vida;
- Projeto de carreira: Construção, implementação e monitoramento.

Minicurso 5: Particles and Particle Systems

Responsáveis: Prof. Dr. Nicholas Kotov (University of Michigan – 9 horas) and Dr. Felipe Mariano Colombari (CNPEM – 3 horas).

O curso terá 12 horas, dividido em 4 módulos de 3 horas cada, dos quais 3 serão ministrados pelo Prof. Kotov e um pelo Dr. Felipe. Segue abaixo o programa proposto pelo Prof. Kotov:

In this course, we will explore the fundamental principles that govern the behavior of nanoparticles and microparticles and their interactions with one another, as well as with the surrounding environment. We will investigate how these interactions can be manipulated to create assembled structures with unique properties and functions, with a focus on closed system at steady state.

Specifically, we will begin by examining the properties of nanoparticles and microparticle, such as size, shape, and surface chemistry, and how they impact their behavior and interactions with one another. We will also discuss various experimental techniques and theoretical models that are used to study nanoparticle interactions and assembly.

We will then delve into the steady state assembly of particles into larger structures, such as films, membranes, and three-dimensional structures, and how their properties can be tuned through various parameters, including particle concentration, surface chemistry, and external stimuli.

Throughout the course, we will use a combination of theoretical models, experimental techniques, and computational simulations to explore the behavior of nanoparticles and their assemblies. We will also engage in critical discussions about the potential applications of these materials in fields such as drug delivery, energy conversion, and catalysis.

By the end of this course, the students will have a deep understanding of the scientific foundations of nanotechnology and the ways in which nanoparticle interactions can be harnessed to create assembled structures with unique properties and functions. You will also be able to apply this knowledge to various practical applications in fields such as materials science, biotechnology, and environmental engineering.

Topics included in the course:

What are Particles? Bits of history.

Importance of non-sphericity.

Nanoparticles and microparticles

Effect of size on different properties (optical, electrical, magnetic, biological, thermal)

Role of the surface.

What are complex systems?

Why complexity?

Relationship to biomimetics.

Self-organization

Problems with modeling.

Patents. Business plans

Delivery: Lectures, Quizzes, Tests, Team Projects.

Example of a Team Project 1: Prepare and defend a draft for a patent related to a complex particle system

Example of a Team Project 2: Propose and defend viability and utility of a class-related start-up.

Minicurso 6: Técnicas de Luz Síncrotron e Linhas de Luz para caracterização avançada de materiais funcionais

Responsáveis: Dra. Cristiane B. Rodella (CNPEM); Dra. Amelie Rochet (CNPEM); Dra. Verônica Teixeira (CNPEM); e o Dr. Victor Zelaya (CNPEM).

Processo 17/50261-6

O Sirius é o novo acelerador de partículas do Laboratório Nacional de Luz Síncrotron (LNLS), que é parte do Centro Nacional de Pesquisa em Energia e Materiais (CNPEM), uma organização social supervisionada pelo Ministério da Ciência, Tecnologia e Inovação (MCTI). Trata-se de uma máquina de 4ª geração, que produz luz síncrotron (do infravermelho até os raios X) com propriedades únicas. Vale pontuar que, até o momento, no mundo, somente três máquinas estão nesta categoria [1-3]. Este tipo de máquina apresenta parâmetros como: i) alto brilho, que está relacionado ao alto fluxo de fótons; ii) a baixa emitância, que indica menor divergência do feixe de luz; e, iii) a alta coerência, ou seja, ondas eletromagnéticas de mesma frequência e direção de propagação [1-3]. Ao associar feixes de luz síncrotron com essas características a elementos ópticos sofisticados, bem como os estágios de amostras estáveis e de alta precisão, detectores rápidos e eficientes torna-se possível sondar a matéria com aspectos inéditos relacionados a alta resolução espectral, espacial e temporal. Está permitindo estudos únicos e com grande potencial inovador nas mais diversas áreas do conhecimento. Neste sentido, pode-se citar: a caracterização estrutural, morfológica e espectroscópica de materiais funcionais em condições cinética, in situ e operando, que é a principal temática destacada nesta escola [4-6].

Neste mini-curso, apresentaremos: i) uma breve introdução sobre o que luz síncrotron: produção e aplicações; ii) o que é o Sirius e seus principais parâmetros físicos; iii) os fundamentos das técnicas baseadas em espalhamento, absorção de raios X, e imageamento por raios-X. iv) os tipos de estudos possíveis ou em desenvolvimento nas linhas de luz: Paineira [5], Quati [6], Carnaúba [7] e Mogno [8]; v) a preparação de um experimento no Sirius e a infraestrutura de apoio das linhas de luz; vi) casos científicos já investigados; vii) desenvolvimentos de novas metodologias de estudos e viii) como acessar a infraestrutura do CNPEM para pesquisas, em especial, o Sirius.

Referências

- [1] L. Liu, N. Milas, A. H.C. Mukai, X. R. Resende and F.H. de Sá J. *Synchrotron Rad.* (2014). 21, 904-911. DOI: <https://doi.org/10.1107/S1600577514011928>
- [2] P. Willmott, *An Introduction to Synchrotron Radiation*. Wiley, 2011. doi: 10.1002/9781119970958.
- [3] H. Winick, "Fourth generation light sources," in *Proceedings of the 1997 Particle Accelerator Conference (Cat. No.97CH36167)*, pp. 37–41. doi: 10.1109/PAC.1997.749539.
- [4] A. I. Ancharov, "The Use of Hard Synchrotron Radiation for Diffraction Studies of Composite and Functional Materials," *Russian Physics Journal*, vol. 60, no. 3, pp. 543–549, Jul. 2017, doi: 10.1007/s11182-017-1106-7.
- [5] F. R. Estrada et al., "PAINEIRA beamline at Sirius: an automated facility for polycrystalline XRD characterization", 2022 *J. Phys.: Conf. Ser.* 2380 012033
- [6] <https://lnls.cnpem.br/facilities/quati/>
- [7] H. C. N. Tolentino et al., "The CARNAÚBA X-ray nanospectroscopy beamline at the Sirius-LNLS synchrotron light source: Developments, commissioning, and first science at the TARUMÃ station, <https://doi.org/10.1016/j.elspec.2023.147340>.
- [8] ARCHILHA, N. L. et al. MOGNO, the nano and microtomography beamline at Sirius, the Brazilian synchrotron light source. In: *Journal of Physics: Conference Series*. IOP Publishing, 2022. p. 012123.

As duas palestras em homenagem a aposentadoria da Profa. Dra. Quezia Cass (Departamento de Química) contemplarão aspectos da pesquisa da professora, a saber:

Palestra-Abertura

Four decades of separation

Profa. Dra. Quezia Bezerra Cass (*Departamento de Química, UFSCar*)

Palestra 1

Immobilized enzymes in ligand screening and in the development of sustainable adsorbents

Profa. Dra. Marcela Cristina de Moraes (Universidade Federal Fluminense)

As outras 3 palestras a serem ministradas pelos convidados nacionais e internacionais contemplarão diversos temas:

Palestra 2

Catalytic conversion of biomass and its derivatives

Prof. Dr. Arjan W. Kleij (ICIQ)

Palestra 3

The role of biomolecule interactions in determining the fate and behaviour of nanoscale materials

Profa. Dra. Iseult Lynch (UoB)

Palestra 4

Chirality in nanomaterials

Prof. Dr. Nicholas Kotov (University of Michigan)