

### **11/05 - Descoberta de conhecimento com aprendizado de máquina em química e ciência de materiais - Osvaldo Novais de Oliveira Junior (USP)**

Serão discutidas novas abordagens de aprendizado de máquina e processamento de línguas naturais para o design de novos materiais e novas propriedades. Além de uma apresentação de desafios e perspectivas, serão fornecidos exemplos do uso de aprendizado de máquina também em análise de dados, o que vem permitindo novos conceitos em química analítica.

**Sobre o palestrante:** Físico de formação, fez doutorado em engenharia eletrônica na University of Wales, Bangor, Reino Unido. É membro fundador do Núcleo Interinstitucional de Linguística Computacional (NILC), que desenvolveu o revisor gramatical ReGra. Suas principais áreas de atuação são em filmes orgânicos nanoestruturados, e processamento de línguas naturais.

### **18/05 - Materiais moleculares multifuncionais - Cynthia Lopes Martins Pereira (UFMG)**

Com o advento de novas tecnologias e com o crescente volume de dados gerados, cresce a demanda por novos dispositivos magnéticos que sejam cada vez menores e capazes de armazenar volumes cada vez maiores de informação magnética em segurança. Além disso, para atender tal demanda, a cada dois anos dobra-se a velocidade dos processadores (lei de Moore). Assim, diante da crescente miniaturização dos sistemas, a tecnologia baseada no silício e utilizada atualmente, pode estar chegando ao seu fim. Juntamente com a crescente miniaturização, o limite superparamagnético pode ser atingido, o que impede que a informação seja armazenada de forma apropriada. Uma alternativa para superar esta limitação baseia-se no uso da computação quântica. Para isso, os chamados magnetos moleculares e os magnetos de íon único ("Single-Ion Magnets"), que podem ser compostos de coordenação onde a unidade portadora de spin pode ser uma molécula ou um íon, consistem em potenciais candidatos para superar estas limitações.

Neste seminário serão abordados alguns exemplos de magnetos moleculares contendo ligantes do tipo oxamato, suas estratégias de síntese, estruturas cristalinas, propriedades magnéticas, e outras propriedades de interesse observadas nestes compostos como atividade catalítica para descontaminação ambiental e fotoluminescência.

**Sobre a palestrante:** Professora de Química Inorgânica no Departamento de Química da Universidade Federal de Minas Gerais (UFMG), doutora em Ciências com ênfase em Química Inorgânica pela UFMG em 2003, bacharel em Química também pela UFMG (1998). Foi professora visitante na Universidade da Califórnia, Berkeley, em 2019-2020, e realizou um pós-doutorado em Paris na Université Pierre et Marie Curie (2004-2005). Trabalha nas áreas de síntese de compostos de coordenação, química supramolecular e estudo das propriedades magnéticas. Recentemente, também tem se interessado pelas áreas de fotoluminescência e catálise para descontaminação ambiental.

**25/05 - Mudança climática aumenta a biodisponibilidade de Hg, a contaminação da biota e a exposição humana no litoral nordeste brasileiro - Luiz Drude de Lacerda (Laboratório de Biogeoquímica Costeira, LABOMAR-UFC)**

A mudança climática global interage com alterações regionais do uso do solo em bacias costeiras deflagrando mudanças rápidas em sua biogeoquímica. Litorais tropicais são dominados por manguezais; esses ecossistemas respondem rapidamente a essas mudanças. O litoral semiárido do Brasil, como outros ambientes semiáridos, é fortemente afetado pela mudança climática. Uma resposta ubíqua é a alteração da hidrodinâmica, com diminuição do escoamento continental para o oceano, causada pela redução das chuvas anuais e represamento dos rios. Além disso, o fortalecimento da força marinha, devido ao acúmulo de calor no Oceano Atlântico Sul e ao aumento do nível do mar, empurra a água costeira para os estuários. Um feedback positivo entre esses vetores causa um aumento do tempo de residência da água em estuários, intrusão salina, acúmulo de sedimentos no estuário e expansão de mangues. Essas respostas se intensificam nos últimos 50 anos. A expansão do metabolismo de redução de sulfato dos mangues, que produz grandes quantidades de carbono orgânico dissolvido com elevada capacidade de formação de complexos organo-metálicos. Como resultado as concentrações e fluxos de Hg particulado são maiores do rio ao estuário do que do estuário para o mar, acumulando Hg particulado no estuário. A exportação de Hg particulado ocorre apenas em períodos extremos de chuvas, quando então é exportado e eventualmente depositado em sedimentos da plataforma continental, com baixa biodisponibilidade. A exportação Hg dissolvido, altamente biodisponível, é associada ao DOC e praticamente inexistente durante períodos chuvosos, mas aumenta duas ordens de magnitude durante períodos secos, períodos progressivamente mais longos devido a mudança climática. Formas altamente biodisponíveis de Hg acabarão nas teias alimentares estuarinas e costeiras, aumentando a contaminação de Hg na biota e o risco de exposição humana.

**Sobre o palestrante:** Graduado em Biologia pela UFRJ (1977), Mestrado (1980) e Doutorado em Biofísica pela UFRJ (1983). Pesquisador 1A do CNPq, Professor Titular da UFF e da UFC. Membro da Academia Brasileira de Ciências (ABC) Em 2011 recebeu o Prêmio Bunge, na categoria Vida e Obra na área de Oceanografia e eleito Fellow of The World Academy of Sciences (TWAS). Em 2018, recebeu o grau de Comendador da Ordem Nacional do Mérito Científico e nomeado Membro da Future Earth Coasts Academy (FEC Academy). Foi Pesquisador Visitante na Universitat Hamburg entre 1986-91 e na Université de Toulon, França, entre 1998-06. Coordenou o Instituto do Milênio Transferência de Materiais na Interface Continente-Oceano (2005-2008), e o Instituto Nacional de Ciência e Tecnologia de Transferência de Materiais Continente-Oceano (2008-2016), ambos com participação da PUC-Rio. É Diretor Científico (desde 2015) da Fundação de Apoio ao Desenvolvimento Científico e Tecnológico do Estado do Ceará (FUNCAP). Atua na área de Ecologia, Biogeoquímica e Contaminação Ambiental em ecossistemas tropicais, monitoramento ambiental e capacidade suporte de ecossistemas e o impacto das mudanças climáticas globais na biogeoquímica de ecossistemas.