

01 de Dezembro - Profa. Corinne Arrouvel, Dept. de Física, UFSE

Using Modelling to Explain Properties of Titania and Alumina Polymorphs.

Abstract:

We have undertaken a comparative investigation of different TiO₂ and Al₂O₃ polymorphs and amorphous phases using computational techniques based on DFT/DFT+U (VASP) and interatomic potentials (METADISE and DL_POLY) to better understand the structural, chemical and electronic properties for various applications. By comparing the surfaces of lesser known phases of TiO₂ (brookite-TiO₂1, TiO₂-B2) with rutile and anatase phases³, we find that brookite surfaces are more complex, with higher intrinsic activity of surface sites. We predict that this phase should be more suitable for (photo)catalytic applications as it is more acidic and more hydrophilic catalyst, whereas the anatase phase shows more interest for solar cells; and TiO₂-B is a candidate to replace the graphite anode in lithium battery materials. We have also compared ³c-Al₂O₃³ with the more ordered γ - and \pm -Al₂O₃⁴. The ³c-Al₂O₃ phase can be made from the dehydration of boehmite (³-AlOOH) and is already an industrial catalyst (i.e. support for MoS₂ active phase in hydrodesulphurisation). We have extended the simulations under a range of working conditions⁵ (i.e. H₂O, H₂S, H₂ partial pressures and temperatures) to enable us to provide a detailed comparison with ongoing experiments, such as infrared spectroscopy (IR), temperature programmed desorption (TPD), Nuclear magnetic resonance (NMR) and X-ray photoelectron spectroscopy (XPS), which operate under different working conditions. For example, we can explain the controversy surrounding the hydroxylation of rutile, and show that OH coverage depends on temperature and pressure. This work demonstrates that the close combination of experiments and simulations aids in increasing our understanding of nanoparticles or nanotubes and their reactivity. The comparison of TiO₂ and Al₂O₃ polymorphs highlights the characteristics of each phase and the importance to synthesise with a given morphology for a given application.

(1) Arrouvel, C.; Parker, S. C. Submitted, J. Phys. Chem. C.

(2) Arrouvel, C.; Parker, S. C.; Islam, M. S. J. Phys. Chem. C to be submitted 2010.

(3) Arrouvel, C.; Digne, M.; Breyse, M.; Toulhoat, H.; Raybaud, P. J. Catal. 2004, 222, 152.

(4) Arrouvel, C.; Costa, D.; Diawara, B.; Marcus, P. J. Chem. Phys. C 2007, 111, 18164.

(5) Arrouvel, C.; Breyse, M.; Toulhoat, H.; Raybaud, P. J. Catal. 2004,

226, 260.

24 de Novembro - Prof. Roberto Lins, Dept. de Química Fundamental, UFPE

The Art of Becoming a Naked Speaker

10 de Novembro - Profa. Giovanna Machado, Lab. Microscopia Eletrônica e Microanálise, INT/NE-CETENE

Caracterização de Nanopartículas pelas Técnicas de MET, WAXD E SAXS

03 de Novembro - Prof. João Bosco Paraíso da Silva, Coordenador da PPG-Química, Dept. de Química Fundamental, UFPE

Avaliação Trienal da PPG Química da UFPE.

27 de Outubro - Prof. Eduardo Carneiro Beltrão, Dept. de Bioquímica, UFPE

Carboidratos: o doce no câncer

A superfície celular é rica em glicoconjugados, principalmente glicoproteínas, os quais estão envolvidos em processos bioquímicos durante o desenvolvimento normal e patológico das células. O arranjo de carboidratos nestas moléculas são responsáveis pela convivência organizada ou a rebelião das células de nosso organismo. Entender o papel destes sacarídeos tem sido alvo de pesquisas quanto ao seu uso como biomarcadores no processo neoplásico. Este conhecimento ajudará no diagnóstico, prognóstico e escolha de terapêutica para o câncer.

20 de Outubro - Prof. Hernan Valenzuela, Superintendência da Zona Franca de Manaus, SUFRAMA

Pesquisa conjunta e cursos no Instituto Fraunhofer de Nanosistemas Eletrônicos.

13 de Outubro - Profa. Constância Ayres, Centro de Pesquisas Aggeu Magalhães, FIOCRUZ

Genômica Comparativa das Glutathione S-Transferases (GSTs) da Classe Epsilon em Mosquitos Vetores de Malária.

06 de Outubro - Dra. Paula Cavalcanti Coutinho, Petrobras

O Químico na Indústria do Petróleo: do Poço ao Posto

A palestra contempla uma explanação geral sobre toda a cadeia produtiva do petróleo e derivados, sendo que em cada segmento será destacada a atuação do profissional químico.

29 de Setembro - Prof. Frederico Guilherme de Carvalho Cunha, Dept. de Física, Universidade Federal de Sergipe

Biosensores Baseados em Plasmons Superficiais – SERS e SPR

Neste Colóquio será abordada a utilização do fenômeno de ressonância de plasmons superficiais no desenvolvimento de biosensores que dispensam o uso de marcadores moleculares. Serão apresentadas as técnicas de Espectroscopia Raman aumentada pela Superfície (SERS) e de Ressonância de Plasmon Superficial (SPR). Serão feitas considerações sobre a produção de substratos para as duas técnicas e resultados obtidos até o momento. Finalmente será apresentado o projeto de detecção de Leishmaniose através destas técnicas dentro do contexto do INCT-INAMI.

22 de Setembro - Professor Rafael Dhalia, Dept. de Virologia e Terapia Experimental, Centro de Pesquisas Aggeu Magalhães-FIOCRUZ

Tecnologias de Inovação na Saúde.

COLOQUIO ESPECIAL - Terça-feira 16:00 hs.

21 de Setembro - Prof. Robert Alan Burrow, Dept. de Química, Universidade Federal de Santa Maria, RS.

Polímeros de Coordenação com Ligantes Fosfinatos

15 de Setembro - Professor Fernando José Oliveira de Souza, Dept. de Matemática, UFPE

Algumas Manifestações da Topologia Geométrica na Química.

Topologia é a área da matemática que estuda noções de proximidade (vizinhança, aderência) e sua preservação (continuidade) tanto a nível de conjuntos em geral como de espaços e situações particulares (Ex.: superfícies e suas generalizações; teoria dos nós, que estuda a disposição de espaços dentro de outros espaços, tais como nós e superfícies dentro de espaços euclidianos). Neste colóquio, faremos uma introdução elementar à topologia geral, à teoria dos nós e à teoria topológica dos grafos através de exemplos e propriedades (invariantes), e mencionaremos diversas manifestações da topologia na química e em áreas afins (Ex.: forma de moléculas, quiralidade; polímeros, DNA e sua dinâmica; teoria quântica de campos; propostas de realização de computação quântica através de ânions e pontos quânticos).

01 de Setembro - Professor Antônio Francisco Pereira de Araújo, Grupo de Biologia Teórica, Centro de Ciências Biológicas da Universidade Federal de Brasília

Simulação do enovelamento protéico usando informação sobre enterramentos atômicos (mais informações no sítio <http://e-groups.unb.br/ib/cel/chico/>)

25 de Agosto - Doutorando Renaldo Tenório de Moura Júnior, PPG-Química, Universidade Federal de Pernambuco

O Conceito da Polarizabilidade da Região de Recobrimento da Ligação Química: Quantificação do Grau de Covalência da Ligação Química em Sistemas no Estado Sólido e Moleculares informação sobre enterramentos atômicos.

18 de Agosto - Professor Enersto Marques, University of Pittsburg e FIOCRUZ.

Involvement of Host Innate Immune Responses on Dengue Vasculopathy

14 de Julho - Ulisses Braga-Neto, Assistant Professor, Department of Electrical and Computer Engineering, Texas A&M University, USA

BPDA – A Bayesian Peptide Detection Algorithm for Mass Spectrometry

We will present in this talk our recent work on a Bayesian approach for peptide detection in data produced by high-resolution Mass-Spectrometry (MS) instruments, such as MALDI-TOF and LC-MS. This Bayesian Peptide Detection Algorithm (BPDA) is based on a rigorous statistical framework that avoids problems, such as isotope template matching based on single charge states and ad-hoc thresholding, generally encountered in many existing algorithms. Our algorithm models the spectra as a mixture of candidate peptide signals, and the model is parameterized by MS physical properties. It systematically evaluates all possible combinations of possible peptide candidates and iteratively finds the best fitting peptide signal in order to minimize the mean absolute error of the inferred spectrum to the observed spectrum. BPDA performs deisotoping and deconvolution of mass spectra simultaneously, which enables better identification of weak peptide signals, leading to higher sensitivity. Unlike template-matching algorithms, BPDA can handle complex data where features overlap. Our experimental results indicate that BPDA performs well on simulated data and real MS data sets, for various

resolutions and signal to noise ratios, and compares very favorably with commonly used commercial and open-source software, such as flexAnalysis, OpenMS, and Decon2LS, according to sensitivity and detection accuracy.

07 de Julho - Prof. Vicent Vivier - Laboratoire Interfaces et Systèmes Electrochimiques, Université Pierre et Marie Curie

Scanning electrochemical microscopy for the characterization of heterogeneous interfaces

COLOQUIO ESPECIAL - Segunda-feira 14:00 hs.

21 de Junho - Dr. Pascal Sire - Division of Technological Research, CEA, Grenoble, França

Giant (Grenoble Institute of NanoTechnologies): An innovation Campus to meet the challenges of the 21st Century

09 de Junho - Prof. Antônio Carlos Pavão - Departamento de Química Fundamental, UFPE

P₆₀, Uma molécula Modelada no DQF - A trajetória de minhas 60 voltas em torno do Sol, destacando o trabalho de educação, divulgação e produção científica em 31 anos na UFPE.

21 de Junho - Dr. Pascal Sire - Division of Technological Research, CEA, Grenoble, França

Giant (Grenoble Institute of NanoTechnologies: An innovation Campus to meet the challenges of the 21st Century)

02 de Junho - Prof. Fernando Hallwass - Departamento de Química Fundamental, UFPE

RCSAs e RDCs: Parâmetros Adicionais para Determinar a Configuração de Compostos Orgânicos por RMN Tradicionalmente, os principais parâmetros utilizados para a determinação estrutural de compostos orgânicos, em sistemas isotrópicos, são as medidas do deslocamento químico e das constantes de acoplamento escalar, obtidas diretamente no espectro de Ressonância Magnética Nuclear (RMN). As informações contidas nos parâmetros anisotrópicos são perdidas devido ao movimento molecular randômico. Entretanto, nos últimos anos começou a ser desenvolvida uma nova metodologia, utilizando meios em que as amostras são parcialmente orientadas, fazendo com que a parte anisotrópica do deslocamento químico, bem como o acoplamento dipolar, sejam parcialmente recuperados.

26 de Maio - Prof. Marcelo Bezerra D'Amorim, Departamento Ciências da Computação, UFPE

Melhorando a Precisão e Eficácia do Teste Automatizado de Software

19 de Maio - Dra. Aronita Rosenblatt, Dept. de Odontologia Preventiva Social, UFPE

Diamino Fluoreto de Prata: uma arma para paralisar cárie e prevenir novas cáries.

12 de Maio - Dr. Pascal Sire, CEA, Grenoble, França (CANCELADO)

Giant (Grenoble Institute of NanoTechnologies) : an innovation Campus to meet the challenges of the 21st century.

05 de Maio - Professor Bertrand Sampaio de Alencar, Instituto Tecnológico, ITEP

O presente artigo resulta de parte da pesquisa para a dissertação de mestrado denominada “Evolução das Relações entre Tutela Pública e Operação Privada nos Serviços de Limpeza Urbana: Tendências Atuais com Base na Experiência do Recife”, cujo recorte aqui efetuado procura desvendar parcela importante da evolução histórica dos serviços de limpeza pública e, sobretudo, das suas relações público-privado na cidade do Recife, a partir do século XVII.

28 de Abril - Professor Oscar Loureiro Malta, Departamento de Química Fundamental, UFPE

O Instituto Brasileiro de Nanotecnologia para Marcadores Integrados - INAMI, está focalizado no estudo e desenvolvimento de processos e produtos de base nanotecnológica, inovadores e competitivos, caracterizados pela seletividade associada à sensibilidade de marcação nas áreas prioritárias de meio ambiente, saúde e segurança. Como exemplo, projetos envolvendo a marcação de agentes químicos e biológicos através de sistemas moleculares organizados, que apresentam atividades altamente específicas, já se encontram em andamento no âmbito das redes cooperativas em nanociência e nanotecnologia, com o suporte da infra-estrutura já existente no país. Dada a complexidade da cadeia conhecimento básico-tecnologia-produto, projetos dessa natureza requerem continuidade, com a garantia de aportes financeiros adequados e regulares, para que sejam bem sucedidos. A cadeia começa com a preparação e síntese de materiais com propriedades específicas para aplicação em fotônica, sistemas magnéticos, moleculares e eletroquímicos, seguida de simulação computacional e cálculos teóricos, buscando previsão de composições e estruturas nanométricas ou moleculares otimizadas, que levem ao desenvolvimento de novos dispositivos, e que culmine com produtos a serem lançados no mercado.

31 de Março - Professor Roddy Kay, Cultura Inglesa, Recife

Título: International English: its impact in Brazil.

O Professor Kay irá falar A realidade do inglês internacional, ou seja sobre o tema que faz com que os líderes no ramo do ensino de inglês e na fonética, queiram determinar novos modelos para o inglês que não sejam os do inglês americano ou inglês britânico, mas pelo menos parcialmente demonstrem usos lingüísticos derivados de outras fontes. Ao mesmo tempo, a influência das especificações do Quadro Europeu Comum, que determinam os vários níveis de competência lingüística em idiomas apreendidos, como línguas estrangeiras já tem respaldo global e aumenta a pressão em cima de toda pessoa culta para dominar pelo menos duas outras línguas, o que, na realidade, quer dizer inglês e mais outro idioma.

24 de Março - Professor Marcos A. Pimenta, DF, UFMG

Título: Investigando o Comportamento dos Elétrons em nanomateriais de Carbono por Espalhamento de Luz

Nanomateriais de carbono, como nanotubos e nanofitas grafeno, são sistemas onde os elétrons apresentam um comportamento intermediário entre o de um cristal e o de uma molécula. A investigação do confinamento quântico dos elétrons nestes materiais é de grande importância uma vez que eles poderão vir a ser usados em dispositivos nano-opto-eletrônicos. Discutiremos neste seminário como a técnica de espalhamento inelástico de luz (espalhamento Raman) fornece informações sobre o comportamento dos elétrons em nanomateriais de carbono. Apresentaremos resultados de espectroscopia Raman ressonante em nanotubos e grafenos, onde obtemos os espectros variando continuamente a energia (cor) do laser de excitação. Mostraremos que o espectro Raman ressonante permite a identificação estrutural dos diferentes tipos de nanotubos de carbono, e fornece informações sobre a estrutura eletrônica e a interação entre elétrons e fônons em grafenos.

17 de Março - Professor Roberto Dias Lins, DQF, UFPE

Título: Desenvolvimento de Parâmetros para Modelagem de Biomateriais

Neste colóquio serão discutidas técnicas de desenvolvimento de parâmetros (campos de força) para simulação de biomateriais, com ênfase em carboidratos. O uso desses parâmetros será

ilustrado através de simulações de biomateriais com aplicação em bioremediação, nanotoxicologia e bioenergia.

10 de Março - Professora Thereza Amélia Soares, DQF, UFPE

Título: Simulações Computacionais de Proteínas em Membranas Lipopolissacarídicas e em Silica Funcionalizada.

Esta apresentação discorrerá sobre atuais (e futuras) linhas de pesquisa em simulações computacionais de biomoléculas e materiais. Tópicos de pesquisa à serem discutidos incluem o desenvolvimento e aplicação de modelos atomísticos à simulações de lipopolissacarídeos de membranas bacterianas, sílica nanoporosa funcionalizada e "scaffolds" protéicos com novas funcionalidades.