Higher Education Commission of Pakistan

Interim Placement of Fresh PhD Program – HRD Division
Sector H-8, Islamabad – PAKISTAN **Website: http://www.hec.gov.pk**

No: PD-IPFP/HRD/HEC/2013/30235
Islamabad December 10th, 2013.

Dr. Haroon-ur-Rashid (PI) / Dr. Ikhtiar Khan (CoPI):

This is with reference to your concept paper titled "Design, synthesis & biological activities of some novel pyrimidine derivatives". I am pleased to inform you that the Higher Education Commission has approved a Startup Research Grant of PKR 0.5 million against your aforementioned Project as per following table and guidelines.

Project Title: **Design, synthesis & biological activities of some novel pyrimidine derivatives.**
Host Institution: **University of Peshawar, Peshawar.**
Project Duration: **07 months (max.)**

Budget Head & Code	PKR Amount Approved (millions)
A: Salaries (Including Honorarium)	0.070
B: Permanent Equipment	0.152
C: Expendable Supplies	0.200
D1: Literature, Documentation	0.010
D2: Travel / Research & Training	0.055
D3: Miscellaneous	0.005
E: Final Report Review	0.003
F: Indirect Cost (University Overheads)	0.005
TOTAL Grant Approved	0.500

1. The Grant received shall be maintained in a separate account to be operated jointly by the PI & CoPI.
2. The Grant will be exclusively utilized for the project and the PI will submit an audited completion report along with statement of expenditure duly signed by the auditor of the Institution.
3. All purchases and expenditures will be made as per prescribed rules of the Government/ University/ Institution. The purchased items/equipment will be entered into stock register of the Host Institution.
4. Re-appropriation in approved budget heads (if any) will be made only on written request with justifications and subsequent approval by the competent authority at HEC.
5. An amount of PKR 0.250M will be released shortly as 1st installment of the total approved grant; the remaining amount will be released after submission of interim progress report, funds utilization report & the copy of stock register entries.
6. Hiring of any research associate who is already earning a stipend from Indigenous Scholarship is prohibited.

With profound regards,

Rizwan Ahmed Khan
Project Director IPFP/UESTP
(Human Resource Development Division)
Higher Education Commission | Sector H-8 | Islamabad - Pakistan
URL: http://beta.hec.gov.pk/InsideHEC/Divisions/HRD/FacultyHiringPrograms/IPFPHD/Pages/Newsone.aspx

Higher Education Commission of Pakistan

Interim Placement of Fresh PhD Program – HRD Division
Sector H-8, Islamabad – PAKISTAN **Website:** http://www.hec.gov.pk

No: PD-IPFP/HRD/HEC/2013/30235
Islamabad July 24th, 2014

To Whom It May Concern

This is to certify that Dr. Haroon ur Rashid (PI) & Dr. Ikhtiar Khan (CoPI), Institute of Chemical Sciences, University of Peshawar, title of research project: "**Design, synthesis & biological activities of some novel pyrimidine derivatives**" have completed their Startup Research Grant Program (SRGP) No: PD-IPFP/HRD/HEC/2013/30235 from Higher Education Commission during 2013-2014.

We wish them all the best in their future endeavors.

Rizwan Ahmed Khan
Project Director IPFP/UESTP
(Human Resource Development Division)
Higher Education Commission | Sector H-8 | Islamabad - Pakistan

PROPOSTA

Processo: 403217/2023-7
Envio: 03/08/2023 16:40:37
Setor: COCQG/CGCEX/DCTI

9268611357635262

IDENTIFICAÇÃO

PROPONENTE

NOME: Marcio Santos da Silva

CPF: 009.830.720-78 **DOC. IDENTIFICAÇÃO:** 6007419011 **PAIS:** Brasil **EMISSOR:** SJS

FORMAÇÃO/TITULAÇÃO: Doutorado em Química, Universidade de São Paulo, 2008-2011

INSTITUIÇÃO VÍNCULO:

CHAMADA

NOME: Chamada CNPq/MCTI Nº 10/2023 - Faixa A - Grupos Emergentes

SIGLA: Universal 2023

COMITÊ/ÁREA

COMITÊ: QU - Química

ÁREA: Síntese Orgânica

PROJETO

INÍCIO: 23/11/2023 **DURAÇÃO:** 36 meses

TÍTULO (em português): Tecnologias Facilitadoras e Novos Catalisadores na Síntese de Heterociclos Funcionalizados com Organocalcogênio

TÍTULO (em inglês):

Enabling Technologies and New Catalysts in the Synthesis of Functionalized Heterocycles Containing Organochalcogen

PALAVRAS CHAVE (em português):

Reação em Fluxo; Tecnologias Facilitadoras; Catálise; Calcogênios; Estudo fotoquímico; Heterociclos

PALAVRAS CHAVE (em inglês):

Catalysis; Photochemistry; Heterocycles; Chalcogens; Enabling Technologies; Flow Chemistry

EQUIPE

Pesquisador

NOME	FORMAÇÃO/ TITULAÇÃO	BOLSA	INSTITUIÇÃO/ DEPARTAMENTO	ÁREAS DE ATUAÇÃO
Angelita Manke Barcellos	Doutorado	-	Universidade Federal do Rio Grande / Departamento de Química-FURG-RS-Brasil-	Química, Química Orgânica, Química Verde

TEMPO DEDIC. PROJ.	RESPONSABILIDADE NO PROJETO
15 horas/semana	O docente ficará responsável pelas pesquisas realizadas no contexto das reações via catálise heterogênea metálica e não metálica, avaliando reações, materiais de consumo e matérias de partida, infraestrutura, resultados, publicações, orientações, e auxiliando na operacionalidade das tecnologias facilitadoras e aplicações.

URL DO CURRÍCULO http://lattes.cnpq.br/3362240071203001

NOME	FORMAÇÃO/ TITULAÇÃO	BOLSA	INSTITUIÇÃO/ DEPARTAMENTO	ÁREAS DE ATUAÇÃO
Daniela Hartwig de Oliveira	Doutorado	-	Universidade Federal de Pelotas / Instituto de Química e Geociências (IQG)-UFPEL-RS-Brasil-	Química Orgânica, Educação

TEMPO DEDIC. PROJ.	RESPONSABILIDADE NO PROJETO
10 horas/semana	O docente ficará responsável pelas pesquisas realizadas no contexto das reações redox, avaliando reações, materiais de consumo e matérias de partida, infraestrutura, resultados, publicações, orientações, e auxiliando na operacionalidade das tecnologias facilitadoras e aplicações.

URL DO CURRÍCULO http://lattes.cnpq.br/9690755495607646

NOME	FORMAÇÃO/ TITULAÇÃO	BOLSA	INSTITUIÇÃO/ DEPARTAMENTO	ÁREAS DE ATUAÇÃO
Filipe Vinícius Penteado Scaranaro	Doutorado	-	Universidade Federal de Santa Maria / Departamento de	Química, Química Orgânica, Síntese Orgânica

Química-UFSM-RS-Brasil-

TEMPO DEDIC. PROJ.	RESPONSABILIDADE NO PROJETO
10 horas/semana	O docente ficará responsável pelas pesquisas realizadas no contexto das reações redox, avaliando reações, materiais de consumo e matérias de partida, infraestrutura, resultados, publicações, orientações, e auxiliando na operacionalidade das tecnologias facilitadoras e aplicações.

URL DO CURRÍCULO http://lattes.cnpq.br/1395766565465419

NOME	FORMAÇÃO/ TITULAÇÃO	BOLSA	INSTITUIÇÃO/ DEPARTAMENTO	ÁREAS DE ATUAÇÃO
Haroon Ur Rashid	Doutorado	-	Universidade Federal de Pelotas / Instituto de Química e Geociências (IQG)-UFPEL-RS-Brasil-	Química Medicinal, quimica, Quimica Organica

TEMPO DEDIC. PROJ.	RESPONSABILIDADE NO PROJETO
20 horas/semana	O docente ficará responsável pelas pesquisas realizadas no contexto dos estudos de mecanismo, otimização, estudos in sílico e o desenvolvimento das tecnologias facilitadoras. Além disso, fornecer suporte para aplicações e escalabilidade das reações. Assim, irá avaliar reações, resultados, e desenvolver protocolos sintéticos via tecnologias facilitadoras, gerando publicações, orientações, material didático, e divulgação nas diferentes plataformas, internas e externas a Universidade.

URL DO CURRÍCULO

NOME	FORMAÇÃO/ TITULAÇÃO	BOLSA	INSTITUIÇÃO/ DEPARTAMENTO	ÁREAS DE ATUAÇÃO
Juliano Alex Roehrs	Doutorado	-	Instituto Federal Sul-Rio-Grandense / Instituto Federal Sul-Rio-Grandense - Campus Pelotas Visconde da Graça-IFSUL-RS-Brasil-	Química

TEMPO DEDIC. PROJ.	RESPONSABILIDADE NO PROJETO
15 horas/semana	O docente ficará responsável pelas pesquisas realizadas no contexto das reações via catálise heterogênea metálica e não metálica, avaliando reações, materiais de consumo e matérias de partida, infraestrutura, resultados, publicações, orientações, e auxiliando na operacionalidade das tecnologias facilitadoras e aplicações.

URL DO CURRÍCULO http://lattes.cnpq.br/8258052075073091

NOME	FORMAÇÃO/ TITULAÇÃO	BOLSA	INSTITUIÇÃO/ DEPARTAMENTO	ÁREAS DE ATUAÇÃO
Liane Krolow Soares	Doutorado	-	Universidade Federal do Rio Grande / Departamento de Química-FURG-RS-Brasil-	Química Orgânica

TEMPO DEDIC. PROJ.	RESPONSABILIDADE NO PROJETO
15 horas/semana	O docente ficará responsável pelas pesquisas realizadas no contexto das reações via catálise heterogênea metálica e não metálica, avaliando reações, materiais de consumo e matérias de partida, infraestrutura, resultados, publicações, orientações, e auxiliando na operacionalidade das tecnologias facilitadoras e aplicações.

URL DO CURRÍCULO http://lattes.cnpq.br/4044377380549262

NOME	FORMAÇÃO/ TITULAÇÃO	BOLSA	INSTITUIÇÃO/ DEPARTAMENTO	ÁREAS DE ATUAÇÃO
Robson da Silva Oliboni	Doutorado	-	Universidade Federal de Pelotas / Instituto de Química e Geociências (IQG)-UFPEL-RS-Brasil-	Química Teórica, Química de Interfaces, Estruturas Eletrônicas e Propriedades Elétricas de Superfícies; Interf. e Partículas, Química do Estado Condensado

TEMPO DEDIC. PROJ.	RESPONSABILIDADE NO PROJETO
15 horas/semana	O docente ficará responsável pelas pesquisas realizadas no contexto dos estudos de mecanismo, otimização, estudos in sílico e o desenvolvimento das tecnologias facilitadoras. Além disso, fornecer suporte para aplicações e escalabilidade das reações. Assim, irá avaliar reações, resultados, e desenvolver protocolos sintéticos via tecnologias facilitadoras, gerando publicações, orientações, material didático, e divulgação nas diferentes plataformas, internas e externas a Universidade.

URL DO CURRÍCULO http://lattes.cnpq.br/8914138534189677

NOME	FORMAÇÃO/ TITULAÇÃO	BOLSA	INSTITUIÇÃO/ DEPARTAMENTO	ÁREAS DE ATUAÇÃO
Thiago Barcellos da Silva	Doutorado	-	Universidade de Caxias do Sul / Departamento de Física e Química-UCS-RS-Brasil-	Síntese Orgânica, Biocatálise, Química dos Produtos Naturais

TEMPO DEDIC. PROJ.	RESPONSABILIDADE NO PROJETO
15 horas/semana	O docente ficará responsável pelas pesquisas realizadas no contexto dos estudos de mecanismo, otimização, estudos in sílico e o desenvolvimento das tecnologias facilitadoras. Além disso, fornecer suporte para aplicações e escalabilidade das reações. Assim, irá avaliar reações, resultados, e desenvolver protocolos sintéticos via tecnologias facilitadoras, gerando publicações, orientações, material didático, e divulgação nas diferentes plataformas, internas e externas a Universidade.

URL DO CURRÍCULO http://lattes.cnpq.br/6738650076754604

Quadro Geral

CATEGORIA	NÚMERO DE PARTICIPANTES
Pesquisador	8

RESUMO

Com o aumento da demanda por produtos industrializados, as últimas décadas foram testemunhas da busca por processos sustentáveis. Assim, a arte e a sofisticação para preparar moléculas alvo evoluiu drasticamente, surgindo novos dispositivos, denominados ?Enabling Technologies?, ou seja, tecnologias facilitadoras que tornam mais eficientes os protocolos sintéticos e a utilização de catalisadores. Esta busca está baseada nos princípios da química verde, bem como nos objetivos de desenvolvimento sustentável (ODS) das Nações Unidas.
A combinação das tecnologias facilitadoras com catalisadores emergentes tem sido utilizada na síntese de compostos heterocíclicos, devido a ampla utilização destes alvos nas indústrias farmacêutica, agroquímica e corantes.
O projeto visa avaliar e delinear catalisadores emergentes na síntese de compostos heterocíclicos funcionalizados com calcogênio por meio de metodologias sintéticas clássicas e, principalmente, via tecnologias facilitadoras, como a mecanoquímica e o sistema em fluxo, devido à incipiência destas rotas sintéticas na funcionalização de heterociclos com calcogênio. Serão avaliados catalisadores emergentes heterogêneos (e.g. ácido sulfâmico, pectina funcionalizada, UHP-NiFe2O4, AuNPs) e fotoredox (e.g. Ln-Fe) no intuito de produzir protocolos mais seguros e viáveis.
Para avaliar a eficiência das tecnologias facilitadoras, e proporcionar novas metodologias de otimização e ? screening?, estudos computacionais via ?machine learning? e modelos estatísticos serão utilizados. Ademais, para os estudos de mecanismo de reação serão empregadas ferramentas analíticas como a EMAR e a RMN para a identificação de intermediários e, assim, prover conhecimento sobre a reatividade das reações desenvolvidas. Os produtos sintetizados serão aplicados em parcerias nas áreas de química medicinal e materiais no intuito de fomentar o desenvolvimento tecnológico e inovação.

MARCOS FÍSICOS DE EXECUÇÃO DE PROJETO

ID MARCO	ATIVIDADE	MARCOS FÍSICOS	INÍCIO ATIVIDADE	FIM ATIVIDADE
1	Preparação dos materiais de partida não disponíveis comercialmente ou de difícil aquisição	Materiais de partida preparados, caracterizados e purificados	1º Semestre	6º Semestre
2	Desenvolvimento das metodologias propostas para a preparação de heterociclos funcionalizados contendo calcogênio.	Alvos sintéticos preparados, purificados e caracterizados.	1º Semestre	6º Semestre
3	Aplicação de tecnologias facilitadoras associadas a catalisadores emergentes para a preparação de heterociclos funcionalizados contendo calcogênio.	Metodologias sintéticas que possam ser realizadas e/ou melhoradas para as tecnologias facilitadoras	2º Semestre	6º Semestre
4	Estudos de mecanismo de reação via técnicas espectrométricas e espectroscópicas	Estudos via CG-EM, UV-Vis, EMAR, RMN, CLAE.	2º Semestre	6º Semestre
5	Estudos computacionais associados ao planejamento de experimentos	Avaliação, obtenção de dados e aprimoramento das metodologias sintéticas derivadas das tecnologias facilitadoras	2º Semestre	6º Semestre
6	Estudos in sílico para avaliação de atividade biológica.	Planejamento molecular para avaliação da atividade anticâncer, entre outras.	3º Semestre	6º Semestre
7	Promover uma formação qualificada de mestres e doutores com base tecnológica.	Implementação de disciplinas na graduação e pós-graduação voltadas às tecnologias facilitadoras	2º Semestre	6º Semestre
8	Acompanhamento da literatura.	Literatura consultada periodicamente	1º Semestre	6º Semestre
9	Redação e publicação dos resultados em periódicos com elevado fator de impacto e redação de pedidos de patente.	Publicação de, pelo menos, 2 artigos científicos/ano das metodologias e/ou aplicações	3º Semestre	6º Semestre
10	Ampliar as parcerias nacionais e internacionais.	Projetos de	3º Semestre	6º Semestre

		pesquisa aprovados e executados.		
11	Ampliar a orientação de alunos.	Orientar pelo menos 2 alunos de mestrado e 2 de doutorado	1º Semestre	6º Semestre
12	Popularização das tecnologias facilitadoras, e divulgação dos resultados através da apresentação em congressos das áreas envolvidas na proposta.	Participação dos proponentes em, pelo menos 1 congresso científico/ano.	2º Semestre	6º Semestre
13	Redação do relatório final e prestação de contas.	Relatório redigido e prestação de contas apresentada.	6º Semestre	6º Semestre

SOBRE O PROJETO

MOTIVAÇÃO

DESCREVER A MOTIVAÇÃO DA PESQUISA, ISTO É, QUAL A QUESTÃO CENTRAL ABORDADA NESTE PROJETO. APRESENTAR DE FORMA CLARA E OBJETIVA A PERGUNTA OU HIPÓTESE PRINCIPAL QUE SERÁ INVESTIGADA NESTE PROJETO.

O grupo de pesquisadores emergentes é motivado pela possibilidade de desenvolver novos produtos, utilizando recursos alternativos e sustentáveis, e explorando o estado da arte da química orgânica sintética. A equipe pretende viabilizar a catálise como meio de alcançar heterociclos com calcogênio, de modo que incorpore os princípios da química verde e que promova a inovação na indústria de transformação por meio das ?enabling technologies?. A proposta promoverá parcerias na busca de novas aplicações, ao mesmo tempo que promoverá a formação de químicos sintéticos com base tecnológica.

POR QUE ESTE TEMA É IMPORTANTE PARA A SUA ÁREA DE CONHECIMENTO? ISTO É, O QUE MUDA NA ÁREA DE CONHECIMENTO ESPECÍFICA QUANDO ESTE PROJETO TIVER SIDO EXECUTADO?

EXPLICAR PORQUE CONSIDERA SUA PROPOSTA RELEVANTE PARA EXPANDIR A FRONTEIRA DA ÁREA E SUB-ÁREA DO CONHECIMENTO QUE FORAM DECLARADAS ACIMA. RESPONDA CONSIDERANDO AS "ÁREAS DE CONHECIMENTO" DEFINIDAS PELO CNPQ.

Os catalisadores continuarão sendo vitais para o sucesso da indústria de transformação. Assim, a modernização da forma como realizamos reações também deverá ser alcançada, não somente com uma viabilização operacional dos catalisadores, mas com a utilização de tecnologias e ferramentas modernas que alcance a indústria química. Os resultados obtidos e o conhecimento gerado neste projeto serão de importância na formação do químico orgânico sintético, com um olhar tecnológico e analítico, bem como na produção de moléculas alvo com potencial atividade biológica e aplicação na ciência de materiais.

RELEVÂNCIA E POTENCIAL DE INOVAÇÃO

ESTE PROJETO ORIGINARÁ ALGO PRÁTICO (UMA NOVA TÉCNICA, UMA NOVA TECNOLOGIA, UM NOVO EQUIPAMENTO)? ISTO É, SEUS RESULTADOS PODERÃO SER IMEDIATAMENTE USADOS PARA RESOLVER ALGUM PROBLEMA PRÁTICO?

Não. Num primeiro momento os resultados não poderão ser aplicados, pois haverá necessidade de maior refinamento.

ESTE PROJETO ORIGINARÁ ALGO TEÓRICO? ISTO É, SEUS RESULTADOS RESOLVERÃO UMA DÚVIDA AINDA EXISTENTE NO ARCABOUÇO TEÓRICO DA ÁREA DE CONHECIMENTO A QUE SE REFERE O PROJETO?

Sim. O projeto visa justamente elucidar uma parte obscura e ainda inexplicada desta área de conhecimento.

SOBRE A METODOLOGIA

DESCREVER DE FORMA SUCINTA A MANEIRA COMO SE PRETENDE CONDUZIR ESTE PROJETO DE FORMA A GARANTIR O ATINGIMENTO DOS OBJETIVOS DENTRO DO PRAZO E ORÇAMENTO PREVISTOS.

A arte e a sofisticação para preparar moléculas alvo evoluiu drasticamente. Para isto, o projeto buscará, ao longo dos três anos, unir as ?enabling technologies? com catalisadores para acessar protocolos sintéticos mais eficientes e moléculas com potencial aplicação farmacológica. Ao primeiro ano caberá a síntese de diversos materiais de partida por meio de procedimentos descritos na literatura, análises e caracterização. Conforme preparado os reagentes, aquisição ou preparação dos catalisadores, os estudos de síntese se iniciarão. Assim, os tipos de catalisadores avaliados serão os seguintes: Fotocatálise: A catálise fotorredox é uma estratégia sustentável para a síntese, empregando luz visível como fonte de energia de baixa demanda energética. Para o desenvolvimento de reações fotorredox será empregado fotocatalisadores a base de ferro (Esquemas 1-3), em substituição ao emprego de metais nobres, devido ao elevado custo. Ademais, serão avaliadas reações promovidas por luz sem a presença de fotocatalisadores (Esquemas 4 e 5). Catálise Heterogênea: O uso de sistemas heterogêneos provaram ser úteis para a indústria química, uma vez que estes podem ser facilmente recuperados da mistura reacional e podem ser reutilizados com ou sem ativação. Neste contexto, serão avaliados catálise não metálica (Esquemas 6-9), catálise com base magnética (Esquemas 10-12) e nanopartículas (Esquemas 13-15) na síntese de heterociclos contendo uma porção com calcogênio. Por exemplo, o ácido sulfâmico (H_2NSO_3H, SA) é reconhecido como um catalisador heterogêneo ácido, verde, eficiente e economicamente viável em transformações orgânicas. A pectina funcionalizada com um grupo amino é um organocatalisador interessante, uma vez que os polissacarídeos apresentam propriedades únicas como renovabilidade, baixo custo e não toxicidade, permitindo agregar valor à biomassa. O peróxido de hidrogênio-Uréia (UHP) combinado com um sistema magnético ($NiFe_2O_4$) apresenta baixo custo, baixa toxicidade e fácil recuperação/ativação. Ademais, as nanopartículas representam uma tecnologia moderna e versátil em síntese orgânica. Nesse caminho, as nanopartículas atuarão como versáteis e eficientes catalisadores frente a reações de obtenção de heterociclos funcionalizados com

calcogênio. Ainda, pretende-se avaliar a versatilidade destes catalisadores na obtenção de novos blocos estruturais, especialmente, com potencial aplicação farmacológica. Ao segundo ano terão início os estudos envolvendo a utilização das ?enabling technologies?. Para isto serão avaliadas fontes alternativas de energia (Esquemas 6, 7, 8, 11 e 12), a mecanoquímica (Esquemas 14 e 15) e o reator em fluxo (Esquemas 1, 2, 3, 4 e 14), com os sistemas catalíticos que demonstrarem viabilidade operacional. Essas técnicas modernas objetivam modernizar a forma de realizar síntese química, ao mesmo tempo que corroboram com os princípios da química verde. Ainda, o planejamento de experimentos (DoE) será utilizado na otimização de sistemas complexos (Figura 1), possibilitando avaliar de modo efetivo as tecnologias facilitadoras. Conjuntamente com o DoE, serão explorados estudos computacionais para a otimização das tecnologias via aprendizagem de máquinas (Anexo: referências 25-27). No terceiro ano, o foco será na conclusão dos projetos de síntese, com a avaliação de escopo de reação e estudos de mecanismo por meio das técnicas espectroscópicas (Figura 2: RMN) e espectrométricas (Figura 3: EMAR). Adicionalmente, ocorrerá a formalização das parcerias, no intuito de avaliar o potencial destes compostos, tanto na aplicação bioquímica quanto na ciência de materiais. Os estudos computacionais poderão ser empregados na avaliação enzima-substrato (Figura 4), para aplicação farmacológica, e na interação molecular e estudos de encapsulamento para a área de materiais.

SOBRE A EQUIPE E A INSTITUIÇÃO

POR QUE A EQUIPE PROPONENTE É CAPACITADA A DESENVOLVER ESTE PROJETO DE FORMA EFICIENTE E EFICAZ?

DESCREVER AS PRINCIPAIS HABILIDADES E COMPETÊNCIAS DA EQUIPE PARA O DESENVOLVIMENTO DO PROJETO.

A equipe compreende pesquisadores atuantes, com uma média por docente de 13 artigos publicados nos últimos três anos. Possui depósitos de patente, capítulos de livro e livro. Grande parte da equipe são professores recém-contratados (até cinco anos), no entanto, orientam alunos de graduação e/ou pós-graduação e têm projetos aprovados em editais de fomento. Ainda, na equipe há um professor estrangeiro e docentes de diferentes instituições, fomentando a colaboração e infraestrutura. A trajetória acadêmica da equipe destaca-se pela experiência na área e na busca pela inovação em síntese orgânica.

QUAIS SÃO OS TRÊS TRABALHOS ANTERIORES DESENVOLVIDOS RECENTEMENTE POR ESTA EQUIPE QUE MAIS SE APROXIMAM DO TEMA DESTE PROJETO?

CITE PUBLICAÇÕES CIENTÍFICAS (ARTIGOS, LIVROS), REGISTROS DE PROPRIEDADE INTELECTUAL, EXIBIÇÕES, ESPETÁCULOS, PALESTRAS, DIAS DE CAMPO, OU QUALQUER OUTRA REALIZAÇÃO QUE POSSA DEMONSTRAR A QUALIDADE E EXPERIÊNCIA PRÉVIA DA EQUIPE NESTE TEMA.

(1) BARCELLOS, A.; PENTEADO, FILIPE; PERIN, Gelson; ALVES, D.; SILVA, MÁRCIO. Alternative energy source: synthesis of selenium compounds. ORGANOCHALCOGEN COMPOUNDS SYNTHESIS, CATALYSIS, AND NEW PROTOCOLS WITH GREENER PERSPECTIVES. 1ed., Holanda: Elsevier, 2022, v. 1, p. 31-77. (2) HARTWIG, DANIELA; Soares, Liane K.; DAPPER, LUIZ H.; NASCIMENTO, JOSÉ E. R.; LENARDÃO, EDER JOÃO. Dicarbonyl compounds in the synthesis of heterocycles under green conditions. Physical Sciences Reviews, v. 1, p. 1-49, 2022. (3) Perin, G.; Peglow, T. J.; PENTEADO, F.; Nobre, P. C.; Silva, K. B.; Stach, G.; Barcellos, T.; Lenardão, E. J.; ROEHRS, J. A.. UVA light-promoted catalyst-free cyclization of vinyl selenides: A green and efficient synthesis of C3-unsubstituted 2-selanyl benzochalcogenophenes. Chemistry An Asian Journal, v. 17, edição 8, e202101394, 2022.

DESCREVA, SE HOUVER, INSERÇÃO INTERNACIONAL DESTA EQUIPE.

DESCREVER AS PRINCIPAIS ATUAÇÕES DA EQUIPE NO ÂMBITO INTERNACIONAL, NO QUE DIZ RESPEITO AO TEMA DESTE PROJETO.

No exterior, a equipe proponente possui visitas técnicas em instituições, palestras em eventos e artigos científicos e capítulos de livros publicados com pesquisadores estrangeiros. Dentre as parcerias destacam-se: Prof. Claudio Santi (Università di Perugia, Itália ? Síntese Orgânica); Prof. Laura Orian (Università di Padova, Itália ? Estudos Computacionais); Prof. Muhammad Naveed Umar (University of Malakand, Paquistão ? Síntese de Orgânica); Prof. Damiano Tanini (Università degli Studi di Firenze). Ademais, na equipe há o professor Haroon ur Rashid, professor estrangeiro do Paquistão.

POR QUE O PRESENTE PROJETO PODE SER DESENVOLVIDO DE FORMA EFICIENTE E EFICAZ NA INSTITUIÇÃO ONDE SERÁ SEDIADO?

DESCREVER A DISPONIBILIDADE EFETIVA DE INFRAESTRUTURA PARA O DESENVOLVIMENTO DO PROJETO.

Os membros da equipe pertencem a instituições próximas geograficamente. Nos laboratórios há tecnologias de ultrassom, micro-ondas, LEDs e reatores em fluxo e em mecanoquímica, além de equipamentos de suporte e insumos para a síntese química. As instituições parceiras, UFPel, UCS, UFSM, FURG e IFSul, contam com cursos de graduação em química e/ou PPG em química e/ou engenharia química. A infraestrutura disponível pelas instituições da equipe contempla equipamentos de médio e grande porte, como RMN, IV, Raman e de UV-Vis, além de, CG-EM, ESAR e difratômetro de raios-X em monocristal.

SOBRE COLABORAÇÕES E PARCERIAS

HÁ COLABORAÇÕES OU PARCERIAS JÁ ESTABELECIDAS PARA A EXECUÇÃO DO PROJETO?

Sim. Quais?

QUAIS?

A equipe possui ampla experiência em estudos computacionais, em síntese orgânica e em elucidação estrutural, como pode ser demonstrado através dos artigos científicos publicados. Ademais, complementa a equipe os seguintes pesquisadores parceiros: Profa. Roberta Cargnelutti (UFSM) análise de raio-X; Prof. Ricardo Schumacher (UFSM) síntese orgânica; Profs André Fajardo (UFPel) e Pedro Cademartori (UFPR) materiais avançados; Prof. Cesar Brüming (UFPel) bioquímica; e Prof. Bernardo Almeida Iglesias (UFSM) avaliação de propriedades fotofísicas de compostos orgânicos.

SOBRE RECURSOS PARA A EXECUÇÃO DO PROJETO

HÁ RECURSOS FINANCEIROS DE OUTRAS FONTES APROVADOS PARA APLICAÇÃO NO PROJETO?

INDICAR, CASO HOUVER, A FONTE DE FINANCIAMENTO, O VALOR DOS RECURSOS APROVADOS E A NATUREZA DA DESPESA (CUSTEIO, CAPITAL, BOLSAS, ETC.).

O projeto proposto conta com recursos financeiros oriundos de agências de fomento, como a FAPERGS (21/2551-0002136-5 ? ARD/ARC-14/2022), CNPq (Universal 409674/2021-4) e FINEP (Editais SOS Equipamentos e PROINFRA 2021). Ademais, os programas de pós-graduação envolvidos contam com auxílio do tipo PROEX/CAPES (UFSM) ou PROAP/CAPES (UFPel, UCS, IFSul e FURG) e bolsas de mestrado e doutorado (CAPES e CNPq) para os discentes, além de bolsas de iniciação científica e tecnológica (CNPq, FAPERGS ou institucional).

PLANO DE DIVULGAÇÃO CIENTÍFICA

DESCREVER SUCINTAMENTE AS FORMAS UTILIZADAS PARA DIVULGAÇÃO DO TRABALHO (I) PARA A COMUNIDADE CIENTÍFICA NACIONAL E INTERNACIONAL E (II) PARA O PÚBLICO EM GERAL.

Os resultados parciais obtidos na execução desse projeto serão divulgados para a comunidade científica na forma de banner e apresentações orais em eventos científicos da área, nacionais e internacionais. Ao final, os resultados serão publicados em periódicos internacionais e/ou serão protegidos através do depósito de patentes. Para o público em geral, pretende-se divulgar os resultados usando as páginas em mídias sociais do PPGQ-UFSM, PPGQ-UFPel, PPGBiotec-(UCS), PPGQTA-FURG e PPGECA-(IFSul), já existentes, no Instagram, Facebook e Youtube.

POR QUE SERIA IMPORTANTE PARA O CNPQ FINANCIAR ESTE PROJETO?

JUSTIFICAR O FINANCIAMENTO DO PROJETO PELO CNPQ. (MÁXIMO 100 PALAVRAS; 600 CARACTERES).

1. Contribuir na formação de recursos humanos altamente qualificados, com capacitação tecnológica; 2. Fortalecimento de colaborações interinstitucionais, graduação e pós-graduação, e dos pesquisadores emergentes da equipe; 3. Desenvolvimento de novos protocolos sintéticos por meio de catalisadores e das ?enabling technologies?. 4. Obter novos blocos estruturais derivados da síntese de heterociclos contendo calcogênio; 5. Promover a inovação por meio de aplicações e parcerias; 6. Publicação de artigos com discentes em periódicos internacionais indexados e o depósito de patentes.

ÁREAS DO CONHECIMENTO RELACIONADAS

PRINCIPAL

- Síntese Orgânica

CORRELATAS

Nenhuma Informação Fornecida.

INSTITUIÇÕES ENVOLVIDAS

Executora/Sede

- Universidade Federal de Pelotas - UFPEL, RS, Brasil

Colaboradora

- Instituto Federal Sul-Rio-Grandense - IFSUL, RS, Brasil
- Universidade Federal do Rio Grande - FURG, RS, Brasil
- Universidade de Caxias do Sul - UCS, RS, Brasil

RECURSOS

CUSTEIO

ITEM	DETALHAMENTO	JUSTIFICATIVA	VALOR
Material de consumo	Material de laboratório: vidrarias, reagentes, solventes, e insumos em gerais, como seringas, agulhas, silica, algodão hidrofílico, etc. Estudos in silico: nobreaks, licenças, monitor, memórias.	Material para o desenvolvimento dos protocolos sintéticos e preparação e caracterização de materiais de partida e produtos. Estudos in silico: material necessário para upgrade dos sistemas computacionais.	R$ 139.500,00
Serviços de Terceiros	Manutenção de ar-condicionado	Manutenção de ar-condicionado para os computadores nos estudos in silico.	R$ 2.000,00
Diárias	-	-	R$ 0,00
Passagens	-	-	R$ 0,00

TOTAL CUSTEIO R$ 141.500,00

CAPITAL

ITEM	DETALHAMENTO	JUSTIFICATIVA	VALOR
Capital (Total)		3 computadores para os estudos in silico.	R$ 7.000,00

TOTAL CAPITAL R$ 7.000,00

QUADRO GERAL DE ORÇAMENTO

CUSTEIO

ITEM	VALOR
Material de consumo	R$ 139.500,00
Serviços de Terceiros	R$ 2.000,00
Diárias	R$ 0,00
Passagens	R$ 0,00

TOTAL CUSTEIO R$ 141.500,00

CAPITAL

ITEM	VALOR
Capital (Total)	R$ 7.000,00

TOTAL CAPITAL R$ 7.000,00

TOTAL GERAL R$ 148.500,00

DOCUMENTOS ANEXOS

ARQUIVO	TAMANHO	URL
• Anexo	-	http://anexosform.cnpq.br/doc/Universal_2023/9/9268611357635262_01.pdf

DECLARAÇÃO

Declaro formalmente que:

1. Tenho ciência, concordo e me comprometo a cumprir todas as diretrizes da Chamada UNIVERSAL;
2. Não tenho qualquer inadimplência com o CNPq e com a Administração Pública Federal, direta ou indireta;
3. Não sou coordenador nem participo como membro de equipe em outra proposta nesta mesma Chamada;
4. Não sou coordenador de proposta de Chamadas Universais anteriores cuja vigência possa vir a sobrepor-se à vigência da presente proposta;
5. Tenho anuência da instituição executora para conduzir o projeto em suas dependências;
6. Tenho anuência de todos os membros que compõem a equipe para incluí-los como partícipes desta proposta, mantendo sob minha guarda as respectivas cartas de anuência (ou e-mails contendo cabeçalhos originais);
7. Confirmei com todos os membros que eles têm ciência de que não podem participar como membros de equipe nem coordenadores de outra proposta nesta mesma chamada;
8. Tenho ciência de que qualquer declaração falsa apresentada na proposta ensejará (i) o indeferimento do meu pleito, com prejuízos estendidos aos demais membros da equipe, que não terão oportunidade de se incluírem em alguma outra proposta nesta chamada (ii) providências do CNPq para responsabilizar-me civil e criminalmente por este feito.

☑ Li e estou de acordo com a declaração acima

NOME	CPF
Marcio Santos da Silva	009.830.720-78

Declaração regitrada eletronicamente através da internet junto ao CNPq, mediante uso de senha pessoal do solicitante em 03/08/2023 às 16:40:37, sob o número de protocolo 9268611357635262