



**11ª Jornada Científica e
Tecnológica do IFSULDEMINAS**
& **8º Simpósio de
Pós-Graduação**

**DESENVOLVIMENTO DE SISTEMAS DE CONTROLE E AUTOMAÇÃO DE COLETA
DE DADOS EM EXPERIMENTOS DE COLISÕES ATÔMICAS E MOLECULARES PARA
O ESTUDO DE NOVAS FONTES DE ENERGIA**

**Gabriela dos Reis GARCIA¹; Laís Magalhães ROSA²; Nádia Nogueira de ALMEIDA³; Rafael Felipe
Coelho NEVES⁴; Manoel Gustavo Petrucelli HOMEM⁵; Rodrigo Lício ORTOLAN⁶; Humberto
Vargas Duque⁷**

RESUMO

O projeto de pesquisa tem por finalidade obter informações de colisões atômicas e moleculares, em especial espécies moleculares que estão envolvidas nos processos de obtenção e combustão de biocombustíveis. Atualmente, a obtenção deste tipo de informação é feita por equipamentos que demandam muito tempo de acumulo de dados e um contínuo monitoramento por parte do experimentador, fazendo com que estudos deste tipo sejam trabalhosos e demorados. Por esse motivo, o projeto proposto será de extrema importância para a melhoria da eficiência do experimento. Além disso, com a automação do equipamento mais informações poderão ser obtidas em menos tempo e com maior precisão comparado com experimentos já realizados, melhorando o resultado final. No processo de automação do equipamento, o objetivo principal é utilizar tecnologias baratas, de fácil acesso e com um grau de eficiência alta. Entre essas tecnologias podemos citar o PIC18F4550 (Microcontrolador) para a detecção de sinais rápidos e o Arduino Mega 2560 pela facilidade de programação e suas inúmeras funcionalidades.

Palavras-chave:

LabView; MicroC; Arduino; Choque; Instrumentação.

1. INTRODUÇÃO

A presente projeto tem como objetivo obter informações de colisões atômicas e moleculares, em especial espécies moleculares que estão envolvidas nos processos de obtenção e combustão de biocombustíveis. Estes dados experimentais servirão para o avanço no entendimento e consequente mapeamento dos processos envolvidos na obtenção de biocombustíveis, bem como sua combustão.

O entendimento minucioso destes processos fará com que seja possível melhorar a eficiência de obtenção industrial dos biocombustíveis. E o mapeamento do processo de combustão fará com que

1 Bolsista, IFSULDEMINAS – *Campus* Poços de Caldas. E-mail: gabii6431@gmail.com.

2 Colaborador, IFSULDEMINAS – *Campus* Poços de Caldas. E-mail: lais.magalhaes13@gmail.com.

3 Colaborador, IFSULDEMINAS – *Campus* Poços de Caldas. E-mail: nadianogues19@gmail.com.

4 Colaborador, IFSULDEMINAS – *Campus* Poços de Caldas. E-mail: rafael.neves@ifsuldeminas.edu.br.

5 Colaborador, IFSULDEMINAS – *Campus* Poços de Caldas. E-mail: mghomem@ufscar.br.

6 Colaborador, IFSULDEMINAS – *Campus* Poços de Caldas. E-mail: rodrigo.ortolan@ifsuldeminas.edu.br.

7 Orientador, IFSULDEMINAS – *Campus* Poços de Caldas. E-mail: humberto.duque@ifsuldeminas.edu.br.

os motores à combustão de biocombustíveis se tornem mais eficientes, tornando os motores movidos a combustíveis fósseis, causando uma consequente diminuição da utilização destes.

Uma das grandes dificuldades de se obter dados experimentais de colisões atômicas e moleculares é o fato da necessidade de se acumular uma grande quantidade de dados para que as condições estatísticas de erros sejam satisfatórias para uma boa aferição empírica daqueles, podendo levar meses para a obtenção de um conjunto completo de dados de uma molécula específica. Este tipo de processo se torna impraticável quando se apoia na ação do experimentador para a tomada manual dos dados experimentais, por este motivo se faz necessário a automação da coleta de dados e sua respectiva análise para tomadas de decisões para as ações posteriores por meio de algoritmos.

Neste contexto, o trabalho será baseado na elaboração de mecanismos que façam a coleta de dados deste tipo de espectrômetro, mais especificamente um Espectrômetro de Perda de Energia de Elétrons (EPEE), que é capaz de obter dados de seções de choque de diferenças de excitação de átomos gasosos.

Inicialmente será construído um mecanismo de automação para a variação da energia a ser analisada pelo espectrômetro e o consequente acúmulo de dados gerados.

O mecanismo será capaz de fazer uma varredura de potencial do analisador, do espectrômetro na faixa de 0 V à 100 V. O processo de funcionamento ocorre mediante aplicação de um potencial progressivo ao analisador de elétrons, concomitantemente com o acúmulo de dados advindos da detecção dos elétrons espalhados. A precisão dos passos do potencial aplicado será da ordem de 5 mV. Este potencial é aplicado, é esperado alguns milissegundos para a coleta de sinais gerados pela detecção dos elétrons, estes sinais são acumulados em um computador de controle, e, então, o processo se reinicia até que se cumpra toda a faixa de varredura de energia. As varreduras são repetidas sucessivamente até que parâmetros estatísticos sejam atingidos.

Um segundo mecanismo será responsável pela mudança angular do analisador de energia, este mecanismo será baseado em um servo-motor capaz de movimentar o analisador com o mínimo de vibração possível e precisão angular menor que 1°. Este processo será controlado remotamente e após condições estatísticas de erros serem atingidas. É importante ressaltar que este mecanismo deve funcionar em sintonia e comunicação com o anterior.

Os testes destes mecanismos serão realizados inicialmente no IFSULDEMINAS – Poços de Caldas e quando condições de reprodutibilidade e segurança forem alcançados, serão testados no Laboratório de Colisões de Elétrons da Universidade Federal de São Carlos (<http://web-03.ufscar.br:8080/ccet/lce>), XXXXXX.

Os sistemas de automação serão geridos por executáveis gerados pela plataforma de controle LABVIEW juntamente com um Arduino, estes serão desenvolvidos com o intuito de controlar e dar

feedback para os pesquisadores remotamente. No processo de detecção de picos o PIC 18F4550 (Microcontrolador) será utilizado para a maior eficiência desse processo.

A validação e testes definitivos dos mecanismos implementados serão testados mediante a obtenção de dados de colisões de elétrons com alvos moleculares envolvidos nos processos que envolvem biocombustíveis.

2. MATERIAL E MÉTODOS

Inicialmente foi necessário entender melhor o funcionamento do equipamento e quais características deveriam ser implementadas no projeto para que o equipamento pudesse ser integrado com o sistema de controle e automação de forma que não fosse afetado os experimentos em andamento, para isso, fomos até o local onde se localiza o equipamento (Universidade Federal de São Carlos – UFSCAR) e analisamos as características principais do mesmo e entendemos melhor seu funcionamento.

Para o desenvolvimento do sistema de automação e controle optamos por utilizar a plataforma LabVIEW que é um software de engenharia de sistemas criado especificamente para aplicações de teste, medição e controle, com rápido acesso ao hardware e às informações obtidas a partir dos dados. Juntamente com o LabVIEW integramos o Arduino com objetivo de explorar suas principais características, sendo essas: dispositivo barato, funcional e fácil de programar.

A primeira versão do sistema foi toda desenvolvida programando em LabVIEW, utilizando as funcionalidades que a plataforma disponibiliza para comunicação com Arduino. O Arduino nesse caso foi utilizado com o hardware do sistema, sendo necessário utilizar suas portas analógicas e digitais.

Nesse primeiro passo, foi desenvolvido o detector de counts (amostras desejadas), a rampa de tensão (0V a 100V) e a janela de tempo para cada nível de tensão, todos na plataforma LabVIEW utilizando as funções disponíveis para Arduino. Os primeiros testes feitos para essa versão do sistema foram desenvolvidos no Laboratório de Tecnologia e Inovação (LATIN) com o auxílio de um gerador de sinais (para simular o sinal gerado pelo equipamento real), osciloscópio, multímetros, entre outros.

Após o processo de testes no IFSULDEMINAS, fomos até a Universidade Federal de São Carlos (UFSCAR) para a realização dos testes direto no equipamento, e observamos que seria necessário realizar algumas modificações no projeto para que pudéssemos obter resultados mais eficientes e de qualidade.

3. RESULTADOS E DISCUSSÕES

Utilizando a plataforma LabVIEW e o Arduino conseguimos desenvolver a rampa de tensão e a janela de tempo de forma considerada operativa. No entanto, quando realizado a contagem de amostras utilizando o detector de picos (counts) desenvolvido inicialmente com a plataforma

LabVIEW e o Arduino, o sistema (LabVIEW + Arduino) não funcionou da maneira que desejávamos, podendo então atrapalhar a obtenção de dados de qualidade.

Após algumas análises e discussões observou-se que o sinal em nível lógico alto, isto é, counts, gerado pelo equipamento é considerado rápido (ordem de grandeza de 500ns) para ser detectado pela porta digital do Arduino, devido ao microcontrolador ATMEL ATmega2560 integrado ao Arduino. Para contornar tal contratempo, optamos por utilizar o PIC18F4550 (Microcontrolador) para realizar tal atividade, por executar instruções de forma mais rápida, podendo assim detectar transições de nível lógico baixo para alto com maior precisão. É importante citar que a utilização do PIC não garante que ele será capaz de detectar o sinal em nível lógico alto como esperado, para garantir essa funcionalidade deveremos realizar testes em laboratório e com o equipamento. Caso o resultado não seja satisfatório teremos que optar por outra solução.

4. CONCLUSÕES

A partir dos resultados obtidos até o momento, pode-se concluir que com o conhecimento técnico da equipe de pesquisadores é possível aplicar o projeto de forma eficiente e barata, não sendo necessário a compra de equipamentos sofisticados, equipamentos estes que em razão de suas diversas funcionalidades (não utilizadas em sua totalidade) possuem um preço elevado e muitas vezes inviável.

Dessa forma, conclui-se que o presente projeto possibilitará adquirir dados de colisões atômicas e moleculares de qualidade e em menor tempo, aumento sua eficiência e diminuindo seus erros estatísticos, possibilitando que áreas de interesse tecnológico associados as colisões atômicas e moleculares possam ser desenvolvidas.

REFERÊNCIAS

- DUQUE, H. V. et all. Cross sections for electron scattering from tetrahydrofurfuryl alcohol. **Chem. Phys. Lett.**, vol. 608, pp. 161–166, 2014.
- PIRES, W. A. D.; NIXON, K. L.; GOSH, S.; AMORIN, R. A. A.; NEVES, R. F. C.; DUQUE, H. V. et all. Electron Impact Ionization of 1-Butanol: I. Mass Spectra and Partial Ionization Cross Sections. **Int. J. Mass Spectrom.**, Mar/2018pp. 60, 2018.
- PIRES, W. A. D.; NIXON, K. L.; GOSH, S.; NEVES, R. F. C.; DUQUE, H. V. et all. Electron impact ionisation of 1-Propanol. **Int. J. Mass Spectrom.**, Aug/2017pp. 10, 2017.
- NIXON, K. L.; PIRES, W. A. D.; NEVES, R. F. C.; DUQUE, H. V.; et all. Electron impact ionisation and fragmentation of methanol and etanol. **Int. J. Mass Spectrom.**, vol. 404, pp. 48–59, 2016.