

Entre a simulação e a “realidade”: estratégias e expectativas na internacionalização do conhecimento científico

Márcio Felipe Salles Medeiros

Orientador: Prof. Dr. Fabrício Monteiro Neves

Curso: Doutorado em Sociologia

Data da defesa: 08.04.2022

Este trabalho tem como finalidade compreender de que modo os pesquisadores da área de pesquisa *in silico*, relacionada à Density Functional Theory (DFT), compreendem a internacionalização e são influenciados por ela. Para tanto, inicialmente, é trazido o debate sobre o modo de funcionamento da área e suas peculiaridades, visto que a DFT trabalha com simulações computacionais, o que influencia diretamente a forma de fazer ciência e influencia a tomada de decisão dos pesquisadores. A fim de compreender as dinâmicas de interação internacional, foram realizadas entrevistas e observações *in locu* junto a pesquisadores de um laboratório vinculado à Universidade de São Paulo (USP), e de mais dois laboratórios internacionais, um na Suíça outro na Suécia, os quais apresentam cooperação com o laboratório brasileiro, totalizando 34 entrevistas. Também foi utilizado como material de análise o banco de dados da Web of Science, coletando as referências de artigos relacionados a DFT, a fim de verificar a relevância e as conexões dos laboratórios analisados. Como matriz metodológica, o trabalho é baseado na “teoria fundamentada em dados”, que visa construir modelos analíticos a partir de dados empíricos qualitativos, organizados a partir de sua recorrência. A partir da análise dos dados, emergem três conceitos centrais: o de expectativa, o de intuição e o de internacionalização. Por fim, discute-se a organização teórica do material, com base na organização e sistematização dos dados de campo, estando, portanto, no último capítulo a discussão teórica da tese. Como resultado, foi possível verificar que as expectativas em relação à internacionalização congregam elementos pessoais, acadêmicos e relacionados à trajetória, cuja região mais importante é os Estados Unidos.

Palavras-chave: Expectativa. Density Function Theory. Internacionalização. *In silico*.