

Relatório de Atividades de 2017

Willian Ricardo Rocha

Departamento de Química – ICEx

Universidade Federal de Minas Gerais

1. Atividades de Ensino:

Primeiro Semestre de 2017

1) Disciplina: QUI060 Métodos Físicos de Análises I (Nível: Graduação Turma: TA)

Tipo: Teórica ; CHS = 60 ; CHS Total = 60 ; CHS = 4 ; CHS Docente = 4

2) Disciplina: QUI060 Tópicos em Físico-Química Avançada A

(Nível: Pós-Graduação, Turma: TO)

Tipo: Teórica ; CHS = 60 ; CHS Total = 60 ; CHS = 4 ; CHS Docente = 2

3) Disciplina: QUI604 Físico-Química II Experimental

(Nível: Graduação, Turma: PS1C)

Tipo: Prática, CHS=30; CHS Total = 30 ; CHS = 2; CHS Docente =2

CH Semanal Total = 8

CH Semestral Total = 120

Segundo Semestre de 2017

1) Disciplina: QUI060 Métodos Físicos de Análises I (Nível: Graduação Turma: TA)

Tipo: Teórica ; CHS = 60 ; CHS Total = 60 ; CHS = 4 ; CHS Docente = 4

2) Disciplina: QUI060 Tópicos em Físico-Química Avançada A

(Nível: Pós-Graduação, Turma: TO)

Tipo: Teórica ; CHS = 60 ; CHS Total = 60 ; CHS = 4 ; CHS Docente = 2

3) Disciplina: QUI604 Físico-Química II Experimental

(Nível: Graduação, Turma: PS1C)

Tipo: Prática, CHS=30; CHS Total = 30 ; CHS = 2; CHS Docente =2

CH Semanal Total = 8

CH Semestral Total = 120

Observação: CHS (Carga Horária Semestral), CHS Docente (Carga Horária Semanal do Docente na Turma), Carga Horária Semanal = CHS/15 semanas, Carga Horária Semestral Total do Docente = (Σ CHS Docente)* 15 semanas.

2. Atividades Administrativas, Extensão, Consultorias, Comissões.

- 1) Membro suplente da Câmara Departamental do DQ/UFMG
- 2) Membro Titular da Comissão de Avaliação de Teses do DQ/UFMG para o Prêmio CAPES de Teses.
- 3) Membro Titular da Comissão de Avaliação de Docentes do Programa de Pós-Graduação do DQ/UFMG
- 4) Membro Titular da Comissão de Reestruturação do Laboratório de Computação Científica da UFMG.
- 5) Membro Titular da Comissão de Avaliação das Solicitações de Redistribuição de Docentes do DQ/UFMG
- 6) Membro Titular da Comissão de Avaliação de Redistribuição de Docentes.
- 7) Membro Titular da Comissão de Seleção para a Admissão ao Doutorado do Programa de Pós-Graduação em Química da UFMG. (Primeiro Semestre)
- 9) Representante Suplente no Conselho Diretor do Laboratório de Computação Científica da UFMG.
- 10) Consultor Internacional para a Agência NOW (The Netherlands Organization for Scientific Research)
- 11) Consultorias ad hoc para o Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e tecnológico (CNPq).
- 12) Consultorias ad hoc para a Fundação de Amparo à Ciência e Tecnologia do Estado de Pernambuco (FACEPE).
- 13) Consultorias ad hoc para a Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de São Paulo (FAPESP).
- 14) Consultoria ad hoc na Análise de Projetos de Pesquisa da Universidade Estadual de Goiás.
- 15) Revisor dos seguintes periódicos:

- a) Journal of Computational Chemistry
- b) Journal of Physical Chemistry A e B.
- c) International Journal of Quantum Chemistry
- d) Chemical Physics Letters
- e) Inorganica Chimica Acta
- f) Physical Chemistry Chemical Physics
- g) Journal of the Brazilian Chemical Society
- h) Spectrochimica Acta A
- i) Advances in Quantum Chemistry
- j) Research Letters in Physical Chemistry
- k) Journal of Organometallic Chemistry
- l) ACS Catalysis
- m) Chinese Journal of Chemistry

2.1 Bancas Acadêmicas:

1) Título: Estudo computacional da não conservação de spin: reação de Haber-Weiss e reação do ferro porfirina com diferentes ligantes axiais em fase gasosa.

Tipo: Tese de Doutorado

Aluna: Ezequiel Fragoso Vieira Leitão

Local: Departamento de Química – UFPB

2) Título: Desenvolvimento e estudo fundamental de novos supercapacitores híbridos para armazenamento de energia empregando líquidos iônicos como eletrólitos.

Tipo: Tese de Doutorado

Aluno: Paulo Fernando Ribeiro Ortega

Local: Departamento de Química – UFMG

3) Título: Descrição eletrônica das ligações de halogênio: uma jornada em busca de novos potenciais empíricos.

Tipo: Dissertação de Mestrado

Aluno: Lucas de Azevedo Santos

Local: Departamento de Química – UFLA

4) Título: Valorização dos sesquiterpenóides β -cariofileno e óxido de cariofileno por meio da reação de hidroformilação catalisada por complexos de ródio.

Tipo: Dissertação de Mestrado

Aluno: Amanda de Camargo Faria

Local: Departamento de Química – UFMG

5) Título: Síntese, Caracterização e Estudo Fotoquímico de Complexos Heterobimetálicos de Metais de Transição e Terras Raras: Possíveis OLEDs ou DSSCs.

Tipo: Exame de Qualificação ao Doutorado

Aluna: Clayton Malheiros de Souza

Local: Departamento de Química – UFMG

6) Título: Estudo Teórico de Complexos Polipiridínicos de Rutênio: Fotofísica e Interações com Alvos Biológicos.

Tipo: Exame de Qualificação ao Doutorado

Aluno: Taís Christofani

Local: Departamento de Química – UFMG

7) Título: Preparação e caracterização de pontos quânticos de carbono a partir da biomassa

Tipo: Trabalho de Conclusão de Curso de Graduação

Aluno: Natália Maria Borges Ladeira

Local: Departamento de Química – UFMG

8) Título: Preparo de novos complexos de Ru(II) com ligantes mistos como agentes fotocitotóxicos

Tipo: Pré-Banca de Doutorado

Aluna: Ariane Carla Campos de Melo

Local: Departamento de Química Fundamental – UFMG

3. Atividades de Pesquisa e orientações:

3.1 Artigos Publicados:

1. S. A. Suarez, M. Muõz, L. Alvarez, M. F. Venãncio, D. E. Bikiel, M. A. Martí, W. R. Rocha, F. Doctorovich, HNO is produced by the reaction of NO with thiols. *Journal of the American Chemical Society*, **2017**, 139, 14483-14487.

F.I: 13.858, Qualis: A1

2. M. F. Venãncio, F. Doctorovich, W. R. Rocha, Solvation and Proton-Coupled Electron Transfer Reduction Potential of ^2NO to ^1HNO in Aqueous Solution: A Theoretical Investigation. *Journal of Physical Chemistry B*, **2017**, 121, 6618-6625, 2017.

F. I.: 3.177, Qualis: A2

3. A. A. Oliveira, G. M. C. Perdigão, L. E. Rodrigues, J. G. Da Silva, E. M. Souza-fagundes, J. Takahashi, W. R. Rocha, H. Beraldo, Cytotoxic and antimicrobial effects of indium(iii) complexes with 2-acetylpyridine-derived thiosemicarbazones. *Dalton Transactions*, **2017**, 46, 918-932.

F.I.: 4.029, Qualis: A1

4. H. F. Dos Santos, M. A. Chagas, L. A. De Souza, M. V. De Almeida, C. P. Anconi, W. R. Rocha, W. B. De Almeida, Water Solvent Effect on Theoretical Evaluation of ^1H NMR Chemical Shifts: *o* -Methyl-Inositol Isomer. *Journal of Physical Chemistry A*, **2017**, 121, 2839-2846.

F. I.: 2.847, Qualis: B1

5) N. V. Reis, W. P. Barros, W. X. C. Oliveira, C. L. M. Pereira, W. R. Rocha, C. B. Pinheiro, F. Lloret, M. Julve, H. O. Stumpf, Crystal structure of an oxamato-bridged heterobimetallic tetranuclear $[\text{Ni}^{\text{II}}\text{Cu}^{\text{II}}]_2$ complex of the rack-type, *European Journal of Inorganic Chemistry*, **2017**, Aceito.

F. I.: 2.444, Qualis: B1

6) T. H. O. Norte, R. B. P. Marcelino, R. P. L. Moreira, I. Binatti, M. C. Starling, C. C. Amorim, E. S. Pereira, W. R. Rocha, R. M. Lago, ESI-MS, UV-Vis and theoretical investigation of Fe^{3+} -amoxicillin complexation during coagulation, *Journal of Environmental Engineering*, **2017**, Aceito.

Qualis: B3

Relato ainda que os seguintes artigos estão submetidos e ainda não recebi respostas:

7) E. S. Pereira, M. A. Chagas, Sousa Reduction Potential of Ru(III)-based Complexes with Potential Antitumor Activity and Thermodynamics of their Hydrolysis Reactions and Interactions with Possible Biological Targets, *Inorganica Chimica Acta*. Qualis: B2

8) M. A. Chagas, E. S. Pereira, J. C. S Da Silva, W. R. Rocha, Theoretical Investigation of the Neutral Hydrolysis of Diethyl 4-Nitrophenyl Phosphate (Paraoxon) in Aqueous Solution. *ACS Omega*. Qualis: B2

9) A. F. Santos, I. P. Ferreira, C. B. Pinheiro, V. G. Santos, M. T. P. Lopes, L. R. Teixeira, G. L. Rodrigues, W. R. Rocha, H. Beraldo, Silver(I) complexes with 2-benzoylpyridine-derived hydrazones show cytotoxic effects against melanoma tumor cells. *New Journal of Chemistry*. F. I.: 3.249, Qualis: A2

10) L. De Souza, L. De Freitas, A. Lohan Dos Santos, F. Da Costa, J. Calixto, P. V. Miranda, T. Silva, E. S. Pereira, W. R. Rocha, W. B. De Almeida, Synthesis, structural characterization and Zn(II) coordination proof by QTAIM of a 8-hydroxyquinoline derivative. *Journal of Molecular Structure*. Qualis: B2

3.2 Desenvolvimento de Projetos:

1) Título: Mecanismo de Ação de Metaloenzimas Envolvidas na Oxidação de Metano e Hidrólise de Compostos Organofosforados: Uma Abordagem Teórica.

Processo: 480808/2013-9 (Edital Universal Faixa B), CNPq

2) Título: Investigação Teórica do Mecanismo de Ação Envolvidos na Oxidação de Metano e Hidrólise de Compostos Organofosforados.

Processo: CEX - APQ-02488-15 (Edital Universal), FAPEMIG

3) Título: Estudo Teórico de Processos Reativos em Solução.

Processo: 306860/2013-9 (Bolsa de Produtividade em Pesquisa nível 1D), CNPq.

4) Título: Estudo da Reatividade de Complexos Ru-NO na Captura/Liberação de Óxido Nítrico em Solução.

Projeto de Doutorado do Aluno Gabriel Libânio Silva Rodrigues.

5) Título: Mecanismo de Ação de Metaloenzimas Envolvidas na Hidrólise de Compostos Organofosforados: Uma Abordagem Teórica.

Projeto de Doutorado do Aluno Marcelo Andrade Chagas

6) Título: Estudo Teórico de Complexos Polipiridínicos de Rutênio: Fotofísica e Interações com Alvos Biológicos.

Projeto de Doutorado da Aluna Taís Christofani

7) Título: Estudo Teórico de Processos de Interesse Biológico Envolvendo Complexos de Rutênio em Solução

Projeto de Doutorado da Aluna Eufrásia Sousa Pereira

8) Título: Estudo Computacional do Oxido Nítrico em Solução: Dinâmica Molecular, Potenciais de Redução e Fotoliberação por complexos de Ru-Nitrosil.

Projeto de Doutorado do Aluno: Mateus Fernandes Venâncio.

9) Título: Simulação Computacional de Processos Reativos em Solução.

Projeto de Iniciação Científica da Aluna Marina Purri Brant.

3.3 Atividades de Orientação:

Defesa de tese de Doutorado Concluída:

1. Aluno: Mateus Fernandes Venâncio

Título: *Estudo Computacional do Óxido Nítrico em Solução: Dinâmica Molecular, Potenciais de Redução e Fotoliberação por complexos de Ru-Nitrosil.*

Nível: **Doutorado**, CNPq, 2017.

Orientações em dos Seguintes Alunos:

1) Aluno: Marcelo Andrade Chagas, Nível: Doutorado, Agência: CNPq

2) Aluno: Gabriel Libânio Silva Rodrigues, Nível: Doutorado, Agência: CAPES

3) Aluno: Mateus Fernandes Venâncio, Nível: Doutorado, Agência: CNPq.

4) Aluna: Taís Christofani, Nível: Doutorado, Agência: CNPq

5) Aluna: Eufrásia Sousa Pereira, Nível: Doutorado, Agência: CNPq.

6) Aluna: Marina Purri Brant, Nível: Iniciação Científica, Agência: PIBIC-CNPq

7) Aluna: Jéssica Coelho, Nível: Trabalho de Conclusão de Curso de Graduação.

4.: Palestras Convidadas:

1) Título: Release of NO from Ruthenium Nitrosyl Complexes in Aqueous Solution

Evento: International conference on Modeling Interaction in Biomolecules VIII,

Pilsen, República Tcheca, 2017.

2) Título: Dynamics of Nitric Oxide in Solution.

Evento: 6to Simposio Latinoamericano de Química de Coordinación y Organometálica, 6to SILQCOM and Humboldt Kolleg: German-Latin American Symposium on Organometallic and Coordination Chemistry (HK-GLASOCC),

Puerto Iguazú, Argentina, 2017.

3) Título: Estrutura Eletrônica, Dinâmica e Reatividade em Sistemas de Interesse da Química Bioinorgânica.

Evento: XXXI Encontro Regional da Sociedade Brasileira de Química

Itajubá, MG, 2017.

Belo Horizonte, 28 de novembro de 2017


Prof. William R. Rocha
Departamento de Química
ICEX - UFMG