

Parecer sobre projeto de pesquisa para efetivação no regime de dedicação exclusiva

Coordenador do projeto: Prof. Dr. Leonardo Humberto Rezende dos Santos

Título do projeto: Correlações entre Densidade Eletrônica e Propriedades de Materiais Cristalinos

Consultora: Profa. Dra. Renata Diniz

O projeto apresentado pelo coordenador tem como objetivos principais a determinação e análise da distribuição da densidade eletrônica de carga e de spin em materiais orgânicos e híbridos metal-orgânicos com a finalidade de identificar possíveis indicadores qualitativos ou quantitativos que possam correlacionar as propriedades macroscópicas dos cristais, em especial as propriedades magnéticas, com os detalhes da sua estrutura eletrônica. O projeto está bem fundamentado tanto do ponto de vista teórico quanto da parte experimental proposta, sendo a ideia apresentada relevante e atual. O coordenador apresenta metas de trabalho para os próximos três anos compatíveis com as condições atualmente disponíveis tanto no Departamento de Química e no Laboratório de Cristalografia da UFMG quanto em outras instituições nas quais já existem colaborações existentes. As sínteses propostas bem como as medidas de difração de raios X e de cálculos teóricos são compatíveis com os objetivos propostos para essa primeira etapa do plano de trabalho. O projeto conta também com propostas de pesquisas a longo prazo que serão interessantes para outros grupos de pesquisa do Departamento de Química/UFMG que poderão gerar colaborações e resultados relevantes, em especial para os grupos de cristalografia e de propriedades magnéticas. O coordenador do projeto possui experiência em determinação estrutural de estruturas cristalinas por difração de raios X bem como em medidas e refinamentos de dados experimentais de difração para determinação da densidade eletrônica. No seu trabalho de doutoramento, assim como no seu estágio de pós-doutoramento, ambos realizados no exterior, o professor Leonardo aprimorou sua experiência em análise da distribuição de densidade eletrônica experimental e teórica bem como na interpretação de propriedades magnéticas de complexos metálicos e polímeros de coordenação, o que o habilita para coordenar o presente projeto. Além disso, o professor possui publicações em revistas importantes e de grande impacto tanto da química, como *Journal of the American Chemical Society* e *The Journal of Physical Chemistry*. A, quanto de cristalografia, como *CrystEngComm* e *Crystal Growth & Design*. A minha avaliação final sobre o projeto é pela aprovação no formato apresentado.

Belo Horizonte, 03 de fevereiro de 2017



Profa. Renata Diniz