



Departamento de Química
Instituto de Ciências Exatas
Universidade Federal de Minas Gerais
Phone: +55 31 3409-5766 Fax: +55 31 3409-5700
Web: <http://www.qui.ufmg.br>

Belo Horizonte, 9 de Julho de 2015

Ilmo. Sr.
Prof. Dario Windmüller
Chefe do Depto. De Química – ICEX
Universidade Federal de Minas Gerais

Prezado Professor,

Conforme solicitado, segue anexo o meu parecer sobre o projeto de pesquisa do Prof. Guilherme Ferreira de Lima.

Atenciosamente,

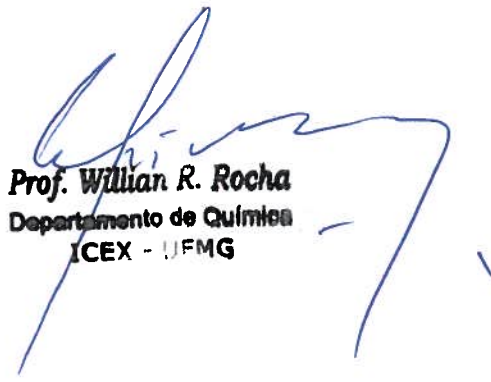

Prof. Willian R. Rocha

Parecer Técnico Científico

Projeto: *Estudo Teórico de Mecanismos de Adsorção de Gases Leves e de Reações Catalisadas por Metal-Organic Frameworks.*

Coordenador: Prof. Guilherme Ferreira de Lima

O presente projeto tem como objetivo a utilização de cálculos baseados na Teoria do Funcional de Densidade para investigar a natureza da interação de gases leves, como o gás carbônico, com MOF's (Metal-Organic Frameworks). Em particular serão investigadas as MOF $Zn_2(BDC)_2(TED)$ [BDC: benzeno-1,4-dicarboxilato e TED: trietilenodiamino] e $Cu(dpa)_2(SiF_6)$ [DPA: 4,4'-bipiridina] e suas derivadas funcionalizados. As MOF's vêm sendo muito utilizadas atualmente em várias áreas da Química e, a compreensão fundamental da natureza das interações Químicas e dos mecanismos reacionais envolvendo estes sistemas é ainda insipiente. Desta forma, acredito que a execução do presente projeto irá colaborar significativamente para o entendimento de vários processos de adsorção de gases em MOF's e este entendimento certamente irá contribuir para o planejamento racional de novas MOF's para este fim. A proposta possui mérito científico e acadêmico, estando com os objetivos e metas bem claro. O cronograma de atividades proposto, está de acordo com os objetivos e metas almejados. O Prof. Guilherme Ferreira de Lima possui experiência comprovada no tema proposto, que pode ser avaliada por suas várias contribuições que vem dando nos últimos anos. Cabe ressaltar que o projeto apresentado já possui financiamento garantido pelo CNPq referente à sua aprovação dentro da chamada MCTI/CNPq/Universal 14/2014 Faixa A. Somado a isso o Prof. Guilherme Ferreira de Lima está envolvido, como colaborador, em uma série de projetos como o INCT-Aqua e, mais recentemente, no PRONEM/FAPEMIG (Programa de Núcleos Emergentes de Pesquisa). Desta forma, os recursos para a realização do projeto estão assegurados. A meu ver os resultados advindos da execução do presente projeto poderão contribuir de maneira significativa para o desenvolvimento de novos materiais e/ou aprimoramento de metodologias experimentais para estudo de adsorção de gases em MOF's . Baseado no que foi exposto, dou-me parecer favorável à execução do projeto.



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