

RELATÓRIO DE ATIVIDADES DE 2016

Período: 5 de Fevereiro de 2016 a 31 de Dezembro de 2016.

PROF. GUILHERME FERREIRA DE LIMA

DEPARTAMENTO DE QUÍMICA

UNIVERSIDADE FEDERAL DE MINAS GERAIS

SUMÁRIO

1. Disciplinas Ministradas	1
1.1. Primeiro Semestre de 2016.....	1
1.2. Segundo Semestre de 2016.....	1
2. Participação em Bancas.....	2
2.1 Bancas de Seminário Departamental:.....	2
2.2 Bancas de Qualificação de Mestrado	2
2.3 Bancas de Qualificação de Doutorado	2
2.4 Bancas de Dissertação de Mestrado	3
2.5 Banca de Tese de Doutorado.....	3
3. Coordenações:	3
4. Participação em Comissões	3
5. Publicações	4
6. Revisão de Artigos em Periódicos Indexados	4
7. Organização de Eventos	4
8. Projetos em Coordenados	4
9. Orientações Concluídas	5
10. Orientações em Andamento.....	5

1. Disciplinas Ministradas

Desde o início das minhas atividades como professor no Departamento de Química da UFMG estive envolvido tanto em disciplinas teóricas na graduação e na pós-graduação bem como disciplinas práticas na graduação. Todas as disciplinas ministradas fluíram com tranquilidade e bom relacionamento professor-aluno.

A relação das disciplinas ministradas, bem como seus créditos e turmas, estão listadas abaixo e discriminadas por semestre letivo.

1.1. Primeiro Semestre de 20016

1.1.1. Química Geral B – QUI003

Turma: TE - Noturno

Carga horária: 60 horas

1.1.2. Química Geral F – QUI203

Turma: TF2 - Noturno

Carga horária: 60 horas

1.1.3. Química Geral Experimental F – QUI204

Turma: PU7B- Noturno

Carga horária: 30 horas

1.1.4. Redação Científica I

Turma: Q1 - Diurno

Carga horária: 15 horas

Carga horária do Semestre (1º/2016): 165 horas

1.2. Segundo Semestre de 2016

1.2.1. Química Geral B – QUI003

Turma: TN3 - Diurno

Carga horária: 60 horas

1.2.2. Química Geral C – QUI143

Turma: TE - Noturno

Carga horária: 60 horas

1.2.3. Química Geral Experimental C – QUI144

Turma: PE4 - Noturno

Carga horária: 30 horas

Carga horária do Semestre (2º/2016): 150 horas

Além das disciplinas ministradas, atuei como tutor dos seguintes alunos na disciplina de estágio a docência I da pós-graduação:

- Adriano Silva Guimarães
- Alexandre Moreira Meireles
- Guilherme Augusto de Melo Jardim
- Yuri Machado

2. Participação em Bancas

No período em questão, tive participação ativa em diversas bancas de avaliação de estudantes.

A relação das participações em bancas está listada a seguir.

2.1 Bancas de Seminário Departamental:

2.1.1. Defesa de seminário departamental de **Henrique dos Santos Oliveira**, intitulado “**Fotocatálise: Fenômenos, Materiais e algumas Reações**” realizada no dia 03 de junho de 2016 no Departamento de Química da Universidade Federal de Minas Gerais.

2.1.2. Defesa de seminário departamental de **Claudilene Regina da Silva**, intitulado “**Compósitos Poliméricos para Proteção Balística**” realizada no dia 01 de julho de 2016 no Departamento de Química da Universidade Federal de Minas Gerais.

2.1.3. Defesa de seminário departamental de **Victor Augusto Araújo de Freitas**, intitulado “**Recentes Avanços para Valorização da Lignina e sua Integração na Biorrefinaria**” realizada no dia 24 de agosto de 2016 no Departamento de Química da Universidade Federal de Minas Gerais.

2.1.4. Defesa de seminário departamental de **Adriana Barbosa Salviano**, intitulado “**Fósforo: Reservas, Usos e Recuperação de Efluentes Industriais**” realizada no dia 07 de dezembro de 2016

2.2 Bancas de Qualificação de Mestrado

2.2.1. Defesa de exame de qualificação de **Walber Gonçalves Guimarães Júnior**, intitulada “**Estudo Teórico da Adsorção de Gases leves nas Redes Metalorgânicas SIFSIX-2-Cu, SIFSIX-2-Cu-i e SIFSIX-3-Cu**” realizada no dia 16 de setembro de 2016 no Instituto de Física e Química da Universidade Federal de Itajubá.

2.2.2. Defesa de exame de qualificação de **Bruna Lemes Silva**, intitulada “**Estudo Computacional de Mecanismos de Processos de Redução de Platina(IV) a Platina(II)**” realizada no dia 16 de setembro de 2016 no Instituto de Física e Química da Universidade Federal de Itajubá.

2.3 Bancas de Qualificação de Doutorado

2.3.1. Defesa de exame de qualificação de **Marcelo Andrade Chagas**, intitulada “**Mecanismo de Ação de Metaloenzimas envolvidas na Hidrólise de Compostos Organofosforados: Uma Abordagem Teórica**” realizada no dia 14 de março de 2016 no Departamento de Química da Universidade Federal de Minas Gerais.

2.3.2. Defesa de exame de qualificação de **Cayo Emílio Monteiro Gonçalves**, intitulado “**Estudo ab initio de Alta Precisão Aplicados à Pequenas Moléculas**” realizada no dia 18 de março de 2016 no Departamento de Química da Universidade Federal de Minas Gerais.

2.3.3. Defesa de exame de qualificação de **Eufrásia de Souza Pereira**, intitulado “*Estudo Teórico de Processos de Interesse Biológico Envolvendo Complexos de Rutênio em Solução*” realizada no dia 28 de novembro de 2016 no Departamento de Química da Universidade Federal de Minas Gerais.

2.4 Bancas de Dissertação de Mestrado

2.4.1. Defesa de dissertação de mestrado de **Christina Telles Borges**, intitulado “*Estudo Teórico da Interação da proteína ATP7a com a cisplatina*” realizada no dia 27 de junho de 2016 no Instituto de Física e Química da Universidade Federal de Itajubá.

(Co-orientador da estudante).

2.4.2. Defesa de dissertação de mestrado de **Charles Augusto Santos Moraes**, intitulado “*Caracterização Termodinâmica e Estrutural de Sistemas Supramoleculares envolvendo Pentoxifilina e Ciclodextrinas*” realizada no dia 28 de junho de 2016 no Instituto de Física e Química da Universidade Federal de Itajubá.

2.5 Banca de Tese de Doutorado.

2.5.1. Defesa de tese de doutorado de **Antônio Lenito Soares Júnior**, intitulado “*Propriedades Estruturais, Eletrônicas e Termodinâmicas da Bornita, Covelita e Calcocita – Um Estudo DFT*” realizada no dia 21 de julho de 2016 no Departamento de Química da Universidade Federal de Minas Gerais.

3. Coordenações:

3.1. Coordenador de Química Geral Teórica (Portaria 58 de 20 de setembro de 2016).

Período: 16/05/16 – Atual.

4. Participação em Comissões

Além das comissões de avaliação dos discentes na graduação e na pós-graduação, também tive a oportunidade de participar em diversas comissões de interesse do departamento. Além disso, tive o prazer de participar da comissão de seleção de professor adjunto da Universidade Federal de Itajubá – Campus Itabira.

Abaixo segue a lista de comissões:

4.1. Comissão Examinadora do Concurso de Professor Substituto, área Química Inorgânica e Química Geral – **Portaria 03 de 25 de fevereiro de 2016.**

4.2. Membro Titular da comissão julgadora do concurso público para professor de magistério superior, adjunto A, na Universidade Federal de Itajubá – Campus Itabira realizada no período de 12 a 16 de dezembro de 2016.

4.3. Comissão Receptora e Escrutinadora de votos da Eleição de Representantes dos Docentes junto à Congregação do ICEX.

5. Publicações

A seguir estão listados os trabalhos que publicamos neste período, tendo adicionalmente alguns que estão submetidos porém ainda não foram aceitos, e dessa forma não foram incluídos nesta relação.

5.1. Gontijo, Talita ; Freitas, Rossimiram ; **De Lima, Guilherme Ferreira** ; Rezende, Lucas ; Pedrosa, Leandro ; Silva, Thaissa ; Goulart, M.O.F. ; Cavalcanti, Bruno ; Pessoa, Cláudia ; Bruno, Marina ; Corrêa, José ; Emery, Flavio Da Silva ; Silva Junior, Eufranio . Novel fluorescent lapachone-based BODIPY: Synthesis, computational and electrochemical aspects, and subcellular localization of a potent antitumour hybrid quinone. *Chemical Communications*, 52 13281-13284, 2016.

6. Revisão de Artigos em Periódicos Indexados

6.1 Revisão de artigo na *Journal of the Turkish Chemical Society Section A: Chemistry*

6.2 Revisão de artigo na *Journal of Advanced Research*

6.3 Revisão de artigo na *2D Materials and Application*

6.4 Revisão de artigo na *RSC Advances*

7. Organização de Eventos

7.1. Membro da comissão organizadora da V Jornada de Inverno de Química realizada nos dias 28 a 30 de julho de 2016. (**Portaria 19 de 04 de Abril de 2016**).

8. Projetos em Coordenados

Abaixo seguem os projetos, com fomento, no qual sou o coordenador. Alguns desses projetos foram aprovados quando eu era docente na Universidade Federal de Itajubá, mas já foi feito todo o processo de transferência junto às agências de fomento de modo que todos os recursos bem como os equipamentos ficarão alocados neste departamento.

8.1. MCTI/CNPQ Edital 14/2014 – Demanda Universal PROCESSO N°.: 446381/2014-4. Projeto: **“Estudo Teórico de Mecanismos de Adsorção de Gases Leves e de Reações Catalisadas por Metal-Organic Frameworks”**.

Valor: R\$ 28.350,00

8.2. Programa Primeiros Projetos (PPP)/ Fapemig Edital 17/2013 Processo.: CEX - APQ-00612-14, Projeto: **“Investigação Computacional Da Adsorção De Gases Leves E De Processos Catalíticos Em Metal-Organic Frameworks”**

Valor: R\$ 19.550,00

8.3. PRPq/UFGM Edital 05/2016 Recém Contratados. Projeto: “Estudo computacional de adsorção de álcoois, éteres e água em MOFs isoreculares da $Zn_2(BDC)_2(TED)$ ”.

Valor: R\$ 4.800 (bolsa de IC) + R\$ 4.800 (Equipamento).

Além desses projetos dos quais estou como organizador vale ressaltar que faço parte da equipe executora de outros importantes projetos como, por exemplo, o PRONEM 2014 coordenado pelo

prof. Tiago Brandão deste departamento, bem como do INCT-Acqua coordenado pela profa. Virgínia Ciminelli da Escola de Engenharia da UFMG.

9. Orientações Concluídas

9.1. Christina Telles Borges – Mestrado (Co-orientador)

Título: Estudo Teórico da Interação da proteína ATP7a com a cisplatina

9.2. Igor Lucas Rodrigues Dias – Programa de Monitoria de Graduação do Departamento de Química - Monitor de Química Geral.

10. Orientações em Andamento

10.1. Aline de Oliveira – Doutorado DQ/UFMG (Co-orientador)

Título do projeto: “Propriedade catalítica da rede metalorgânica MOF-74 para as reações de cianossililação de aldeídos e cicloadição de dióxido de carbono aos epóxidos”.

10.2. Walber Gonçalves Guimarães Júnior – Doutorado DQ/UFMG (Co-orientador)

Título do Projeto: “Reatividade química de óxidos e sulfetos na presença de água em processo de interesse da indústria mineral – uma abordagem computacional”.

10.3. Selma Fabiana Bazan – Mestrado DQ/UFMG (Co-orientador)

Título do Projeto: “Mecanismo De Reação Catódica Em Baterias Recarregáveis À Base De Azul Da Prússia - Uma Abordagem DFT”.

10.4 Vinicius Pires Gonçalves – Iniciação Científica (bolsista) (Orientador)

Título do Projeto: “Estudo Teórico da Adsorção seletiva de gases na MOF $Zn_2(BDC)_2(TED)$ ”

10.5. Gabriel Oliveira Casagrande – Iniciação Científica (Bolsista – Pro-Noturno) (Orientador)

Título do projeto: “Investigação teórica da reação de deslocamento de vapor de água em catalisadores heterogêneos”

Belo Horizonte, 18 de Dezembro de 2017.



Prof. Guilherme Ferreira de Lima

000000

000000

000000

000000

RELATÓRIO DE ATIVIDADES DE 2017

Período: 1 de Janeiro de 2017 a 18 de Dezembro de 2017.

PROF. GUILHERME FERREIRA DE LIMA

DEPARTAMENTO DE QUÍMICA

UNIVERSIDADE FEDERAL DE MINAS GERAIS

SUMÁRIO

1. Disciplinas Ministradas	1
1.1. Primeiro Semestre de 2017.....	1
1.2. Segundo Semestre de 2017.....	1
2. Participação em Bancas	2
2.1 Banca de TCC.....	2
2.2 Bancas de Seminário Departamental:.....	2
2.3 Bancas de Qualificação de Doutorado	2
2.4 Bancas de Dissertação de Mestrado	3
3. Coordenações:	3
4. Participação em Comissões	4
5. Publicações	4
6. Revisão de Artigos em Periódicos Indexados	4
7. Participação em Eventos e Trabalhos Apresentados de Co-Autoria	5
8. Projetos em Coordenados	5
9. Orientações Concluídas	6
10. Orientações em Andamento.....	6

1. Disciplinas Ministradas

Desde o início das minhas atividades como professor no Departamento de Química da UFMG estive envolvido tanto em disciplinas teóricas na graduação e na pós-graduação bem como disciplinas práticas na graduação. Todas as disciplinas ministradas fluíram com tranquilidade e bom relacionamento professor-aluno.

A relação das disciplinas ministradas, bem como seus créditos e turmas, estão listadas abaixo e discriminadas por semestre letivo.

1.1. Primeiro Semestre de 2017

1.1.1. Química Geral C – QUI143

Turma: TE - Noturno
Carga horária: 60 horas

1.1.2. Química Geral Experimental – QUI019

Turma: PS4C - Diurno
Carga horária: 30 horas

1.1.3. Tópicos em Química Inorgânica Avançada B – QUI818

Turma: I - Diurno
Carga horária: 56 horas
Disciplina da pós-graduação dividida com a professora Maria Helena Araújo (4 horas)

1.1.4. Química Inorgânica C1 – QUI147

Turma: TE - Noturno
Carga horária: 15 horas
Disciplina assumida em substituição ao professor Danilo Ayala por motivos de licença Médica.

Carga horária do Semestre (1º/2017): 161 horas

Além das disciplinas ministradas, atuei como tutor dos seguintes alunos na disciplina de estágio a docência I da pós-graduação:

- Diego Gomes Rocha
- Gesiane Da Silva Lima
- Mozart Silvio Pereira
- Samara Ben Berg Bomjardim Bahia

1.2. Segundo Semestre de 2017

1.2.1. Tópicos em Química Inorgânica Avançada B – QUI818

Turma: I - Diurno
Carga horária: 56 horas
Disciplina da pós-graduação dividida com a professora Maria Helena Araújo (4 horas)

1.2.2. Química Inorgânica C1 – QUI147

Turma: TE - Noturno
Carga horária: 60 horas

1.2.3. Química Geral Experimental – QU204

Turma: PU7A - Noturno

Carga horária: 4 horas

1.2.4. Redação Científica – QU885

Turma: HH1 – Pós-Graduação

Carga horária: 15 horas

Carga horária do Semestre (2º/2017): 135 horas

2. Participação em Bancas

No período em questão, tive participação ativa em diversas bancas de avaliação de estudantes.

A relação das participações em bancas está listada a seguir.

2.1 Banca de TCC

2.1.1. Defesa de Trabalho de Conclusão de Curso de **Lorena Almeida Cadête Costa**, intitulado “**Síntese, caracterização e estudo eletroquímico do $\text{Na}_3\text{FeCO}_3\text{PO}_4$ para aplicação em baterias recarregáveis de íon sódio**” realizada no dia 18 de janeiro de 2017 no Departamento de Química da Universidade Federal de Minas Gerais.

2.2 Bancas de Seminário Departamental:

2.2.1. Defesa de seminário departamental de **Ívina Paula de Souza**, intitulado “**Compostos de Gálio(III) com atividade antitumoral**” realizada no dia 31 de março de 2017 no Departamento de Química da Universidade Federal de Minas Gerais.

2.2.2. Defesa de seminário departamental de **Gilvan Moreira da Paz**, intitulado “**Serpentinito: Propriedades Estruturais e Potenciais Aplicações**” realizada no dia 28 de junho de 2017 no Departamento de Química da Universidade Federal de Minas Gerais.

2.2.3. Defesa de seminário departamental de **Eufrásia de Sousa Pereira**, intitulado “**Incorporação de íons metálicos como potenciais fármacos**” realizada no dia 30 de junho de 2017 no Departamento de Química da Universidade Federal de Minas Gerais.

2.3 Bancas de Qualificação de Doutorado

2.3.1. Defesa de exame de qualificação de **Carlos Amaya Vargas**, intitulado “**Development of Heterogeneous Catalyst Based on MCM-41 and Lanthanide Ions**” realizada no dia 06 de março de 2017 no Departamento de Química da Universidade Federal de Minas Gerais.

2.3.2. Defesa de exame de qualificação de **Paulo Roberto Garcês**, intitulado “**Investigação do Mecanismo de Adsorção de Arsênio e Cádmio em Óxidos de Manganês e Ferro**” realizada no dia 07 de março de 2017 no Departamento de Química da Universidade Federal de Minas Gerais.

2.3.3. Defesa de exame de qualificação de **Alexandre Moreira Meireles**, intitulado “*Porfirinas de Manganês como Catalisadores Biomiméticos Homogêneo ou Heterogêneos para a Transformação de Antibióticos*” realizada no dia 27 de junho de 2017 no Departamento de Química da Universidade Federal de Minas Gerais.

2.3.4. Defesa de exame de qualificação de **Egon Campos dos Santos**, intitulado “*Computation Simulation of the Pyrite/Arsenopyrite Interfaces-Galvanic effect in Chemical*” realizada no dia 03 de agosto de 2017 no Departamento de Química da Universidade Federal de Minas Gerais.

2.3.5. Defesa de exame de qualificação de **Cledivânia Silveira Rocha**, intitulado “*Complexos de Ag(I) e Cu(II) Contendo Hidrazonas: Síntese, Atividade Biológica e Estudos de Interação com o DNA e Proteína*” realizada no dia 10 de agosto de 2017 no Departamento de Química da Universidade Federal de Minas Gerais.

2.4 Bancas de Dissertação de Mestrado

2.4.1. Defesa de dissertação de mestrado de **Mariana da Silva Cunha**, intitulado “*Análise de Ligação de Hidrogênio por Superfícies de Hirshfeld*” realizada no dia 21 de fevereiro de 2017 no Instituto de Ciências Exatas da Universidade Federal de Juiz de Fora.

2.4.2. Defesa de dissertação de mestrado de **Walber Gonçalves Guimarães Júnior**, intitulado “*Estudo Teórico da Adsorção de Gases leves nas Redes Metalorgânicas SIFSIX-2-Cu, SIFSIX-2-Cu-i e SIFSIX-3-Cu*” realizada no dia 24 de fevereiro de 2017 no Instituto de Física e Química da Universidade Federal de Itajubá.

(Orientador do estudante. Até a defesa deste aluno, eu era vinculado ao programa de pós-graduação multicêntrico de Minas Gerais. Após a defesa, solicitei o meu desligamento.)

2.4.3. Defesa de dissertação de mestrado de **Elizabeth Luciana Marinho Miguel**, intitulado “*Mecanismo da Quebra de Paraoxon com Derivados da Hidroxilamina e Análise da Viabilidade de Catálise Nucleofílica*” realizada no dia 05 de abril de 2017 no Departamento de Ciências Naturais da Universidade Federal de São João del Rei.

2.4.4. Defesa de dissertação de mestrado de **Bruna Lemes Silva**, intitulada “*Estudo Computacional de Mecanismos de Processos de Redução de Platina(IV) a Platina(II)*” realizada no dia 26 de maio de 2017 no Instituto de Física e Química da Universidade Federal de Itajubá.

2.4.5. Defesa de dissertação de mestrado de **Maíra dos Santos Costa**, intitulada “*Oxidação Aeróbica de Olefinas Catalisada por Metais de Transição*” realizada no dia 25 de Junho de 2017 no Departamento de Química da Universidade Federal de Minas Gerais.

2.4.6. Defesa de dissertação de mestrado de **Thales Fernando Dias Pereira**, intitulada “*Investigação Teórica do Processo de Formação de um Polímero de Impressão Molecular para o Carvedilol*” realizada no dia 11 de Agosto de 2017 no Departamento de Ciências Naturais da Universidade Federal de São João Del Rei (Participação via Skype).

3. Coordenações:

3.1. Coordenador de Química Geral Teórica (Portaria 58 de 20 de setembro de 2016).

Período: 16/05/16 – Atual.

4. Participação em Comissões

Além das comissões de avaliação dos discentes na graduação e na pós-graduação, também tive a oportunidade de participar em diversas comissões de interesse do departamento.

Abaixo segue a lista de comissões:

- 4.1. Comissão Examinadora do processo de seleção de monitor de Química Geral – Portaria 07 de 17 de março de 2017.**
- 4.2. Comissão de Avaliação do Processo seletivo de pós-graduação em Química para o segundo semestre de 2017.**
- 4.3. Comissão Examinadora do processo seletivo para monitor de Química Geral Experimental. Edital 10/2017 – Portaria 31 de 30 de Agosto de 2017.**
- 4.4. Comissão de Avaliação do Processo seletivo de pós-graduação em Química para o primeiro semestre de 2018.**
- 4.5. Comissão de elaboração de Exame de Comprovação de conhecimento de Química Geral – QUI003 – do aluno Deybson Lucas Romualdo Silva – Portaria 03/2017.**

5. Publicações

A seguir estão listados os trabalhos que publicamos neste período, tendo adicionalmente alguns que estão submetidos porém ainda não foram aceitos, e dessa forma não foram incluídos nesta relação.

- 5.1. Steffler, Fernando; De Lima, Guilherme Ferreira ; Duarte, H. A. Polyoxomolybdate formation - A thermodynamic analysis from density functional/PCM calculations. Chemical Physics Letters, 669, 104-109, 2017.**
- 5.2. Dos Santos, Fabíola ; G. Dias, Gleiston ; P. De Freitas, Rossimiriam ; S. Santos, Lucas ; de Lima, Guilherme Ferreira ; A. Duarte, Hélio ; A. De Simone, Carlos ; Rezende, Lidia ; J. X. Vianna, Monique ; R. Correa, José ; A. D. Neto, Brenno ; Da Silva Júnior, Eufrânio Nunes . Redox Center Modification of Lapachones Toward the Syntheses of Nitrogenated Heterocycles as Selective Fluorescent Mitochondrial Imaging Probes. European Journal of Organic Chemistry 2017, 3763.**
- 5.3. De Oliveira, Aline ; Mavrandonakis, Andreas ; De Lima, Guilherme F. ; De Abreu, Heitor A. Cyanosilylation of Aldehydes Catalyzed by MIL-101(Cr): A Theoretical Investigation. ChemistrySelect, v. 2, p. 7813-7820, 2017.**
- 5.4. De Oliveira, Aline ; Ferreira De Lima, Guilherme ; Avelino de Abreu, Heitor . Structural And Electronic Properties Of M-MOF-74 (M=Mg, Co Or Mn). Chemical Physics Letters, 2017, in press.**

6. Revisão de Artigos em Periódicos Indexados

- 6.1 Revisão de artigo na *Journal of the Turkish Chemical Society Section A: Chemistry***

6.2 Revisão de artigo na *Journal of Advanced Research*.

6.3 Revisão de artigo na *2D Materials and Application*

6.4 Revisão de artigo na *RSC Advances*

7. *Participação em Eventos e Trabalhos Apresentados de Co-Autoria*

7.1. 19º Congresso Brasileiro de Catálise e IX Congresso Mercosul de Catálise.

Pôster: Mecanismo de Cianossililação de Aldeídos Catalisada pela MOF-74.

7.2. Simpósio Brasileiro de Química Teórica.

Pôster: Structural and Electronic Properties of MOF-74

7.3. XXXI Encontro Regional da Sociedade Brasileira de Química – MG.

Minicurso Ministrado: Modelagem Computacional de Sólidos e Superfícies.

8. *Projetos em Coordenados*

Abaixo seguem os projetos, com fomento, no qual sou o coordenador. Alguns desses projetos foram aprovados quando eu era docente na Universidade Federal de Itajubá, mas já foi feito todo o processo de transferência junto às agências de fomento de modo que todos os recursos bem como os equipamentos ficarão alocados neste departamento.

8.1. MCTI/CNPQ Edital 14/2014 – Demanda Universal PROCESSO Nº.: 446381/2014-4. Projeto: **“Estudo Teórico de Mecanismos de Adsorção de Gases Leves e de Reações Catalisadas por Metal-Organic Frameworks”**.

Valor: R\$ 28.350,00

8.2. Programa Primeiros Projetos (PPP)/ Fapemig Edital 17/2013 Processo.: CEX - APQ-00612-14, Projeto: **“Investigação Computacional Da Adsorção De Gases Leves E De Processos Catalíticos Em Metal-Organic Frameworks”**

Valor: R\$ 19.550,00

8.3. PRPq/UFGM Edital 05/2016 Recém Contratados. Projeto: “Estudo computacional de adsorção de álcoois, éteres e água em MOFs isoreculares da $Zn_2(BDC)_2(TED)$).

Valor: R\$ 4.800 (bolsa de IC) + R\$ 4.800 (Equipamento).

8.4. PIBIC/PROBIC PRPq 2017. Projeto: **“Estudo teórico de adsorção de gases leves em rede metalo-organicas”**.

Além desses projetos dos quais estou como organizador vale ressaltar que faço parte da equipe executora de outros importantes projetos como, por exemplo, o PRONEM 2014 coordenado pelo prof. Tiago Brandão deste departamento, bem como do INCT-Acqua coordenado pela profa. Virgínia Ciminelli da Escola de Engenharia da UFGM.

9. Orientações Concluídas

9.1. Walber Gonçalves Guimarães Júnior – Mestrado (Orientador)

Título: *Estudo Teórico da Adsorção de Gases leves nas Redes Metalorgânicas SIFSIX-2-Cu, SIFSIX-2-Cu-i e SIFSIX-3-Cu*

10. Orientações em Andamento

10.1. Aline de Oliveira – Doutorado DQ/UFMG (Co-orientador)

Título do projeto: “Propriedade catalítica da rede metalorgânica MOF-74 para as reações de cianossililação de aldeídos e cicloadição de dióxido de carbono aos epóxidos”.

10.2. Walber Gonçalves Guimarães Júnior – Doutorado DQ/UFMG (Co-orientador)

Título do Projeto: “Reatividade química de óxidos e sulfetos na presença de água em processo de interesse da indústria mineral – uma abordagem computacional”.

10.3. Selma Fabiana Bazan – Mestrado DQ/UFMG (Co-orientador)

Título do Projeto: “Mecanismo De Reação Catódica Em Baterias Recarregáveis À Base De Azul Da Prússia - Uma Abordagem DFT”.

10.4 Vinicius Pires Gonçalves – Iniciação Científica (bolsista) (Orientador)

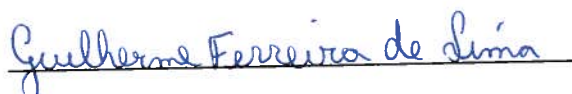
Título do Projeto: “Estudo Teórico da Adsorção seletiva de gases na MOF $Zn_2(BDC)_2(TED)$ ”

10.5. Gabriel Oliveira Casagrande – Iniciação Científica (Bolsista – Pro-Noturno) (Orientador)

Título do projeto: “Investigação teórica da reação de deslocamento de vapor de água em catalisadores heterogêneos”

10.6. Camila Santos Lima – Programa de Monitoria de Graduação do Departamento de Química Monitora de Química Geral.

Belo Horizonte, 18 de Dezembro de 2017.



Prof. Guilherme Ferreira de Lima