

RELATÓRIO DE ATIVIDADES DE 2021

Período: 1 de Janeiro de 2021 a 31 de Dezembro de 2021.

PROF. GUILHERME FERREIRA DE LIMA

DEPARTAMENTO DE QUÍMICA

UNIVERSIDADE FEDERAL DE MINAS GERAIS

SUMÁRIO

1. Disciplinas Ministradas	1
1.1. Primeiro Semestre de 2021	1
1.2. Segundo Semestre de 2021	1
2. Participação em Bancas	1
2.1 Bancas de Qualificação	1
2.2 Bancas de Dissertação de Mestrado	2
2.3 Bancas de Tese de Doutorado	3
3. Atividades Administrativas:	3
4. Participação em Comissões / Representações	3
5. Publicações	3
6. Artigos Revisados.....	3
7. Projetos em Coordenação	4
8. Orientações em Andamento.....	4
9. Participação em eventos:	4

1. Disciplinas Ministradas

1.1. Primeiro Semestre de 2021

1.1.1. Química Inorgânica – QUI896

Pós-Graduação em Química

Carga horária: 60 horas

1.1.2. Química Inorgânica F – QUI291

Graduação – Curso de farmácia - Diurno

Carga horária: 30 horas

1.1.3. Química Inorgânica F – QUI291

Graduação – Curso de farmácia - Noturno

Carga horária: 30 horas

Carga horária do Semestre (1º/2021): 120 horas

1.2. Segundo Semestre de 2021

1.2.1. Química Inorgânica – QUI896

Pós-Graduação em Química

Carga horária: 60 horas

1.2.2. Química Inorgânica CI – QUI147

Graduação – Curso de Química - Noturno

Carga horária: 60 horas

Carga horária do Semestre (2º/2021): 120 horas

2. Participação em Bancas

2.1 Bancas de Qualificação

2.1.1. Exame de Qualificação de doutorado de **Felipe Silva Carvalho**, intitulado “**Termodinâmica Estatística e Redes Neurais Aplicadas ao Estudo de Fluídos Atômicos**” realizada no dia 11 de janeiro de 2021 no Departamento de Química da Universidade Federal de Minas Gerais.

2.1.2 Exame de Qualificação de mestrado de **Paulo Henrique de Sousa Paulino**, intitulado “**Procedimentos Estratégicos para a melhora da condutividade de polímeros conjugados: Uma investigação teórica**” realizado no dia 11 de março de 2021, de forma online, no Programa de Pós-Graduação em Física e Química de Materiais

2.1.3 Exame de Qualificação de doutorado de **Adelson de Oliveira Dias**, intitulado “**Processos catalíticos tandem em condições de hidroformilação para aplicação na química fina**” realizado no dia 6 de abril de 2021, de forma online, no Programa de Pós-Graduação Química da UFMG.

2.1.4 Exame de Qualificação de doutorado de **Cleverton Oliveira Cavalcanti da Silveira**, intitulado “**Estudo de complexos metálicos mono e dinucleares contendo ligantes oxamato: uma abordagem computacional de magnetos moleculares**” realizado no dia 30 de setembro de 2021, de forma online, no Programa de Pós-Graduação Química da UFMG.

2.1.5 Exame de Qualificação de doutorado de **Umar Lucio Esper Mucelli Rezende**, intitulado “**Desenvolvimento de algoritmos genéticos aplicados ao estudo de nanoclusters atômicos e/ou moleculares acoplados a cálculos clássicos e ab-initio**” realizado no dia 14 de dezembro de 2021, de forma online, no Programa de Pós-Graduação Química da UFMG.

2.2 Bancas de Dissertação de Mestrado

2.2.1. Defesa de dissertação de mestrado de **Mileny Pires de Oliveira**, intitulado “**Funcionalização em sítios distintos da molécula do óxido de limoneno: Processos “one-pot” de hidroformilação/isomerização e de hidroformilação/acetilação**” realizada no dia 26 de março de 2021 no Departamento de Química da Universidade Federal de Minas Gerais.

2.2.2. Defesa de dissertação de mestrado de **Ana Luisa Abrantes Simões**, intitulado “**Síntese de geopolímeros a partir da caulinita, metacaulinita e espodumênio e sua aplicação como adsorvente de amoxicilina**” realizada no dia 26 de abril de 2021 no Departamento de Química da Universidade Federal de Minas Gerais.

2.2.3. Defesa de dissertação de mestrado de **Paulo Henrique de Sousa Paulino**, intitulado “**Procedimentos estratégicos para a melhora da condutividade do poli(p-fenileno): uma investigação teórica.**” realizado, de forma online, no Programa de Pós-Graduação em Física e Química de Materiais

2.2.4. Defesa de dissertação de mestrado de **Mariana Yoshinaga**, intitulado “**Estudo teórico da fotofísica do composto 4,5-dibromorodamina metil éster (TH9402) utilizado como fotossensibilizador em terapia fotodinâmica.**” Realizado em 30 de julho de 2021 no Departamento de Química da Universidade Federal de Minas Gerais.

2.2.5. Defesa de dissertação de mestrado de **Daniel Furst Pessoa**, intitulado “**Estudo termodinâmico dos processos avançados de oxidação utilizando a teoria do funcional da densidade: avaliação de possíveis reações de abstração de átomos de hidrogênio do tenofovir pelo radical hidroxila.**” Realizado em 09 de junho de 2021 no Departamento de Química da Universidade Federal de Minas Gerais.

2.2.6. Defesa de dissertação de mestrado de **Gabriel Monteiro de Castro**, intitulado “**Estudo teórico da adsorção de átomos, íons e clusters de Li em nanoestruturas de carbono: Um**

potencial modelo para aplicações eletroquímicas” Realizado em 17 de fevereiro de 2021 no Departamento de Química da Universidade Federal de Minas Gerais.

2.3 Bancas de Tese de Doutorado

2.3.1. Defesa de tese de doutorado de **Ingrid Fernandes Silva**, intitulado **“Nitretos de Carbono: Diferentes Estratégias de Modificação para Melhores Atividades Fotocatalíticas”** realizada no dia 30 de julho de 2021 no Departamento de Química da Universidade Federal de Minas Gerais.

3. Atividades Administrativas:

3.1. Subchefe do Departamento de Química.

4. Participação em Comissões / Representações

4.1. Comitê Local de Organização do Simpósio Brasileiro de Química Teórica de 2021.

4.2. Comitê Nacional de Organização do Simpósio Brasileiro de Química Teórica de 2021.

4.3. Comitê Nacional de Organização (Representante de Minas Gerais) do Simpósio Brasileiro de Química Teórica de 2021.

4.4. Comitê de seleção do mestrado e doutorado do programa de pós-graduação em Química da UFMG em 2021/1.

4.5. Comitê de avaliação dos trabalhos do XXI SBQT (cerca de 600 pôsteres foram avaliados).

4.6. Comissão de Sindicância do Instituto de Ciências Exatas.

5. Publicações

5.1. Comparative DFT study of the oxy(hydr)oxides of iron and aluminum - structural, electronic and surface properties, *Surface Science*, 78, 121821, 2021 (Artigo de Capa).

5.2. Molecular Structure Studies on Allyl Sulfonamides: Synthesis, Theoretical Treatment and Evaluation of Biological Activity, *Journal of the Brazilian Chemical Society* 32, 2033, 2021.

6. Artigos Revisados

6.1. *Applied Surface Science* : APSUSC-D-21-08190

6.2. *Química Nova*: QN-2021-0241.

6.3. *Revista Virtual de Química*: Agradecimento enviado em 2 de dezembro. A revista não adota código e não tenho forma sigilosa de identificar o manuscrito.

7. Projetos em Coordenação

7.1. MODELAGEM DE REAÇÕES QUÍMICAS NAS SUPERFÍCIES DA CALCOPIRITA E EM SUPERFÍCIES MODIFICADAS DE COBRE.

Coordenador

Universal Fapemig.

Vigência: julho 2021 – Julho 2024

Valor aprovado: R\$ 31970,00

Faço parte da equipe executora de outros importantes projetos como, por exemplo, do INCT-Acqua coordenado pela profa. Virgínia Ciminelli da Escola de Engenharia da UFMG e da Rede RENOVAMIN coordenada pelo prof. Hélio Anderson Duarte deste departamento.

8. Orientações em Andamento

8.1. Selma Fabiana Bazan – Doutorado DQ/UFMG (Orientador**)**

Título do Projeto: “Estudos computacionais de mecanismos de oxidação de superfícies da calcopirita”.

8.2. Marcelo Vieira Alves – Doutorado DQ/UFMG (Co-orientador**)**

Título do Projeto: “Dinâmica Molecular da MOF-74 com adsorventes gasosos em seu poro”.

8.3. Vinicius Gonçalves Souto Fontenelle – Iniciação Científica (PROBIC) (Orientador**)**

Título do projeto: “Modelagem de catalisadores de cobre para produção de moléculas orgânicas com 2 ou 3 átomos de carbono”

8.4. Bruno Teixeira da Silva – Mestrado DQ/UFMG (Orientador**)**

Título do projeto: Modelagem da interação do ácido fórmico com superfícies modificadas de cobre.

8.5. Ian Kelvin Rocha Andrade – Mestrado DQ/UFMG (Co-orientador**)**

Título do projeto: Investigação das propriedades catalíticas da MOF URJC-1 - Uma abordagem DFT

9. Participação em eventos:

9.1. XXI Simpósio Brasileiro de Química Teórica, no qual foi co-autor dos seguintes trabalhos:

9.1.1. Investigação teórica do mecanismo da reação de condensação de Knoevenagel entre compostos carbonílicos e malononitrilo.

9.1.2. Electronic and structural study of $[\text{Fe}(\text{H}_2\text{O})(\text{OH}_3)]$ and O_2 adsorption in (001) and (112) chalcopyrite surface.

9.1.3. Adsorção do ácido fórmico catalisado por superfícies de cobre.

9.1.4. Single-atom Formic Acid Dehydrogenation Catalysis.

Prof. Guilherme Ferreira de Lima