

# PROGRAMA

## IDENTIFICAÇÃO DA DISCIPLINA

**DISCIPLINA:** Redes Metalorgânicas

**NOME DA DISCIPLINA EM INGLES:** *Metal-Organic Frameworks (MOFs)*

**CURSO:** Programa de Pós-Graduação em Química

**PRÉ-REQUISITOS:** não há

**CARGA DIDÁTICA:** 90 h

**DURAÇÃO EM SEMANAS:** 10

**NÚMERO DE CRÉDITOS:** 6

**NÚMERO MÍNIMO DE ALUNOS:** 5

**NÚMERO MÁXIMO DE ALUNOS:** 25

**PROFESSOR RESPONSÁVEL:** Profa. Dra. Regina C. G. Frem

## DISCIPLINA: **Redes Metalorgânicas**

### **OBJETIVO**

Ao final desta disciplina, o aluno deverá ter conhecido o estado-da-arte dessa nova classe de materiais porosos, ainda muito pouco estudada no Brasil. Serão apresentados, inicialmente, os conceitos principais que constituem a espinha dorsal das redes metalorgânicas, incluindo química de coordenação, química reticular, cristalografia e funcionalização química. Serão abordados também os principais tipos de MOFs e suas propriedades, incluindo uma sub-classe conhecida como *ZIFs*, *Zeolitic Imidazolate Frameworks*. Ênfase será dada às potencialidades de aplicação desses materiais e seus compósitos nas áreas de adsorção e separação, catálise homogênea, biomedicina e fotônica. Está prevista, também, a realização de duas aulas práticas, objetivando ensinar aos alunos a síntese, caracterização e aplicação de alguns desses materiais.

### **CONTEÚDO PROGRAMÁTICO**

1 - *Fundamentos*: definição; breve histórico; nomenclatura IUPAC e terminologia; tipos e geometrias de ligantes orgânicos; principais geometrias de coordenação de íons metálicos.

2 –*Química Reticular*: descrição do conceito de unidades de construção secundárias; topologia de redes; estrutura, flexibilidade e desordem.

3 –*Ilustração das principais estruturas moleculares baseadas em MOFs*: MOF-5, MIL-101, UiO-66, HKUST-1, ZIF-8.

4 –*Pré- e pós-funcionalização química de redes metalorgânicas*: MOFs multivariadas; tipos de PSM (modificações pós-síntese).

5 –*Síntese, ativação e caracterização de MOFs*: métodos convencionais de síntese, novas rotas de preparação de MOFs, principais processos de ativação, métodos de caracterização estrutural, térmico, morfológico e espectroscópico de MOFs.

6 –*Principais propriedades das redes metalorgânicas*: cristalinidade, porosidade, estabilidade térmica, potencialidade de funcionalização.

7 –*Aplicações de MOFs*: adsorção, separação, catálise, biomedicina, fotônica, outras aplicações.

#### **Parte Prática:**

A- Síntese de duas MOFs (Fe-BTC e ZIF-67) e caracterização das redes.

B- Utilização das MOFs como materiais adsorventes de corantes.

**BIBLIOGRAFIA**

O. M. Yaghi, M. J. Kalmutzki, C. S. Diercks. **Introduction to Reticular Chemistry: Metal-Organic Frameworks and Covalent Organic Frameworks**. Wiley-VCH: Weinheim, 2019.

M. J. Kalmutzki, N. Hanikel, O. M. Yaghi. **Secondary building units as the turning point in the development of the reticular chemistry of MOFs**. *Sci. Adv.* 2018, 4: eaat9180.

O. M. Yaghi. **The reticular chemist**. *Nano Lett.* 2020, 20, 8432–8434.

L. Öhrström, Françoise M. Amombo Noa. **Metal-Organic Frameworks**. *American Chemical Society* 2021. DOI: 10.1021/acs.infocus.7e4004.

A. Kirchon, L. Feng, H. F. Drake, E. A. Joseph, H.-C. Zhou. **From fundamentals to applications: a toolbox for robust and multifunctional MOF materials**. *Chem. Soc. Rev.* 2018, 47, 8611-8638.

R. C. G. Frem, G. Arroyos, J. B. S. Flor, R. C. Alves, G. N. Lucena, C.M. Silva, M. F. Coura. **MOFs (Metal-Organic Frameworks): uma fascinante classe de materiais inorgânicos porosos**. *Química Nova*, 2018, 41, 1178-1191.

R. C. G. Frem, G. Arroyos, G. N. Lucena, J. B. S. Flor, M. A. Fávaro, M. F. Coura, R. C. Alves. **The amazing chemistry of Metal-Organic Frameworks**. IN: *Recent Advances in Complex Functional Materials. From Design to Application*. Editors: Longo, Elson, La Porta, Felipe de Almeida. SPRINGER. 2017. DOI 10.1007/978-3-319-53898-3.

RODGERS, G. E. **QUÍMICA INORGÂNICA DESCRITIVA, DE COORDENAÇÃO E DO ESTADO SÓLIDO**. Cengage Learning, 2017. 648 p.

**DISCIPLINA: Redes Metalorgânicas****CRITÉRIOS DE AVALIAÇÃO**

A Média Final na disciplina (MF) será calculada pela seguinte fórmula:

$$MF=(A1+A2 + A3)/3$$

onde:

**Avaliação A1:** Fundamentos das Redes Metalorgânicas, Química Reticular, Principais MOFs, Funcionalização de MOFs.

**Avaliação A2:** Síntese, ativação e caracterização de MOFs.

**Avaliação A3:** Propriedades e principais aplicações de MOFs.

As avaliações ( $A_n$ ) serão preferencialmente aplicadas na forma de provas escritas, seminários ou pelo processo de Aprendizado Baseado em Equipes (TBL – *Team Based Learning*).

**EMENTA**

Fundamentos das Redes Metalorgânicas. Química Reticular e as Unidades de Construção Secundárias. Topologia e estrutura. Exemplos das principais classes de MOFs. Funcionalização. Síntese. Ativação. Caracterização. Propriedades. Aplicações.