MINISTÉRIO DA EDUCAÇÃO
UNIVERSIDADE FEDERAL DE OURO PRETO
REITORIA
PRO-REITORIA DE PLANEJAMENTO, ORCAMENTO E FINANCAS
COORDENADORIA DE CONVENIOS
DIVISAO DE CELEBRACAO DE CONVENIOS

1º TERMO ADITIVO AO TERMO DE CONVÊNIO DE EDUCAÇÃO, CIÊNCIA, TECNOLOGIA E INOVAÇÃO QUE ENTRE SI CELEBRARAM A VALE S.A., A UNIVERSIDADE FEDERAL DE OURO PRETO – UFOP E A UNIVERSIDADE ESTADUAL PAULISTA – UNESP, COM INTERVENIÊNCIA DA FUNDAÇÃO GORCEIX EM 14/12/2023.

A **VALE S.A**., sociedade com sede na Praia de Botafogo nº 186, salas 901, 1101, 1601 (parte), 1701 e1801, Botafogo, na Cidade e Estado do Rio de Janeiro, CEP 22250-145, inscrita no CNPJ/MF sob o n°33.592.510/0001-54, adiante denominada **VALE**, aqui representada por seus representantes legais; a **UNIVERSIDADE FEDERAL DE OURO PRETO – UFOP**, fundação de direito público, com autonomia didático-científica, administrativa financeira e disciplinar nos termo do Decreto-Lei nº 778 de 21 de agosto de 1969, com sede na Rua Diogo de Vasconcelos, 122, Centro, Ouro Preto/MG, CEP 35.400-000, inscrita no CNPJ sob o n° 23.070.659/0001-10, neste ato representada por seu Reitor, Prof. Dr. Luciano Campos da Silva, nos termos do Decreto Federal de 06 de fevereiro de 2025, publicado no Diário Oficial da União nº 27, de 07 de fevereiro de 2025 doravante denominada **UFOP** e a **UNIVERSIDADE ESTADUAL PAULISTA "JULIO DE MESQUITA FILHO" - UNESP**, autarquia estadual de regime especial, criada pela Lei n° 952 de 30.01.1976, com sede na Rua Quirino de Andrade, 215, Centro, CEP 01049-010, São Paulo/SP, inscrita no CNPJ/MF sob nº 48.031.918/0001-24, doravante designada simplesmente **UNESP**, neste ato, representada pela sua Reitora, de acordo com o Art. 34, I, de seu Estatuto, Profª. Drª. Maysa Furlan ou por quem legalmente o substitua, com a interveniência administrativa da **FUNDAÇÃO GORCEIX**, entidade jurídica de direito privado sem finalidade lucrativa na forma do seu Estatuto, com sede na Rua Carlos Walter Marinho Campos, 57, Vila Itacolomy, Ouro Preto/MG, CEP 35.400 000, inscrita no CNPJ sob o n° 23.063.118/0001-64, neste ato representada por seus representantes legais infra assinados, adiante denominada **FUNDAÇÃO**, individualmente denominadas **"Parte"** e em conjunto denominadas **"Partes"**.

CONSIDERANDO que, em 14/12/2023, as **Partes** celebraram o Termo de Convênio de Educação, Ciência, Tecnologia e Inovação, doravante denominado "Convênio", para o desenvolvimento do Projeto: **"Modelagem de Multiescala Aplicada para Processos de Aglomeração a Frio"**;

CONSIDERANDO que as **Partes** mantêm a relação jurídica em condições de pleno equilíbrio;

CONSIDERANDO o interesse das **Partes** em alterar o valor do Convênio, prorrogar o prazo de vigência do Convênio, com alteração da cláusula 7.1, acrescentar a cláusula 9.7 e substituir o Anexo II do Convênio (Plano de Trabalho e Orçamento detalhado).

Resolvem celebrar o presente **1º Termo Aditivo ao Convênio ("Termo Aditivo")**, de acordo com as seguintes cláusulas e condições:

CLÁUSULA PRIMEIRA – DO OBJETO

1.1 O presente Termo Aditivo tem como objeto: alterar o valor do Convênio, prorrogar o prazo de vigência do Convênio, com alteração da cláusula 7.1, acrescentar a cláusula 9.7 e substituir o Anexo II do Convênio (Plano de Trabalho e Orçamento detalhado).

CLÁUSULA SEGUNDA – DAS ALTERAÇÕES

2.1 Em consequência do disposto na cláusula 1.1 acima, as cláusulas 3.1 e 3.2 do Convênio passarão a ter a seguinte redação:

> 3.1 O valor total a ser desembolsado pela VALE à FUNDAÇÃO para execução do Projeto pelas INSTITUIÇÕES é de R$ R$ 7.392.805,89 (sete milhões, trezentos e noventa e dois mil, oitocentos e cinco reais e oitenta e nove centavos). A FUNDAÇÃO deverá abrir conta bancária específica para o Projeto.
>
> 3.1.1 O valor constante da presente Cláusula já inclui as despesas operacionais administrativas da FUNDAÇÃO, no limite do previsto no orçamento detalhado constante do Anexo II, que incluem os custos diretos e indiretos referentes à execução do Projeto e eventuais taxas bancárias, não cabendo à VALE quaisquer desembolsos adicionais.
>
> 3.1.2 A alteração de rubricas de despesas dependerá da prévia e escrita, sendo permitido correio eletrônico, anuência da VALE, que poderá, ou não, autorizar conforme seus critérios internos de financiamento de pesquisa, sem necessidade de Termo Aditivo, salvo na hipótese de alteração do valor do presente instrumento. Na hipótese de aprovação de remanejamento pela VALE, caberá à FUNDAÇÃO anexar a aprovação escrita a prestação de contas referente ao período da aprovação.
>
> 3.1.3 Todas as despesas com viagens e material de consumo descritos no Anexo II, deverão vir discriminadas, por despesa, por item, por membro da equipe e por data, no limite e conforme as linhas previstas do previsto no Anexo II, nas prestações de contas parciais e final, além do valor total gasto com cada rubrica no período, dispensada a necessidade de apresentação de comprovantes de despesas.
>
> 3.1.4 A FUNDAÇÃO deverá manter em seus arquivos os documentos comprobatórios das despesas com materiais de consumo e viagens, individuais, por item, por despesa e no caso de viagem por membro da equipe e por data, devendo apresentar os comprovantes em até 5 (cinco) dias úteis quando solicitado pela VALE, que poderá glosar a despesa na hipótese de indisponibilidade de documento comprobatório da despesa de forma individualizada.
>
> 3.1.5 Para todas as demais rubricas previstas no Anexo II, deverão ser anexados os documentos comprobatórios de despesas nas prestações de contas parciais e final, incluindo-se na hipótese de remanejamentos.
>
> 3.1.6 O valor constante da presente cláusula será distribuído pela FUNDAÇÃO entre as INSTITUIÇÕES de acordo com as rubricas e quantias dispostas no Anexo II.
>
> 3.2 O valor será desembolsado em 05 (cinco) parcelas, conforme previsto no Cronograma de Desembolso constante do Anexo II.

2.2 Em consequência do disposto na cláusula 1.1 acima, a cláusula 7.1 do Convênio passará a ter a seguinte redação:

> 7.1 O presente CONVÊNIO vigorará pelo prazo de 62 (sessenta e dois) meses, a partir da data de sua assinatura, ou da última assinatura eletrônica realizada, extinguindo-se após o cumprimento de todas as suas obrigações, sendo certo que as cláusulas de Propriedade Intelectual e Confidencialidade terão vigência de 20 (vinte) anos a contar do encerramento do CONVÊNIO. No caso de know-how associado aos resultados decorrentes da execução do
> Projeto, as Partes definirão em instrumento jurídico específico as condições relativas a este respeito, principalmente naqueles considerados confidenciais.

2.3 Em consequência do disposto na cláusula 1.1 acima, fica acrescida a cláusula 9.7 ao Convênio, com a seguinte redação:

> 9.7 Ao final do Projeto, ou caso as atividades sejam terminadas por qualquer motivo, ou se a VALE a qualquer momento exigir das demais Partes, estas se comprometem a devolver, apagar ou destruir, no prazo de 10 (dez) dias úteis, todo e qualquer material fornecido pela VALE ou seus Representantes que contenham de alguma forma Informações Confidenciais, devendo os Representantes das demais Partes fazer o mesmo, não podendo reter nenhuma cópia. Esta obrigação de devolver, apagar ou destruir deve também incluir qualquer documento preparado

pelas FUNDAÇÃO, UFOP e UNESP, ou seus Representantes que reflita ou contenha Informações Confidenciais.

2.4 Em consequência do disposto na cláusula 1.1 acima, fica o Anexo II do Convênio (Plano de Trabalho e Orçamento detalhado) substituído pelo anexo do presente aditivo.

CLÁUSULA TERCEIRA - DAS DISPOSIÇÕES GERAIS

3.1 Os Partes, através do presente Termo Aditivo, dão a mais plena, geral, rasa e irrevogável quitação, para todos os fins de direito, por todos os fatos passados até a presente data, ratificando todos os atos praticados e nada mais tendo a reivindicar, em juízo ou fora dele, a qualquer título, em relação às obrigações contratuais até aqui já executadas.

3.1.1 A quitação outorgada no item 3.1 acima não se aplica às garantias legais e/ou contratuais, bem como as demais responsabilidades dos Partes que, por sua natureza tenham caráter perene ou prazo prescricional ainda não decorrido, especialmente as relativas à responsabilidade civil perante terceiros, encargos trabalhistas e previdenciários, obrigações fiscais, direitos de propriedade intelectual e obrigação de confidencialidade, bem como a qualquer pleito futuro baseado em fatos desconhecidos por qualquer dos Partes na data do presente Termo Aditivo.

3.1.2 A quitação não se aplica, ainda, a eventuais prestações de contas, produtos e entregas pendentes de entrega pela UFOP, UNESP e/ou FUNDAÇÃO, e também aquelas que tenham tido seus prazos de entrega alterados pelo presente aditivo, ou ainda que estejam sob análise da VALE, que poderão ensejar a suspensão dos desembolsos pela VALE, conforme a Cláusula Terceira do Convênio.

3.2. Permanecem inalteradas e ratificadas todas as demais Cláusulas do Convênio, naquilo em que não conflitarem com o teor deste instrumento.

Em caso de assinatura física, o Termo Aditivo será assinado em 4 (quatro) vias de igual teor e forma, para um só efeito. Como alternativa à assinatura física do Termo Aditivo, as Partes declaram e concordam que a assinatura mencionada poderá ser efetuada em formato eletrônico. As Partes reconhecem a veracidade, autenticidade, integridade, validade e eficácia deste Termo Aditivo e seus termos, incluindo seus anexos, nos termos do art. 219 do Código Civil, em formato eletrônico e/ou assinado pelas Partes por meio de certificados eletrônicos, ainda que sejam certificados eletrônicos não emitidos pela ICP-Brasil, nos termos do art. 10, § 2º, da Medida Provisória nº 2.200-2, de 24 de agosto de 2001 (“MP nº 2.200-2”).

Ouro Preto/MG/Rio de Janeiro/RJ, XX de _____ de 2025.

_____
Prof. Dr. Luciano Campos da Silva
Reitor da UFOP

_____
Profª. Drª. Maysa Furlan
Reitora da UNESP

_____
Cristovam Paes de Oliveira
Presidente da Fundação Gorgeix

_____
XXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXX
Representantes da VALE S.A.

Documento assinado eletronicamente por **Luciano Campos da Silva**, **REITOR(A)**, em 05/11/2025, às 17:16, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no art. 6º, § 1º, do Decreto nº 8.539, de 8 de outubro de 2015.

Documento assinado eletronicamente por **Matheus Josue de Souza Matos**, **PROFESSOR DE MAGISTERIO SUPERIOR**, em 05/11/2025, às 17:18, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no art. 6º, § 1º, do Decreto nº 8.539, de 8 de outubro de 2015.

Documento assinado eletronicamente por **Alexandre Reily Rocha**, **Usuário Externo**, em 06/11/2025, às 10:18, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no art. 6º, § 1º, do Decreto nº 8.539, de 8 de outubro de 2015.

Documento assinado eletronicamente por **Cristovam Paes de Oliveira**, **Usuário Externo**, em 06/11/2025, às 15:55, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no art. 6º, § 1º, do Decreto nº 8.539, de 8 de outubro de 2015.

Documento assinado eletronicamente por **Maysa Furlan**, **Usuário Externo**, em 07/11/2025, às 10:04, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no art. 6º, § 1º, do Decreto nº 8.539, de 8 de outubro de 2015.

Documento assinado eletronicamente por **FELIPE VIANA PIMENTA**, **Usuário Externo**, em 07/11/2025, às 17:03, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no art. 6º, § 1º, do Decreto nº 8.539, de 8 de outubro de 2015.

Documento assinado eletronicamente por **ROGERIO TALES SILVA CARNEIRO**, **Usuário Externo**, em 07/11/2025, às 18:21, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no art. 6º, § 1º, do Decreto nº 8.539, de 8 de outubro de 2015.

A autenticidade deste documento pode ser conferida no site http://sei.ufop.br/sei/controlador_externo.php?acao=documento_conferir&id_orgao_acesso_externo=0 , informando o código verificador **1009088** e o código CRC **70A53898**.

R. Diogo de Vasconcelos, 122, - Bairro Pilar Ouro Preto/MG, CEP 35402-163
Telefone: (31)3559-1197 - www.ufop.br

MINISTÉRIO DA EDUCAÇÃO
UNIVERSIDADE FEDERAL DE OURO PRETO
REITORIA
PRO-REITORIA DE PLANEJAMENTO E ADMINISTRACAO
COORDENADORIA DE CONVENIOS
DIVISAO DE CELEBRACAO DE CONVENIOS

TERMO DE CONVÊNIO

TERMO DE CONVÊNIO DE EDUCAÇÃO, CIÊNCIA, TECNOLOGIA E INOVAÇÃO QUE ENTRE SI CELEBRAM A VALE S.A., A UFOP, UNESP E A FUNDAÇÃO GORCEIX

A VALE S.A., sociedade com sede na Praia de Botafogo nº 186, salas 1101, 1601, 1701 e 1801, Botafogo, na Cidade e Estado do Rio de Janeiro, CEP 22250-145, inscrita no CNPJ/MF sob o n° 33.592.510/0001-54, adiante denominada **VALE**, aqui representada por seus representantes legais infra assinados, a UNIVERSIDADE FEDERAL DE OURO PRETO, fundação de direito público, com autonomia didático-científica, administrativa financeira e disciplinar nos termo do Decreto-Lei nº 778 de 21 de agosto de 1969, com sede na Rua Diogo de Vasconcelos, 122, Centro, Ouro Preto/MG, CEP 35.400-000, inscrita no CNPJ sob o n° 23.070.659/0001-10, neste ato representada por sua Reitora, Prof.ª Dra. Cláudia Aparecida Marliére de Lima, brasileira, inscrita no CPF sob o n°. 529.005.096-53, portador da Carteira de Identidade n°. 2.316.159 - SSP/MG, doravante denominada **UFOP** e a UNIVERSIDADE ESTADUAL PAULISTA "JULIO DE MESQUITA FILHO" - UNESP, autarquia estadual de regime especial, criada pela Lei n° 952 de 30.01.1976, com sede na Rua Quirino de Andrade, 215, Centro, CEP 01049-010, São Paulo/SP, inscrita no CNPJ/MF sob nº 48.031.918/0001-24, doravante designada simplesmente **UNESP**, neste ato, representada por seu Reitor, de acordo com o Art. 34, I, de seu Estatuto, Prof. Dr. PASQUAL BARRETTI, inscrito no CPF sob o nº 034.430.398-55, RG nº 9.546.168 SSP/SP ou por quem legalmente o substitua, adiante denominada UNESP, com a interveniência administrativa da FUNDAÇÃO GORCEIX, entidade jurídica de direito privado sem finalidade lucrativa na forma do seu Estatuto, com sede na Rua Carlos Walter Marinho Campos, 57, Vila Itacolomy, Ouro Preto/MG, CEP 35.400-000, inscrita no CNPJ sob o n° 23.063.118/0001-64, neste ato representada por seus representantes legais infra assinados, adiante denominada FUNDAÇÃO, todas indistinta e individualmente denominadas "Parte" e, em conjunto, "Partes",

CONSIDERANDO que, para fins do presente instrumento, a UFOP e UNESP serão denominadas quando em conjunto como INSTITUIÇÕES;

CONSIDERANDO que as INSTITUIÇÕES trabalharão em conjunto para a execução das atividades de pesquisa concernentes ao Projeto;

CONSIDERANDO a intenção e interesse da VALE, da UNESP e da UFOP em realizar, em parceria, projeto de pesquisa, desenvolvimento e inovação;

Resolvem celebrar o presente Termo de Convênio de Educação, Ciência, Tecnologia e Inovação, com base nas Leis 10.973/2004 e 13.243/2016 e no Decreto 9.283/2018, Decreto nº 62.817/2017 e Decreto Federal n. 8.240, de 21 de maio de 2014, conforme as cláusulas e condições seguintes.

CLÁUSULA PRIMEIRA: DO OBJETO

1.1 O presente instrumento tem por objeto o desenvolvimento do projeto de pesquisa "Modelagem de Multiescala Aplicada para Processos de Aglomeração a Frio", adiante denominado "Projeto", conforme o Plano de Trabalho constante do Anexo II, constituído pela descrição do Projeto e do orçamento detalhado para execução do Projeto.

1.2 Os documentos abaixo relacionados integram e constituem parte inseparável do presente Convênio, prevalecendo, em caso de contradição, as disposições deste instrumento em relação às dos Anexos, que obedecerão a seguinte ordem de prevalência:

Anexo I	Política de Direitos Humanos, Política de Segurança da Informação, Política de Diversidade e Inclusão, Código de Ética e Conduta de Fornecedores e Guia de SSMA para Fornecedores VALE (disponível no website www.vale.com, não anexada fisicamente ao presente instrumento).
Anexo II	Plano de Trabalho e Orçamento Detalhado.

1.3 Fica certo e ajustado que o presente Convênio e os anexos acima enumerados constituem os únicos documentos que regulam o relacionamento das Partes e que pautarão a execução e a gestão do projeto ora formalizada, juntamente com os documentos que eventualmente sejam formalizados entre as Partes no decorrer de sua vigência.

1.4 Os documentos apresentados à VALE durante o processo de cotação e negociação deste Convênio e que não foram identificados pelas Partes no dispositivo acima como anexos contratuais tiveram sua utilização restrita à equalização das propostas inicialmente recebidas pela VALE, e não devem ser utilizados para qualquer outra finalidade.

1.5 A UFOP indica Matheus Josué de Souza Matos e a UNESP indica Alexandre Reily Rocha como responsável técnico do Projeto, adiante denominadas em conjunto “pesquisadores líderes”.

1.5.1 A alteração de qualquer dos Pesquisadores Líderes deverá ser comunicada à VALE com 30 (trinta) dias de antecedência. A comunicação deverá estar acompanhada da indicação do novo pesquisador líder e de seu currículo Lattes, sendo certo que a VALE poderá rescindir o presente instrumento, sem quaisquer ônus, caso não concorde com a nova indicação.

1.5.2 Caberá aos Pesquisadores Líderes cumprir com eventuais regras internas da INSTITUIÇÕES quanto à necessidade de envio de cópia dos relatórios de atividades e prestação de contas as instâncias internas cabíveis das INSTITUIÇÕES, desde que resguardadas as condições de sigilo, confidencialidade e propriedade intelectual do presente Convênio, sendo de responsabilidade das INSTITUIÇÕES a fiscalização do sigilo e de confidencialidade em suas próprias instâncias.

1.6 Para fins de gestão de questões administrativas serão considerados gestores do Convênio: Pela VALE: Contato: Fabricio Parreira, Centro de Tecnologia de Ferrosos, E-mail: fabricio.parreira@vale.com; pela UFOP: Prof. Matheus Josué de Souza Matos, CPF: 809.852.705-00, Departamento de Física / ICEB,com endereço profissional Departamento de Física, Instituto de Ciências Exatas e Biológicas, Universidade Federal de Ouro Preto, Campus Universitário Morro do Cruzeiro - Ouro Preto/MG CEP: 35400-000, E-mail: matheusmatos@ufop.edu.br e telefone celular: +55 (31) 99169-5315 ; pela UNESP: Prof. Dr. Alexandre Reily Rocha, CPF nº 287.249.288-79, Instituto de Física Teórica - IFT, com endereço profissional na R. Dr. Bento Teobaldo Ferraz, 271 - Bloco II – Barra Funda - São Paulo/SP - CEP 01140-070, e-mail: alexandre.reily@unesp.br e telefone: +55-11-3393-7804 e pela FUNDAÇÃO: Cristovam Paes de Oliveira,email: cristovam.oliveira@ufop.edu.br / gorceix@gorceix.org.br ,telefone +55 (31) 3559-7100

1.6.1 Qualquer alteração dos dados dos gestores indicados deverá ser imediatamente comunicada, por escrito, à outra Parte, sendo que a notificação ou comunicação dirigida servirá para produzir todos os efeitos contratuais consequentes, dispensando a assinatura de aditivo.

CLÁUSULA SEGUNDA: DO CRONOGRAMA DE ATIVIDADES E DOS PRODUTOS

2.1 As atividades necessárias para a execução do Projeto deverão ser realizadas conforme o Cronograma de Atividades e Marcos, constante do Anexo II.

2.2 Eventuais alterações no Cronograma de Atividades e Marcos deverão ser comunicadas à VALE e, na hipótese de atrasos, caberá aos Pesquisadores Líderes enviar a respectiva justificativa à VALE.

2.3 O não cumprimento ao Cronograma de Marcos e Atividades, bem como a não entrega dos Produtos constantes do Anexo II no prazo acordado,devidamente justificados, poderá impactar o desembolso dos recursos pela VALE, conforme disposto no presente instrumento.

CLÁUSULA TERCEIRA: DOS RECURSOS FINANCEIROS

3.1 O valor total a ser desembolsado pela VALE à FUNDAÇÃO para execução do Projeto pelas INSTITUIÇÕES é de R$ R$ 1.059.460,76 (hum milhão, cinquenta e nove mil, quatrocentos e sessenta reais e setenta e seis centavos). A FUNDAÇÃO deverá abrir conta bancária específica para o Projeto.

3.1.1 O valor constante da presente Cláusula já inclui as despesas operacionais administrativas da FUNDAÇÃO, no limite do previsto no orçamento detalhado constante do Anexo II, que incluem os custos diretos e indiretos referentes à execução do Projeto e eventuais taxas bancárias, não cabendo à VALE quaisquer desembolsos adicionais.

3.1.2 A alteração de rubricas de despesas dependerá da prévia e escrita, sendo permitido correio eletrônico, anuência da VALE, que poderá, ou não, autorizar conforme seus critérios internos de financiamento de pesquisa, sem necessidade de Termo Aditivo, salvo na hipótese de alteração do valor do presente instrumento. Na hipótese de aprovação de remanejamento pela VALE, caberá à FUNDAÇÃO anexar a aprovação escrita a prestação de contas referente ao período da aprovação.

3.1.3 Todas as despesas com viagens e material de consumo descritos no Anexo II, deverão vir discriminadas, por despesa, por item, por membro da equipe e por data, no limite e conforme as linhas previstas do previsto no Anexo II, nas prestações de contas parciais e final, além do valor total gasto com cada rubrica no período, dispensada a necessidade de apresentação de comprovantes de despesas.

3.1.4 A FUNDAÇÃO deverá manter em seus arquivos os documentos comprobatórios das despesas com materiais de consumo e viagens, individuais, por item, por despesa e no caso de viagem por membro da equipe e por data, devendo apresentar os comprovantes em até 5 (cinco) dias úteis quando solicitado pela VALE, que poderá glosar a despesa na hipótese de indisponibilidade de documento comprobatório da despesa de forma individualizada.

3.1.5 Para todas as demais rubricas previstas no Anexo II, deverão ser anexados os documentos comprobatórios de despesas nas prestações de contas parciais e final, incluindo-se na hipótese de remanejamentos.

3.1.6 O valor constante da presente cláusula será distribuído pela FUNDAÇÃO entre as INSTITUIÇÕES de acordo com as rubricas e quantias dispostas no Anexo II.

3.2 O valor será desembolsado em 02 (duas) parcelas, conforme previsto no Cronograma de Desembolso constante do Anexo II.

3.3 As parcelas serão desembolsadas pela VALE até o 30° (trigésimo) dia após o recebimento pela VALE da documentação hábil de cobrança, conforme indicação pela VALE.

3.3.1 Os pagamentos da segunda parcela em diante estarão condicionados às entregas e execução das atividades constantes do Anexo II, previstas para o período, bem como da entrega pela FUNDAÇÃO à VALE e aprovação pela VALE da prestação de contas parcial/relatório financeiro previstos para o período.

3.3.2 A não entrega pelas Partes responsáveis devidamente justificada, e/ou a não aprovação pela VALE dos relatórios e demais entregas definidas no Anexo II,também com a devida motivação da não aprovação, incluindo-se as prestações de contas, poderão ensejar a suspensão dos pagamentos pela VALE.

3.3.3 As hipóteses de suspensão de pagamento de que tratam os itens acima não estão sujeitas a qualquer correção ou incidência de encargos de mora durante o período em que a(s) obrigação(ões) que originou(aram) a suspensão permanecer(em) pendente(s) de regularização.

3.4 Na hipótese de saldo igual, ou superior a 31% (trinta e um por cento) do total já repassado pela VALE, oriundo de quaisquer das parcelas anteriores, a VALE poderá abater do valor da parcela subsequente o saldo indicado no Relatório Físico Financeiro/Prestação de Contas Parcial. O repasse futuro do valor abatido, pela VALE, dependerá de apresentação, pelo pesquisador líder, de orçamento que justifique seu repasse, ou de manifestação que indique a sua necessidade, bem como da disponibilidade de orçamento para o período solicitado.

3.5 Eventuais rendimentos financeiros oriundos da aplicação, no mercado financeiro, por força de lei, dos recursos repassados pela VALE deverão ser utilizados direta e exclusivamente nas atividades técnicas-científicas do Projeto, sem incidência de taxas, ficando desde já estabelecido que a utilização dos rendimentos deverá ser previamente aprovada pela VALE e objeto de prestação de contas.

3.6 A FUNDAÇÃO deverá manter registros claros e acessíveis acerca da utilização dos recursos para eventuais consultas solicitadas pela VALE. A VALE poderá auditar os registros, desde que previamente comunicado, com antecedência mínima de 05 (cinco) dias, incluindo-se os documentos comprobatórios de despesas. Os documentos deverão ser mantidos por 5 (cinco) anos pela FUNDAÇÃO.

3.7 Em havendo saldo oriundo da não utilização dos recursos e seus rendimentos, a VALE poderá solicitar a sua devolução, conforme constante da Cláusula 4.1.

3.8 A FUNDAÇÃO deverá apresentar à VALE a prestação de contas final em até 30 (trinta) dias a contar do encerramento do Projeto, incluindo-se nas hipóteses de resolução do presente instrumento previstas na Cláusula Decima Segunda.

3.9 Se por ocasião da avaliação das prestações de contas parcial ou final for identificado pela VALE o uso indevido dos recursos, a VALE poderá solicitar a imediata devolução do valor, não se aplicando o prazo previsto na Cláusula 4.1, j.

3.10 Todas as prestações de contas deverão estar assinadas pelo responsável legal por seu conteúdo na FUNDAÇÃO e/ou nas INSTITUIÇÕES e pelos Pesquisadores Líderes.

CLÁUSULA QUARTA: DAS OBRIGAÇÕES DA FUNDAÇÃO E DAS INSTITUIÇÕES

4.1Além das demais obrigações assumidas no presente Convênio e no Anexo II, caberá à FUNDAÇÃO:

a) Administrar os recursos financeiros necessários à execução do objeto do Convênio, zelando pelo seu melhor aproveitamento.

b) Responsabilizar-se pelo recolhimento de impostos, taxas, contribuições e outros encargos porventura devidos em decorrência das atividades vinculadas a este Convênio, ficando desde já vedado o uso dos recursos repassados pela VALE para tais fins, exceto quando EXPRESSAMENTE previstos no orçamento constante do Anexo II. O descumprimento da presente condição ensejará a devolução dos recursos pela FUNDAÇÃO à VALE.

c) Providenciar os materiais e equipamentos previstos para a realização dos trabalhos, conforme orçamento e Plano de Trabalho definidos no Anexo II.

d) Zelar pela reputação das Partes, não podendo qualquer uma delas utilizar-se do nome, marca ou logomarca das outras, sem prévia e expressa anuência.

e) Manter o Projeto e seus resultados em sigilo e confidenciais, não podendo publicá-los, ou de qualquer forma torná-los públicos, antes da devida proteção conforme descrito na Cláusula Décima Primeira.

f) Cumprir com as demais obrigações estabelecidas no presente instrumento, incluindo-se a obrigação de apresentação de Prestação de Contas.

g) Cumprir todas as leis pertencentes ao ordenamento jurídico brasileiro, em especial as trabalhistas, previdenciárias e tributárias derivadas da relação existente entre si e seus empregados e/ou contratados, durante a execução do Projeto, de forma que não se estabelecerá, em hipótese alguma, vínculo empregatício entre esses empregados, funcionários, servidores ou contratados da FUNDAÇÃO e a VALE ou INSTITUIÇÕES, cabendo à FUNDAÇÃO responsabilidade exclusiva pelos salários e todos os ônus trabalhistas e previdenciários, bem como pelas reclamações trabalhistas ajuizadas, e por quaisquer autos de infração, e ainda, fiscalização do Ministério do Trabalho e da Previdência Social a que a FUNDAÇÃO der causa, com relação a toda mão de obra por ela contratada em decorrência do presente Convênio.

h) Responsabilizar-se por eventuais ações e custas processuais de ações que mover em face de terceiros por ela selecionados para aquisição de equipamentos, ou serviços.

i) Providenciar a documentação necessária ao pagamento das bolsas elencadas no Anexo II, incluindo-se a devida verificação de matrícula do corpo discente, ou docente compatível com a bolsa a ser paga.

j) Restituir à VALE os saldos financeiros remanescentes, pertinentes ao aporte da VALE, inclusive os provenientes das receitas obtidas nas aplicações financeiras realizadas, não utilizados no objeto pactuado, no prazo máximo de 30 (trinta) dias contados da aprovação da prestação de contas pela VALE, sem prejuízo do disposto na cláusula 3.9, ou da denúncia deste Convênio, sendo facultado à VALE destinar estes valores a outro projeto de pesquisa, desenvolvimento e inovação com as INSTITUIÇÕES, desde que celebrado o instrumento jurídico cabível para a destinação e conforme critérios da VALE.

k) Manter, durante toda a execução do Convênio, todas as condições de habilitação e de qualificação exigidas para sua celebração, responsabilizando-se pela boa e integral execução das atividades ora descritas. Quaisquer eventualidades referentes à habilitação que impeçam a manutenção da FUNDAÇÃO como gestora dos recursos deverão ser comunicadas pelas INSTITUIÇÕES e/ou pela FUNDAÇÃO à VALE em até 5 (cinco) dias a contar do conhecimento do impedimento pelas INSTITUIÇÕES e/ou pela FUNDAÇÃO. Caberá as INSTITUIÇÕES indicar nova FUNDAÇÃO de apoio, que será avaliada pela VALE, conforme suas regras internas, em especial de integridade, sendo certo que a contratação de nova FUNDAÇÃO de apoio dependerá de termo aditivo.

l) providenciar, sem ônus para a VALE, o afastamento imediato de qualquer empregado seu e/ou terceiro sob sua responsabilidade, cuja conduta, no local da execução do Projeto, seja, a critério da VALE, incompatível com o ambiente de trabalho nos termos da Política de Direitos Humanos, Política de Segurança da Informação, Política de Diversidade e Inclusão, Código de Ética e Conduta de Fornecedores e Guia de SSMA para Fornecedores VALE (disponível no website www.vale.com), incluindo, mas não se limitando, aos casos de qualquer tipo de discriminação.

m) Aplicar os recursos repassados exclusivamente nas atividades relacionadas à consecução do objeto deste Convênio;

n) Prestar às INSTITUIÇÕES informações sobre os recursos recebidos e a respectiva situação de execução dos projetos aprovados, nos termos deste Convênio.

o) Manter seu credenciamento devidamente válido no Ministério da Educação durante toda a vigência deste Convênio.

4.2 Além das demais obrigações assumidas no presente Convênio no Anexo II, caberá à UFOP:

a) Gerenciar a execução do Projeto zelando para que sejam observados o objeto e as metas estabelecidos no Anexo II.

b) Orientar tecnicamente os trabalhos de pesquisa.

c) Promover a troca de informações com a VALE, conforme as etapas do programa de trabalho, através de reuniões de acompanhamento e/ou relatórios de progresso.

d) Prover a infraestrutura necessária para a execução do Projeto e das atividades previstas no Anexo II.

e) Zelar pela reputação das Partes, não podendo qualquer uma delas utilizar-se do nome, marca ou logomarca das outras, sem prévia e expressa anuência.

f) Manter o Projeto e seus resultados em sigilo e confidenciais, não podendo publicá-los, ou de qualquer forma torná-los públicos, antes da devida proteção e comunicação à VALE, conforme descrito no presente instrumento.

g) Consultar a VALE antes de aceitar qualquer apoio financeiro de qualquer outra fonte de financiamento, privada, pública ou privada associada à pública, para o desenvolvimento do Projeto;

h) Consultar a VALE acerca da participação de colaboradores de outras UFOP, sendo de responsabilidade exclusiva da UFOP a celebração de eventuais instrumentos necessários para a participação de colaboradores de outras UFOP, ou de colaboradores financiados por outras fontes de fomento, devendo ser resguardados, dentre outros, os direitos da VALE quanto à propriedade intelectual, sigilo e confidencialidade previstos no presente instrumento.

i) Responsabilizar-se pela averiguação dos pagamentos de bolsas, pela FUNDAÇÃO, conforme sua política interna de inovação e/ou de bolsas, restando a VALE afastada de quaisquer responsabilidades referentes as

bolsas constantes do Anexo II, além dos pagamentos já previstos no cronograma de desembolso no quadro de bolsas.

j) Receber, desde que previamente informado com antecedência mínima de 15 (quinze) dias, representantes da VALE para visitas técnicas.

k) Estimular o pessoal técnico envolvido na execução do Projeto a participar de reuniões científicas, dentre outros eventos promovidos pela VALE para apresentação do Projeto, seu andamento e resultados.

l) Observar e fazer com que seus servidores e/ou colaboradores sob sua responsabilidade respeitem a legislação aplicável relativa à saúde e segurança e/ou meio ambiente, assim como as normas internas da VALE, informadas à UFOP pelo gestor do Convênio pela VALE, por ocasião do acesso as áreas da VALE.;

m) providenciar, sem ônus para a VALE, o afastamento imediato de qualquer servidor seu e/ou terceiro sob sua responsabilidade, cuja conduta, no local da execução do Projeto, seja, a critério da VALE, incompatível com o ambiente de trabalho nos termos da Política de Direitos Humanos, Política de Segurança da Informação, Política de Diversidade e Inclusão, Código de Ética e Conduta de Fornecedores e Guia de SSMA para Fornecedores VALE (disponível no website www.vale.com), incluindo, mas não se limitando, aos casos de qualquer tipo de discriminação;

n) responsabilizar-se pelos danos que seus servidores e/ou terceiros colaboradores sob sua responsabilidade possam ocasionar nos equipamentos e instalações da VALE;

o) Responsabilizar-se por eventuais autorizações governamentais necessárias à execução do Projeto, em função de seu objeto e natureza, restando afastada qualquer responsabilidade da VALE sobre referidas autorizações e ações, judiciais ou administrativas, consequentes.

4.3 Além das demais obrigações assumidas no presente Convênio e no Anexo II, caberá à UNESP:

a) Gerenciar a execução do Projeto zelando para que sejam observados o objeto e as metas estabelecidos no Anexo II.

b) Orientar tecnicamente os trabalhos de pesquisa.

c) Promover a troca de informações com a VALE, conforme as etapas do programa de trabalho, através de reuniões de acompanhamento e/ou relatórios de progresso.

d) Prover a infraestrutura necessária para a execução do Projeto e das atividades previstas no Anexo II.

e) Zelar pela reputação das Partes, não podendo qualquer uma delas utilizar-se do nome, marca ou logomarca das outras, sem prévia e expressa anuência.

f) Manter o Projeto e seus resultados em sigilo e confidenciais, não podendo publicá-los, ou de qualquer forma torná-los públicos, antes da devida proteção e comunicação à VALE, conforme descrito no presente instrumento.

g) Consultar a VALE antes de aceitar qualquer apoio financeiro de qualquer outra fonte de financiamento, privada, pública ou privada associada à pública, para o desenvolvimento do Projeto;

h) Consultar a VALE acerca da participação de colaboradores de outros campus da UNESP e UFOP, , sendo de responsabilidade exclusiva da UNESP e UFOP a celebração de eventuais instrumentos necessários para a participação de colaboradores de outros campus da UNESP e UFOP, ou de colaboradores financiados por outras fontes de fomento, devendo ser resguardados, dentre outros, os direitos da VALE, UNESP, UFOP e FUNDAÇAO quanto à propriedade intelectual, ao sigilo e confidencialidade previstos no presente instrumento.

i) Responsabilizar-se pela averiguação dos pagamentos de bolsas, pela FUNDAÇÃO, conforme sua política interna de inovação e/ou de bolsas, restando a VALE afastada de quaisquer responsabilidades referentes às bolsas constantes do Anexo II, além dos pagamentos já previstos no cronograma de desembolso no quadro de bolsas.

j) Receber, desde que previamente informado com antecedência mínima de 15 (quinze) dias, e dentro do horário comercial, representantes da VALE para visitas técnicas.

k) Estimular o pessoal técnico envolvido na execução do Projeto a participar de reuniões científicas, dentre outros eventos promovidos pela VALE para apresentação do Projeto, seu andamento e resultados.

l) Observar e fazer com que seus servidores e/ou colaboradores sob sua responsabilidade respeitem a legislação aplicável relativa à saúde e segurança e/ou meio ambiente, assim como as normas internas da VALE, informadas à UNESP pelo gestor do Convênio pela VALE, por ocasião do acesso as áreas da VALE.;

m) providenciar, sem ônus para a VALE, o afastamento imediato de qualquer servidor seu e/ou terceiro sob sua responsabilidade, cuja conduta, no local da execução do Projeto, seja, a critério da VALE e justificado por esta , incompatível com o ambiente de trabalho nos termos da Política de Direitos Humanos, Política de Segurança da Informação, Política de Diversidade e Inclusão, Código de Ética e Conduta de Fornecedores e Guia de SSMA para Fornecedores VALE (disponível no website www.vale.com), incluindo, mas não se limitando, aos casos de qualquer tipo de discriminação;

n) responsabilizar-se pelos comprovados danos que seus servidores e/ou terceiros colaboradores sob sua responsabilidade, exclusivamente possam ocasionar nos equipamentos e instalações da VALE;

o) Responsabilizar-se por eventuais autorizações governamentais necessárias à execução do Projeto, em função de seu objeto e natureza, restando afastada qualquer responsabilidade da VALE sobre referidas autorizações e ações, judiciais ou administrativas, consequentes.

CLÁUSULA QUINTA: DAS OBRIGAÇÕES DA VALE

5.1 Além das demais obrigações assumidas no presente Convênio, caberá à VALE:

a) Acompanhar o desenvolvimento do Projeto;

b) Acompanhar o cronograma de atividades;

c) Fornecer as informações necessárias ao desenvolvimento do Projeto;

d) Efetuar o desembolso financeiro previsto no presente Convênio, na forma definida no Anexo II;

e)Zelar pela reputação das Partes, não podendo qualquer uma delas utilizar-se do nome, marca ou logomarca das outras, sem prévia e expressa anuência;

f) Manter o Projeto e seus resultados em sigilo e confidenciais, não podendo publicá-los, ou de qualquer forma torná-los públicos, antes da devida proteção conforme descrito na Cláusula Décima Primeira.

g) Disponibilizar às INSTITUIÇÕES todas as informações e normas internas da VALE necessárias à execução do Projeto.

h) Observar e fazer com que os colaboradores sob sua responsabilidade respeitem a legislação aplicável relativa à saúde e segurança e/ou meio ambiente.

CLÁUSULA SEXTA: DAS DEMAIS OBRIGAÇÕES DAS PESQUISADORES LÍDERES E DO GESTOR DO CONVÊNIO

6.1 Caberá aos Pesquisadores Líderes e ao Gestor do Convênio, dentro dos respectivos escopos de responsabilidade, a solução e encaminhamento de questões técnicas, administrativas e financeiras que surgirem durante a vigência do presente instrumento, bem como a supervisão e gerenciamento, inclusive financeiro, da execução dos trabalhos.

6.2 Caso a questão encaminhada não seja de competência dos Pesquisadores Líderes, ou do Gestor do Convênio estes deverão indicar o interlocutor competente pelas INSTITUIÇÕES, pela FUNDAÇÃO e pela VALE, respectivamente.

CLÁUSULA SÉTIMA: DA VIGÊNCIA

7.1 O presente Convênio vigorará pelo prazo de 26 (vinte e seis) meses, a partir da data de sua assinatura, ou da última assinatura eletrônica realizada, extinguindo-se após o cumprimento de todas as suas obrigações, sendo certo que a cláusula de Propriedade Intelectual, terá vigência de 20 (vinte) anos e as de confidencialidade pelo prazo de 10 (dez) anos a contar do encerramento do Convênio.

CLÁUSULA OITAVA: DAS PUBLICAÇÕES

8.1 As informações e resultados decorrentes da execução do Projeto poderão ser divulgados pelas INSTITUIÇÕES, desde que previa e expressamente autorizado pela VALE, nos termos dispostos abaixo.

8.2 A VALE deverá receber o resultado a ser publicado e/ou divulgado, incluindo-se teses, dissertações, resumos, manuais, cartilhas, e outras divulgações de qualquer natureza, 60 (sessenta) dias antes da divulgação para análise e eventual proteção dos resultados, conforme definido na Cláusula Décima Primeira. Caberá às INSTITUIÇÕES/Pesquisadores Líderes a submissão previa do resultado à VALE.

8.2.1 A VALE terá 20 (dez) dias úteis, a contar da data de recebimento do material, para dar um parecer por escrito concordando ou discordando do pedido. Caso haja discordância a VALE terá que submeter, dentro desse tempo, justificativa por escrito solicitando uma prorrogação de tempo junto às INSTITUIÇÕES/Pesquisadores Líderes deixando explicito o prazo máximo de que necessita.

8.3 O uso de marcas (mistas, ou nominativas) da VALE e da menção de apoio ao Projeto, ou da origem dos materiais estudados, ou da localização das pesquisas em áreas da VALE, em publicações/divulgações de qualquer natureza, dependerá de prévia e escrita autorização da VALE.

8.4 Toda e qualquer divulgação/publicação relativa aos resultados do Projeto poderá fazer menção do apoio da VALE, sendo certo que toda divulgação deverá ser previamente e expressamente autorizado pela VALE.

CLÁUSULA NONA: DA CONFIDENCIALIDADE

9.1 As Partes comprometem-se a manter sigilo e confidencialidade, durante e após a vigência deste Convênio de todas e quaisquer informações técnicas, comerciais, operacionais, estratégicas e financeiras e dos assuntos de caráter confidencial postos à disposição das Partes em decorrência execução deste Convênio.

9.2 Será considerada Informação Confidencial, mas não limitada, qualquer informação oral ou escrita, pertencente a uma das Partes e que esteja direta ou indiretamente relacionada com estudos de viabilidade, protótipos, amostras, informações técnicas, comerciais, procedimentos de produção, processos, know-how, patentes, pedidos de patentes, métodos, desenhos, propriedade intelectual, softwares, especificações, relatórios, plano estratégico de negócios, especificações, dados, segredos de negócio e de indústria, que sejam identificados e sinalizados com “INFORMAÇÃO CONFIDENCIAL”.

9.3 Não estão incluídas nas Informações Confidenciais aquelas que:

(i) estejam ou se tornem disponíveis ao público por outros motivos que não a divulgação pelas Partes e antes da assinatura deste Convênio;

(ii) já estejam em poder de uma das Partes antes de ser formalmente recebida da outra Parte e, a qual a parte que já detém as informações deverá notificar a outra parte sobre tais conhecimentos;

(iii) já forem, no momento da revelação, de conhecimento da Parte receptora e não tenham sido reveladas, pelas Partes;

(iv) a revelação for exigida por ordem judicial transitada em julgado (e neste caso somente após aviso por escrito com antecedência mínima de 02 (dois) dias úteis.

a. No caso da hipótese tratada no subitem (iv) do item 9.3., a Parte receptora se limitará a divulgar apenas as informações que estritamente constituírem o objeto das referidas determinações.

b. A despeito da divulgação objeto do subitem (iv) do item 9.3., as Informações Confidenciais conservarão seu caráter, assim como as obrigações das Partes na preservação do sigilo em relação a terceiros que não as autoridades públicas requisitantes.

9.4 Sem prejuízo de eventual indenização cabível à Parte prejudicada, o descumprimento da obrigação de confidencialidade acarretará a rescisão do presente Convênio.

9.5 As Partes são responsáveis por seus agentes, empregados e profissionais contratados caso haja quebra da obrigação de confidencialidade, devendo a Parte infringente ressarcir a(s) outra(s) Parte(s) pelos danos causados em razão da quebra de confidencialidade

9.6 Fica resguardado o direito da VALE acerca do sigilo de informações referentes aos materiais coletados em suas áreas e dados a eles associados, sendo certo que qualquer divulgação dependerá de prévia e expressa autorização pela VALE, conforme previsto na cláusula oitava.

CLÁUSULA DÉCIMA: DA INFRAÇÃO DE DIREITOS DE PROPRIEDADE INDUSTRIAL E INTELECTUAL

10.1Os direitos de terceiros protegidos pela legislação de propriedade industrial ou de direito autoral sobre materiais, máquinas, equipamentos, sistemas, dispositivos, processos, desenhos, modelos, marcas e patentes deverão ser respeitados pelas Partes.

10.2Caberá à Parte que não observar o procedimento supra, responder pela infração dos direitos de terceiros, correndo por sua conta o pagamento de quaisquer ônus, comissões, indenizações e quaisquer outras despesas decorrentes da referida infração.

CLÁUSULA DÉCIMA-PRIMEIRA: DOS DIREITOS DE PROPRIEDADE INDUSTRIAL E INTELECTUAL E EXPLORAÇÃO DOS RESULTADOS

11. 1 Cada Parte continuará sendo proprietária exclusiva das informações privilegiáveis, técnicas e tecnológicas, que já tenham sido desenvolvidas ou adquiridas antes da assinatura do presente Convênio, incluindo, mas não se limitando às patentes BR112014005488-6 para "Processo para a preparação de pelotas de minério, produto aglomerado, e, uso de nanotubos de carbono", concedida em 06.03.2019; e BR102019023195-5 para "Processo de produção de aglomerado de finos de minério de ferro e o produto aglomerado", concedida em 19.01.2021; e pedidos de patente BR102022006033-9 para "Processo de produção de aglomerado contendo biomassa, e o produto aglomerado" depositado em 30.03.2022 e BR 102023000265- 0 para "Processo de produção de aglomerado de minério de ferro para uso em reatores de redução direta e o produto aglomerado" depositado em 06.01.2023, todas de titularidade da **VALE**, e que tenham sido reveladas à outra Parte por força de sua execução.

11.2 É obrigação dos **Pesquisadores Líderes** do Projeto e das **INSTITUIÇÕES** comunicarem à **VALE** acerca dos resultados obtidos por meio da execução do Projeto por ocasião da entrega dos Relatórios Científicos, bem como a comunicação a qualquer momento de resultados que estes entenderem passíveis de proteção e do disposto na Cláusula Oitava, independente do período de entrega dos Relatórios Científicos.

11.2.1 Não obstante o disposto na cláusula anterior, a **VALE**, sempre que entender necessário, poderá solicitar às **INSTITUIÇÕES** e/ou aos **Pesquisadores Líderes** do Projeto, relatórios parciais para verificar e acompanhar o desenvolvimento da execução do Projeto.

11.3 Para os fins do presente Convênio, entende-se como Propriedade Intelectual todo e qualquer direito, decorrente de ou associado a (i) patentes de invenção ou de modelo de utilidade, incluindo pedidos de patentes, (ii) informações de tecnologia relacionadas a know-how ou qualquer outra informação técnica ou de processo, (iii) direitos autorais incluindo programa de computador (software), protegido ou não e (iv) todas as outras propriedades intelectuais ou industriais e direitos de propriedade.

11.4 A**VALE** será a única titular dos resultados oriundos da execução do Projeto, independentemente de serem passíveis de proteção por meio das formas previstas na legislação nacional e/ou internacional de Propriedade Intelectual.

11.4.1 Caberá somente à VALE efetuar o depósito do(s) pedido(s) de registro juntos aos órgãos competentes, obrigando-se a promover a menção de todos os inventores envolvidos no desenvolvimento da Propriedade Intelectual, conforme indicado pelas **INSTITUIÇÕES**.

11.4.2 A Propriedade Intelectual resultante do desenvolvimento do Projeto será de propriedade única e exclusiva da **VALE**, conforme possibilidade prevista no art. 9º, §3º da Lei 10.973/04, mediante pagamento

de compensação financeira pela **VALE** às **INSTITUIÇÕES** em decorrência de sua contribuição no desenvolvimento da Propriedade Intelectual, correspondente às seguintes proporções: **50% (cinquenta por cento) para a UNESP e 50% (cinquenta por cento) para a UFOP**.

11.4.3 A definição e o pagamento da compensação pela **VALE** às **INSTITUIÇÕES** deverão ser acordados em instrumento jurídico próprio e observará o limite total de até 100% (cem por cento) do valor da contrapartida financeira da **VALE** constante do presente Convênio e futuros aditivos, bem como de análise de critérios a serem estabelecidos pelas Partes, podendo inclusive incluir critérios de compensação não financeira, caso seja da vontade das Partes.

11.4.2.1 As **INSTITUIÇÕES** deverão acordar entre si, sem quaisquer ônus, ou responsabilidades para a **VALE** a forma de compartilhamento da compensação financeira definida na cláusula 11.4.2.

11.4.4 Para que a **VALE** possa realizar o repasse do valor indicado no item anterior, os resultados oriundos da execução do Projeto deverão atender aos seguintes critérios, a ser estabelecido em instrumento específico:

1. Será efetuado o pagamento de uma 1ª (primeira) parcela relativo a 90% (noventa por cento) do valor informado no item 11.4.2 caso a **VALE** entenda que os resultados do Projeto são passíveis de proteção por algum direito de propriedade industrial e ocorra o efetivo protocolo em escritório oficial de proteção dos direitos de Propriedade Intelectual, como, por exemplo, proteção por meio de patente perante o Instituto Nacional da Propriedade Industrial – INPI.

2. Será efetuado o pagamento de uma 2ª (segunda) parcela relativo a 5% (cinco por cento) do valor informado no item 11.4.2 caso a **VALE A** inicie o uso (comercial ou não) dos resultados do Projeto em um prazo de até 2 (dois) anos do término do presente Convênio.

3. Será efetuado o pagamento de uma 3ª (terceira) parcela relativo a 5% (cinco por cento) do valor informado no item 11.4.2 caso o resultado protegido por meio de patente seja concedido pelo INPI.

11.4.5 A **VALE** deverá notificar em até 20 (vinte) dias corridos após a publicação do INPI, por simples comunicação as **INSTITUIÇÕES** sobre o atendimento dos critérios estabelecidos nos itens acima, assim que eles forem cumpridos, para que os respectivos pagamentos das parcelas mencionadas sejam realizados para as **INSTITUIÇÕES**.

11.4.6 A **VALE** poderá se reservar o direito de não efetuar o pagamento da compensação, conforme seus critérios e estratégias internas. Nessa hipótese, não será permitido o uso interno pela **VALE**, suas coligadas, afiliadas e controladas e deverá ser realizado novo ajuste entre a **VALE** e as **INSTITUIÇÕES** para a definição de nova estratégia conjunta de propriedade intelectual, uso dos resultados, incluindo-se a possiblidade de compartilhamento da titularidade, caso seja de vontade de ambas.

11.4.7 O instrumento jurídico mencionado no item 11.4.2 deverá ser concluído e assinado pelas **INSTITUIÇÕES** e pela **VALE** em até 180 (cento e oitenta) dias da comunicação feita pela **VALE**, conforme indicado no item 11.4.4 sobre o atendimento dos critérios, ocasião em que será confirmado o interesse da **VALE** acerca da titularidade exclusiva dos resultados do Projeto.

11.5 Fica desde já estabelecido que caso necessário, a **VALE** estará autorizada a efetuar a proteção dos resultados decorrentes da execução do Projeto mesmo antes da assinatura do instrumento jurídico mencionado no item 11.4.2 e/ou antes do repasse da compensação às **INSTITUIÇÕES**, a fim de resguardar os critérios de patenteabilidade dos resultados.

11.5.1 Sempre que necessário, as **INSTITUIÇÕES** se comprometem a solicitar a assinatura dos documentos de eventuais pesquisadores vinculados a ela e que sejam nomeados inventores que forem exigidos para a proteção dos resultados em âmbito nacional e/ou internacional, no prazo máximo de 45 (quarenta e cinco) dias a contar da data de solicitação por escrito por parte da **VALE**.

11.6 Caso a **VALE** conforme seus critérios e estratégias internas decida não efetuar o pagamento da compensação, a titularidade do resultado poderá ser compartilhada com as **INSTITUIÇÕES** se for de seu interesse, ocasião em que a **VALE** se compromete a incluir as **INSTITUIÇÕES** como cotitulares do resultado, às suas custas.

11.7 Será liberado o uso interno pelas **INSTITUIÇÕES** e pela **VALE** em suas atividades de qualquer natureza, sem remuneração, do *know-how*, informações, dados e demais produtos e/ou resultados não registrados, derivados exclusivamente da execução do Projeto, incluindo-se o uso sem remuneração por coligadas, controladas e afiliadas da **VALE**. O uso aqui deverá levar em consideração a eventual necessidade de manutenção de sigilo das informações.

11.7.1 O pagamento da compensação financeira pela **VALE** implicará, também, na transferência de *know-how* pelo Pesquisador Líder para a **VALE,** para o efetivo e bom uso do resultado a ser protegido pela **VALE**.

11.7.2 O pagamento da compensação financeira pela **VALE** englobará também no apoio do Pesquisador Líder e/ou outro Pesquisador indicado pelas **INSTITUIÇÕES**, quanto ao esclarecimento de dúvidas em relação à eventuais exigências a serem emitidas pelos escritórios oficiais de proteção dos direitos de Propriedade Intelectual.

11.8 Salvo conforme previsto no inciso II, do art. 43, da Lei 9.279/96, os aperfeiçoamentos introduzidos nos resultados após a vigência do presente Convênio poderão ser realizados mediante autorização prévia da **VALE**, sem que caiba qualquer remuneração pela revelação do respectivo aperfeiçoamento, ou adições a direitos de propriedade intelectual já protegidos pela **VALE**, ficando assegurada a titularidade da **VALE** sobre os direitos de propriedade intelectual porventura gerados com a inovação.

11.9 Caberá às **INSTITUIÇÕES** compartilhar com os criadores da propriedade intelectual os rendimentos, "royalties" ou quaisquer outros ganhos econômicos que decorram dos resultados do presente Projeto, conforme normas internas das **INSTITUIÇÕES** e o estabelecido na legislação aplicável.

11.10 Na hipótese de derivações futuras sobre "software", registrado, ou não, realizadas de forma independente pelas Partes, sem o uso de dados, recursos e informações dos negócios da outra Parte, a **VALE** e as **INSTITUIÇÕES** já se comprometem, mutuamente, a tratá-las conforme estabelecido no artigo 5º, da Lei 9.609/98, autorizando uma à outra a realizar derivações sem quaisquer ônus futuros, pertencendo os direitos sobre as derivações a quem as fizer, incluindo-se sua exploração econômica, ressalvado o disposto na cláusula 11.1.

11.11 Se a **VALE** optar pela proteção dos resultados do Projeto por meio de segredo industrial, as Partes deverão assinar novo e específico acordo de sigilo e confidencialidade, envolvendo todos os participantes do Projeto.

11.11.1 No caso de a **VALE** decidir que os resultados do Projeto serão realizados por meio de segredo industrial, as Partes deverão negociar em um instrumento jurídico específico a forma de compensação e pagamento para as **INSTITUIÇÕES**, observando o limite de até 100% (cem por cento) do valor da contrapartida financeira da **VALE** constante do presente ACORDO e futuros aditivos.

CLÁUSULA DÉCIMA SEGUNDA – DA RESOLUÇÃO

12.1. Sem prejuízo da satisfação de seus demais direitos, qualquer das Partes poderá resolver este Convênio mediante comunicação por escrito à outra Parte, sem que caiba qualquer reclamação, indenização ou compensação em benefício da Parte que recebe o comunicado de resolução, nos seguintes casos:

(i) pedido ou decretação de falência ou recuperação judicial ou extrajudicial da outra Parte;

(ii)observado o disposto na Cláusula Décima Terceira, ocorrência de caso fortuito ou de força maior regularmente comprovada, que venha paralisar a execução do Projeto por mais de 60 (sessenta) dias.

(iii)fraude ou dolo, devidamente comprovados cometidos pela outra Parte de forma relacionada ao cumprimento de suas obrigações contratuais.

12.2. Sem prejuízo da satisfação de seus demais direitos, a VALE poderá, a seu exclusivo critério, resolver este Convênio, mediante prévia e expressa comunicação às demais Partes, com antecedência mínima de 30 (trinta) dias, sem que caiba às demais Partes o direito a qualquer reclamação, indenização ou compensação, seja a que título for, nos seguintes casos:

(i) descumprimento de qualquer das obrigações do Comprovada pelas demais Partes (isoladamente ou em conjunto) que deixe de ser sanado no prazo de 30 (trinta) dias após o recebimento de notificação da VALE neste sentido;

(ii)cessão, subcontratação e/ou transferência parcial ou total para terceiros das obrigações assumidas, ou dos créditos decorrentes deste Comprovada, sem prévia e expressa autorização da VALE.

(iii)descumprimento da cláusula anticorrupção e sanções pelas INSTITUIÇÕES e/ou pela FUNDAÇÃO.

(iv)Na hipótese de suspensão da habilitação e qualificação da FUNDAÇÃO a operar como gestora dos recursos.

(v)Na hipótese de descumprimento da cláusula 8.2 pelas INSTITUIÇÕES, ou quaisquer pesquisadores de seus quadros.

12.2.1 Fica certo e ajustado que a adoção pelas INSTITUIÇÕES de mão-de-obra escrava e/ou infantil ou de quaisquer outras condições de trabalho que atentem contra a dignidade humana ensejará a resolução deste Convênio por motivo atribuível às INSTITUIÇÕES, mediante notificação prévia pela VALE com efeito imediato, sem prejuízo da denúncia às autoridades competentes e de todos os demais remédios legais e contratuais cabíveis.

12.2.2 Fica certo e ajustado que o descumprimento material da legislação aplicável relativa à saúde e segurança do trabalho ou meio ambiente, em especial as normas internas da VALE, bem como as licenças ambientais aplicáveis e suas condicionantes ensejará a resolução deste Convênio por motivo comprovadamente atribuível às INSTITUIÇÕES, mediante notificação prévia pela VALE com efeito imediato, sem prejuízo de todos os demais remédios legais e contratuais cabíveis.

12.3 Sem prejuízo da satisfação de seus demais direitos, qualquer das partes poderá, resolver este Convênio, mediante prévia e expressa comunicação à Parte, com efeito imediato, sem que caiba o direito a qualquer reclamação, indenização ou compensação em razão da resolução, seja a qualquer título for, no caso de:

(i)fraude ou dolo cometidos de forma relacionada ao cumprimento de suas obrigações contratuais;

(ii)utilização de mão de obra escrava ou infantil ou de quaisquer outras condições de trabalho que atentem contra a dignidade humana;

(iii)descumprimento material da legislação aplicável relativa à saúde e segurança do trabalho ou meio ambiente, bem como as licenças ambientais aplicáveis e suas condicionantes;

(iv)violação de propriedade intelectual e confidencialidade;

(v)violação ao disposto na clausula de proteção de dados pessoais; e/ou

(vi)violação ao disposto nas cláusulas de anticorrupção e sanções.

12.4 Na hipótese de resolução, ou distrato, do presente instrumento, a VALE não poderá ser responsabilizada pelo pagamento de eventuais parcelas subsequentes, ou de assumir quaisquer responsabilidades perante terceiros.

12.5 Em quaisquer das hipóteses acima, deverá ser emitido pelas INSTITUIÇÕES um relatório final de atividades, bem como a prestação de contas final, observadas as disposições de devolução de saldo presentes neste Convênio.

CLÁUSULA DÉCIMA-TERCEIRA – CASO FORTUITO E FORÇA MAIOR

13.1. Nenhuma das Partes será responsável por descumprimento de suas obrigações contratuais em consequência de caso fortuito ou força maior, até que o impacto de tal evento cesse. A expressão caso fortuito e/ou força maior conforme usada neste Convênio significa, com relação a qualquer Parte, eventos ou circunstâncias excepcionais que:

(i) estejam fora do controle razoável dessa Parte e afetem substancialmente o cumprimento de suas obrigações contratuais; e

(ii) essa Parte não poderia, de forma razoável, ter se preparado, prevenido, evitado ou superado tais eventos ou circunstâncias antes de celebrar o Convênio; e

(iii) tais eventos ou circunstâncias não resultem de uma falha dessa Parte de cumprir com suas obrigações contratuais.

13.2. Constatada a ocorrência de caso fortuito e/ou de força maior, ficarão suspensas, enquanto essa perdurar, as obrigações que as Partes ficarem impedidas de cumprir.

13.3. Se um evento de caso fortuito e/ou força maior ocorrer a qualquer tempo durante a vigência deste Convênio, a Parte que ficar impossibilitada deverá adotar os seguintes procedimentos:

(i)notificar a outra Parte sobre a ocorrência do evento o mais breve possível e, de qualquer forma, dentro de 2 (dois) dias úteis em que tenha tomado ciência do mesmo, apresentando, quando possível, uma estimativa da duração e os possíveis efeitos do evento de caso fortuito e/ou força maior com relação ao cumprimento de suas obrigações neste Convênio .

(ii)adotar todas as medidas possíveis para remediar ou mitigar as consequências do referido evento de caso fortuito e/ou força maior, com o objetivo principal de retomar o cumprimento de suas obrigações o mais rápido possível;

(iii)notificar imediatamente e por escrito a outra Parte sobre o término ou suspensão do evento de caso fortuito e/ou força maior.

13.4. Um evento de caso fortuito e/ou força maior não deverá desonerar a Parte que ficar impossibilitada com relação às obrigações e inadimplementos ocorridos anteriormente ao evento e anteriormente ao recebimento pela Parte não afetada da notificação mencionada na Cláusula 13.3 (i) acima.

13.5 As Partes somente poderão pleitear extensão dos marcos contratuais e/ou prazo previsto neste Convênio na mesma extensão do evento de caso fortuito e/ou força maior, caso a Parte tenha cumprido com todas as suas obrigações contratuais antes do referido evento.

13.6. A ocorrência de um evento de caso fortuito e/ou força maior não permite qualquer reivindicação por compensação ou alteração do valor do Projeto.

13.7 Fica desde já certo e ajustado que escassez no mercado, condições climáticas peculiares do local onde será executado o Projeto, greves promovidas pelos empregados das Partes, de seus subcontratados ou de terceiros trabalhando sob sua responsabilidade ou supervisão, não serão consideradas caso fortuito e/ou força maior para os fins deste Convênio.

CLÁUSULA DÉCIMA-QUARTA – DA PROTEÇÃO DE DADOS PESSOAIS

14.1 As Partes reconhecem que, para cumprirem suas obrigações legais e/ou contratuais, as demais Partes eventualmente terão que efetuar o Tratamento de Dados Pessoais dos Titulares de Dados dos colaboradores, prestadores de serviços e/ou terceiros contratados pelas Partes. Em tal hipótese, as Partes declaram e garantem que:

(a)cumprirão a LGPD e todas as demais Leis Aplicáveis, bem como atenderão os padrões aplicáveis em seu segmento em relação ao Tratamento de Dados Pessoais;

(b)possuem todos os direitos, consentimentos e/ou autorizações necessários exigidos pela LGPD, e demais Leis Aplicáveis, para divulgar, compartilhar e/ou autorizar o Tratamento dos Dados Pessoais às outras Partes e permitir que as demais Partes realizem o Tratamento dos Dados Pessoais para o cumprimento de suas obrigações contratuais e/ou legais;

(c)informarão e instruirão os seus colaboradores, prestadores de serviços e/ou terceiros sobre o Tratamento dos Dados Pessoais pelas Partes ou terceiros, observando todas as condições desse Convênio, inclusive na hipótese de os Titulares de Dados terem acesso direto a qualquer sistema (on-line ou não) das Partes para preenchimento de informações que possam conter os Dados Pessoais;

(d)serão responsáveis pelo fornecimento de informações sobre privacidade através dos meios aplicáveis, incluindo, sem limitação, através de política ou aviso de privacidade contendo todas as informações exigidas pelas Leis Aplicáveis aos Titulares dos Dados;

(e)serão responsáveis por garantir que todos os Dados Pessoais sujeitos ao Tratamento pelas Partes estejam corretos e atualizados;

(f)serão responsáveis por assegurar que todas as instruções transmitidas às Partes em relação aos Dados Pessoais estarão de acordo com as Leis Aplicáveis, isentando as demais Partes de qualquer responsabilidade;

(g)não fornecerão ou compartilharão, em qualquer hipótese, Dados Pessoais Sensíveis de seus colaboradores, prestadores de serviços e/ou terceiros, salvo se expressamente solicitado pelas Partes, caso o objeto do Convênio justifique o recebimento de tais Dados Pessoais Sensíveis, estritamente para fins de atendimento de legislação aplicável;

(h)notificarão, imediatamente as demais Partes, sobre o protesto ou pedido de acesso, por qualquer pessoa e/ou autoridade governamental, aos Dados Pessoais recebidos; e

(i)informarão às demais Partes sobre qualquer incidente de segurança em até 48 (quarenta e oito) horas, contadas do momento em que tomou conhecimento, por quaisquer meios, do respectivo incidente.

14.2 Em decorrência das obrigações previstas no presente instrumento, incluindo seus anexos, as Partes poderão realizar o Tratamento de Dados Pessoais disponibilizados pelas demais partes. Em tal hipótese, as Partes declaram e garantem que:

(a)realizarão o Tratamento dos Dados Pessoais estritamente de acordo com as instruções das Partes, se for o caso;

(b)irão alterar, corrigir, apagar, dar acesso, anonimizar ou realizar a portabilidade para terceiros de Dados Pessoais mediante solicitação das Partes e garantirão que todos os Dados Pessoais que forem objeto de Tratamento sejam precisos e atualizados;

(c)colaborarão com as Partes, mediante solicitação destas, no cumprimento de suas obrigações, de responder a solicitações e reivindicações feitas às Partes por pessoa e/ou autoridade governamental, a respeito de Dados Pessoais cujo Tratamento seja realizado pela Parte;

(d)a critério da Parte, cooperará e ajudará às demais partes, na condução de uma avaliação de impacto na proteção de dados e consultas relacionadas a qualquer autoridade competente, para garantir o Tratamento seguro de Dados Pessoais;

(e)abster-se-ão de conservar Dados Pessoais que excedam as finalidades previstas neste instrumento e seus anexos, de tempos em tempos;

(f)excluirão, de forma irreversível, os Dados Pessoais retidos em seus registros, mediante solicitação das Partes a qualquer momento, salvo conforme determinado por lei ou ordem judicial;

(g)fornecerão todo e qualquer documento, quando solicitado pelas Partes, que demonstre conformidade com as Leis Aplicáveis; e

(h)tomarão medidas razoáveis para assegurar a confiabilidade dos seus colaboradores, diretores, prepostos ou contratados que poderão ter acesso, ou serem envolvidos, no Tratamento dos Dados Pessoais, garantindo a privacidade dos Dados Pessoais e mantendo um controle rigoroso sobre o acesso aos Dados Pessoais.

14.2.1 As Partes implementarão medidas de segurança substancialmente de acordo com os padrões aplicáveis na indústria, projetados para garantir a segurança, confidencialidade e integridade dos Dados Pessoais e protegê-los contra divulgação ou acesso não autorizado aos Dados Pessoais, bem como de situações acidentais ou ilícitas de destruição, perda, alteração, comunicação ou qualquer forma de Tratamento inadequado ou ilícito, incluindo a implantação de medidas administrativas, técnicas e organizacionais apropriadas à cada categoria de Dados Pessoais cujo Tratamento será realizado, tais como, criptografia e anonimização dos Dados Pessoais, quando apropriado.

14.2.2 Mediante solicitação das Partes, ou em caso de rescisão, expiração ou término contratual, por qualquer motivo, as Partes: (a) cessarão o Tratamento, inclusive qualquer uso dos Dados Pessoais; e (b)

devolverão às Partes ou destruirão (a critério da Parte) todos os Dados Pessoais e todas as cópias destes, devendo certificar tal destruição por escrito, exceto se a Parte for obrigada a manter cópia de determinados Dados Pessoais estritamente em virtude de lei.

14.2.3 As Partes não poderão subcontratar nem delegar o Tratamento dos Dados Pessoais sem o consentimento prévio por escrito das demais Partes. Caso as demais Partes autorizem a subcontratação, a Parte será responsável pelos atos e omissões de seus subcontratados e de qualquer outra pessoa a quem o Tratamento dos Dados Pessoais ou o cumprimento de suas obrigações contratuais tiver sido delegado. As Partes deverão impor obrigações contratuais a seus subcontratados que sejam no mínimo comparáveis às obrigações impostas à própria Parte nos termos previsto neste instrumento.

14.3 Para os fins dessa cláusula, aplicam-se as seguintes definições:

“Dados Pessoais” significam as informações relacionadas a pessoa natural identificada ou identificável.

“Dados Pessoais Sensíveis” significam as informações relacionadas a origem racial ou étnica, convicção religiosa, opinião política, filiação a sindicato ou a organização de caráter religioso, filosófico ou político, referente à saúde ou à vida sexual, dado genético ou biométrico, quando vinculados a uma pessoa natural.

“LGPD” significa a Lei nº 13.709/2018.

“Leis Aplicáveis” significa todas as leis, regras, regulamentos, ordens, decretos, orientações normativas e auto-regulamentações aplicáveis à proteção de dados, incluindo, sem limitação, a LGPD.

“Titulares dos Dados” significam as pessoas físicas a quem se referem os Dados Pessoais que são objeto de Tratamento, nos termos do presente instrumento.

“Tratamento” significa toda operação realizada com Dados Pessoais, incluindo a coleta, produção, recepção, classificação, utilização, acesso, reprodução, transmissão, distribuição, processamento, arquivamento, armazenamento, eliminação, avaliação ou controle da informação, modificação, comunicação, transferência, difusão ou extração.

CLÁUSULA DÉCIMA-QUINTA: DISPOSIÇÕES GERAIS

15.1 As notificações, comunicações ou informações entre as Partes deverão ser feitas por escrito e dirigidas ao endereço indicado no preâmbulo, a menos que outro tenha sido indicado, por escrito, mediante aviso prévio com antecedência mínima de 10 (dez) dias.

15.2 O não exercício, pelas Partes, de quaisquer dos direitos ou prerrogativas previstos neste Convênio , ou mesmo na legislação aplicável, será tido como ato de mera liberalidade, não constituindo alteração ou novação das obrigações ora estabelecidas, cujo cumprimento poderá ser exigido a qualquer tempo, independentemente de comunicação prévia à Parte.

15.3 Este Convênio só poderá ser alterado, incluindo-se eventual prorrogação, em quaisquer de suas disposições, mediante a celebração por escrito de Termo Aditivo, salvo as alterações que expressamente dispensarem a necessidade de Termo Aditivo.

15.4 Os casos omissos deste Convênio serão solucionados mediante entendimento entre os contratantes e, se necessário, formalizados através de Termo Aditivo.

15.5 As Partes em todas as suas atividades relacionadas a este Convênio e em nome uma da outra cumprirão, a todo tempo, com todos os regulamentos e as leis antissuborno, leis anticorrupção, leis sobre conflito de interesses ou outras leis, normas ou regulamentos aplicáveis com finalidade e efeitos semelhantes e assegurará que nenhum de seus funcionários, administradores, diretores ou agentes irá oferecer, pagar ou fornecer (ou autorizar o pagamento ou fornecimento), direta ou indiretamente, dinheiro ou qualquer coisa de valor a qualquer: (a) pessoa que trabalhe ou exerça um cargo em órgão público ou em empresa controlada direta ou indiretamente por um governo, seja ele nacional ou estrangeiro, ainda que de forma transitória ou sem remuneração; (b) empregado, diretor, representante ou qualquer pessoa agindo com capacidade oficial por ou em nome de uma entidade Governamental, assim entendida como qualquer organismo supranacional, governo nacional, estadual, municipal ou local (incluindo qualquer tribunal, agência administrativa ou comissão ou outra Autoridade Governamental), ou qualquer tribunal arbitral ou

órgão paraestatal ou privado que exerça autoridade regulatória, judicial ou administrativa; (c) membro de assembleia ou comitê ou empregado envolvido no cumprimento do dever público conforme as leis e os regulamentos aplicáveis, independentemente de ter sido eleito ou nomeado, tal como vereador, deputado (federal ou estadual) ou senador; (d) funcionário do Legislativo, do Executivo ou do Judiciário, independentemente de ter sido eleito ou nomeado, tal como secretário municipal ou estadual, ministro de governo, ministro de tribunais superiores, juiz, desembargador, promotor, defensor, procurador, advogado geral da União, prefeito ou governador; (e) funcionário ou pessoa que detenha cargo em partido político; (f) candidato a cargo político; (g) pessoa que detenha qualquer outro cargo oficial, cerimonial ou que seja nomeada ou tenha herdado cargo em governo ou em qualquer de suas agências; (h) diretor ou empregado de organização internacional (incluindo, porém sem a esses se limitar, o Banco Mundial, as Nações Unidas, o Fundo Monetário Internacional e a Organização para a Cooperação e Desenvolvimento Econômico – OCDE); (i) pessoa que seja ou alegue ser intermediária atuando em nome de um Funcionário de Governo; (j) pessoa que, ainda que não seja um Funcionário de Governo, seja equiparada a tal em virtude de lei aplicável; ou (k) funcionário de empresa estatal ou de economia mista, com o intuito de:

(i)influenciar qualquer ato ou decisão de tal pessoa em sua capacidade oficial;

(ii) induzir tal pessoa a agir (seja por ação ou omissão) em violação de seu dever legal;

(iii) obter qualquer vantagem indevida; ou

(iv) induzir tal pessoa a usar a sua influência para afetar ou influenciar qualquer ato ou decisão de uma Autoridade Governamental;

a fim de auxiliar as INSTITUIÇÕES, a FUNDAÇÃO ou a VALE a obter ou reter negócios com, ou a canalizar negócios para, qualquer pessoa.

15.6 Se quaisquer das disposições do presente Convênio forem consideradas, parcialmente ou totalmente, nulas, inválidas ou inexequíveis, tais disposições não afetarão as demais disposições ou Cláusulas deste instrumento.

15. 7É vedada às INSTITUIÇÕES a subcontratação ou cessão, total ou parcial, dos direitos e obrigações decorrentes deste Convênio , sem a prévia e expressa autorização da VALE, ficando a VALE desde já autorizada a ceder ou transferir, no todo ou em parte, para empresas do mesmo grupo sem a prévia e expressa anuência das INSTITUIÇÕES. No entanto, tal modificação de titularidade deverá ser consignada por meio de termo de aditamento ao presente instrumento devidamente assinado pelas Partes.

15.8 A subcontratação ou cessão autorizada pela VALE não afasta nem dilui a responsabilidade das INSTITUIÇÕES pelo integral cumprimento de todas as obrigações assumidas neste Convênio , mantendo às INSTITUIÇÕES a total responsabilidade perante a VALE pelos atos e omissões de terceiros em decorrência da subcontratação ou cessão.

15.9 A contratação ora ajustada não tem caráter exclusivo e não estabelece vínculo empregatício entre as Partes ou qualquer relação de subordinação pessoal entre seus administradores, empregados, bolsistas, prepostos e/ou terceiros sob a responsabilidade das Partes.

15.10 As Partes comprometem-se a manter todos os seus empregados devidamente registrados conforme estabelece a legislação em vigor, obrigando-se, ainda, a manter em dia todas as obrigações legais pertinentes às atividades desenvolvidas por seus empregados, especialmente de natureza trabalhista e previdenciária, incluindo, mas não se limitando, a não utilização de mão de obra infantil e/ou análoga a de escravo.

15.11 O presente Convênio substitui todos os entendimentos anteriores havidos entre as Partes com relação ao ora pactuado, tenham sido escritos ou verbais.

15.12 Após o encerramento do Projeto, os bens materiais permanentes previstos no Anexo II, serão patrimoniados em nome das INSTITUIÇÕES, por meio de processo específico entre a FUNDAÇÃO e as INSTITUIÇÕES.

15.13 Eventuais alterações nas resoluções e demais normas internas das INSTITUIÇÕES que impactem o presente Convênio deverão ser comunicadas à VALE pelas INSTITUIÇÕES, podendo as Partes alterar o presente ajuste para a devida adequação, desde que em comum acordo.

15.15 Caso qualquer uma das declarações e garantias anteriores seja violada pelas INSTITUIÇÕES/FUNDAÇÃO, a VALE poderá, além de qualquer outro remédio previsto em lei ou no Convênio, suspender imediatamente a execução ou rescindir este Convênio, sem qualquer responsabilidade e as INSTITUIÇÕES/FUNDAÇÃO deverão indenizar e isentar a VALE de todos os custos e comprovados danos decorrentes ou relacionados a tal violação.

15.15 As INSTITUIÇÕES/FUNDAÇÃO reconhecem que o tema do Projeto pode ser objeto de parcerias de pesquisa, desenvolvimento e inovação entre a VALE e terceiros, não gerando o presente instrumento qualquer exclusividade entre VALE e as INSTITUIÇÕES/FUNDAÇÃO sobre o tema do Projeto, respeitadas as condições de confidencialidade e propriedade intelectual do presente instrumento.

15.16 O limite de responsabilidade das Partes com relação ao presente Convênio, por qualquer reclamação ou demanda em agregado, sob nenhuma circunstância, poderá exceder a 100% (cem por cento) do valor do presente Convênio, conforme previsto na Cláusula 3.1, com exceção ao previsto no subitem abaixo.

15.16.1 As limitações e exclusões de responsabilidade previstas neste Convênio, serão aplicáveis às hipóteses devidamente comprovadas de:

(i) Violação de direito de propriedade intelectual;

(ii) Fraude ou dolo;

(iii) Infração à(s) cláusula(s) anticorrupção ou sanções;

(iv) Danos ao meio ambiente;

(v) Violação à legislação trabalhista, previdenciária e tributária;

(vi) Descumprimento das políticas de saúde e segurança;

(vii) Quebra de confidencialidade;

(viii) Acidentes dos quais resultem lesão corporal ou morte; e/ou

(ix) Utilização de mão de obra infantil ou escrava ou condição análoga que atente contra a dignidade humana;

(x) Violação ao disposto na cláusula de proteção de dados pessoais.

15.17 Nenhuma das Partes será responsável perante a outra Parte por danos morais, lucros cessantes e/ou danos indiretos, com exceção ao previsto na cláusula 15.16 acima.

15.18 Na hipótese de saída do Projeto por alguma das INSTITUIÇÕES, as demais Partes, desde que em comum acordo, poderão de forma cooperativa manter a execução do Projeto, por meio de celebração de termo aditivo ao presente instrumento.

CLÁUSULA DECIMA-SEXTA – DO FORO

16.1 As Partes elegem o foro competente a Justiça Federal – Subseção Judiciária de Ponte Nova - MG**,** como o único competente para dirimir questões decorrentes do presente Convênio, com renúncia expressa a qualquer outro, por mais especial que seja.

CLÁUSULA DÉCIMA-SÉTIMA – LEI APLICÁVEL

17.1 Este Contrato é regido pelas leis da República Federativa do Brasil.

Em caso de assinatura física, o Convênio será assinado em 04 (quatro) vias de igual teor e forma, para um só efeito. Como alternativa à assinatura física do Convênio , as Partes declaram e concordam que a assinatura mencionada poderá ser efetuada em formato eletrônico. As Partes reconhecem a veracidade, autenticidade, integridade, validade e eficácia deste Convênio e seus termos, incluindo seus anexos, nos termos do art. 219 do Código Civil, em formato eletrônico e/ou assinado pelas Partes por meio de certificados eletrônicos, ainda que sejam certificados eletrônicos não emitidos pela ICP-Brasil, nos termos do art. 10, § 2º, da Medida Provisória nº 2.200-2, de 24 de agosto de 2001 (“MP nº 2.200-2”).

Outo Preto, de de 2023.

_____ _____

VALE S.A. VALE S.A.

Nome: Nome:

Cargo: Cargo:

_____ _____

UFOP UNESP

Nome: Cláudia Aparecida Marliére de Lima Nome: Pasqual Barretti

Cargo: Reitora Cargo: Reitor

_____ _____

Pesquisador Líder/UFOP Pesquisador Líder/UNESP FUNDAÇÃO

Nome: Matheus Josué de Souza Matos Nome: Alexandre Reily Rocha Nome: Cristovam Paes de Oliveira

CPF:809.852.705-00 CPF:287.249.288-79 Cargo: Presidente

Testemunhas:

1. _____ 2. _____

Nome: Nome:

CPF/MF: CPF/MF:

R.G.: R.G.:

Documento assinado eletronicamente por **Matheus Josue de Souza Matos**, **PROFESSOR DE MAGISTERIO SUPERIOR**, em 12/12/2023, às 16:40, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no art. 6º, § 1º, do Decreto nº 8.539, de 8 de outubro de 2015.

Documento assinado eletronicamente por **Claudia Aparecida Marliere de Lima**, **REITOR(A)**, em 12/12/2023, às 16:51, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no art. 6º, § 1º, do Decreto nº 8.539, de 8 de outubro de 2015.

Documento assinado eletronicamente por **Cristovam Paes de Oliveira**, **Usuário Externo**, em 12/12/2023, às 17:08, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no art. 6º, § 1º, do Decreto nº 8.539, de 8 de outubro de 2015.

Documento assinado eletronicamente por **Alexandre Reily Rocha**, **Usuário Externo**, em 12/12/2023, às 17:10, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no art. 6º, § 1º, do Decreto nº 8.539, de 8 de outubro de 2015.

Documento assinado eletronicamente por **Fabrício Vilela Parreira**, **Usuário Externo**, em 13/12/2023, às 08:26, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no art. 6º, § 1º, do Decreto nº 8.539, de 8 de outubro de 2015.

Documento assinado eletronicamente por **FELIPE VIANA PIMENTA**, **Usuário Externo**, em 13/12/2023, às 08:35, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no art. 6º, § 1º, do Decreto nº 8.539, de 8 de outubro de 2015.

Documento assinado eletronicamente por **Pasqual Barretti**, **Usuário Externo**, em 14/12/2023, às 08:06, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no art. 6º, § 1º, do Decreto nº 8.539, de 8 de outubro de 2015.

Documento assinado eletronicamente por **ROGERIO TALES SILVA CARNEIRO**, **Usuário Externo**, em 14/12/2023, às 09:10, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no art. 6º, § 1º, do Decreto nº 8.539, de 8 de outubro de 2015.

A autenticidade deste documento pode ser conferida no site http://sei.ufop.br/sei/controlador_externo.php?acao=documento_conferir&id_orgao_acesso_externo=0 , informando o código verificador **0640756** e o código CRC **1115983F**.

Referência: Caso responda este Memorando, indicar expressamente o Processo nº 23109.012129/2023-52

SEI nº 0640756

R. Diogo de Vasconcelos, 122, - Bairro Pilar Ouro Preto/MG, CEP 35402-163
Telefone: (31)3559-1197 - www.ufop.br

Dados do Projeto

Título do Projeto
Modelagem de Multiescala Aplicada para Processos de Aglomeração a Frio
Enquadramento
Pesquisa e Desenvolvimento Tecnológico e de Inovação
Proponentes
MATHEUS JOSUE DE SOUZA MATOS e Alexandre Reily Rocha
Dados do Coordenador do Projeto

Coordenadores
MATHEUS JOSUE DE SOUZA MATOS
SIAPE 1.981.540
CPF 809.852.705-00
Setor do Coordenador DEPARTAMENTO DE FISICA
Endereço dentro da UFOP Universidade Federal de Ouro Preto
E-mail matheusmatos@ufop.edu.br
Telefone (31) 9916-95315 Telefone UFOP (31) 9916-95315

Alexandre Reily Rocha
CPF: 287.249.288-79
Endereço: Instituto de Física Teórica (UNESP)
E-mail Alexandre.reily@unesp.br
Telefone +55 11 98576 6196

Linha de Pesquisa
Física; Física da Matéria Condensada; Estados Eletrônicos; Simulação Computacional; Estruturas Eletrônicas e Propriedades Elétricas de Superfícies; Interf. e Partículas.

INTRODUÇÃO

A aglomeração a frio do minério de ferro, que pode envolver a briquetagem, extrusão e pelotização é um processo importante na produção de aço e dentro da empresa Vale. O correto entendimento dos aspectos microscópicos da interação entre as partículas pode permitir o entendimento dos fenômenos e posteriormente uma otimização de processo. Dessa forma, se faz necessário entender as interações entre o minério de ferro, os materiais utilizados como aglomerantes, aditivos e também nanomateriais. A simulação computacional é uma ferramenta útil para estudar e entender tais interações e possibilitar o entendimento dos fenômenos desse processo. A simulação computacional tem sido amplamente utilizada para entender diversos fenômenos na natureza. No estudo de materiais, a teoria do Funcional da Densidade (DFT) pode ser aplicada para estudar propriedades de diferentes materiais, incluindo minérios de ferro. A simulação computacional permite a descrição de propriedades emergentes, além de possibilitar a exploração e modulação de novas propriedades. Na modelagem molecular aplicada ao estudo de minerais, diferentes abordagens têm sido utilizadas, como simulações de dinâmica molecular e cálculos utilizando DFT. É possível o estudo de fenômenos como a flotação mineral e interações entre minério de ferro e surfactantes com essas técnicas, determinar as condições de formação, por exemplo, de camadas autoconstruídas em superfícies, estudar a adsorção de moléculas e compreender as propriedades mecânicas dos minérios. As simulações computacionais também têm sido utilizadas como técnicas complementares para corroborar resultados experimentais em experimentais com técnicas como AFM e difração de raio-X. Além disso, essas simulações permitem o estudo de propriedades eletrônicas dos minérios, bem como a análise do impacto de diferentes interações, modificações de superfície e presença de nanomateriais. Dessa forma, a simulação computacional em diferentes níveis tem se mostrado uma ferramenta valiosa para o estudo do minério de ferro, aglomerantes e nanomateriais. Através dessas técnicas, é possível descrever as interações entre esses sistemas e obter informações importantes para o aprimoramento do processo de aglomeração a frio. Assim, o objetivo principal deste projeto é desenvolver competência dentro do Centro de Tecnologia de Ferrosos para simulações computacionais multiescala aplicada aos processos de aglomeração a frio utilizando simulações de dinâmica molecular e métodos de primeiros princípios.

JUSTIFICATIVA E ESTADO DA ARTE

Obter o entendimento das interações microscópicas existentes entre o minério de Ferro, aglomerantes, nanomateriais e outros constituintes do processo de briquetagem ou pelotização do minério de ferro têm significativa importância na indústria mineral, pois permite descrever os fenômenos e as propriedades físicas e químicas dos materiais. Neste sentido, a modelagem molecular e simulação computacional, em diferentes níveis de detalhes e resolução, podem ser usadas para descrever fenômenos complexos através de diferentes escalas no que chamamos de simulações moleculares de multiescala. A visão que pode ser obtida das simulações pode ser peça chave para o projeto e triagem de melhores aglomerantes, reagentes, surfactantes ou nanomateriais que podem ser utilizados na briquetagem. Diferentes desafios da engenharia mineral podem ser enfrentados com essa técnica como, por exemplo, a necessidade de utilização pela indústria em produtos químicos mais eficientes. Custo reduzido, menos input de deletérios e verdes [https://doi.org/10.1016/j.mineng.2021.107062].

No contexto de minério de ferro e aglomerantes, simulações em multiescala podem ser usadas para estudar e otimizar vários aspectos do processo de aglomeração do minério de ferro. A tecnologia de briquetagem do minério de ferro exige um correto entendimento das interações existentes entre o minério de ferro com ele mesmo e também com o aglomerante, além de aditivos. Em propostas inovadoras requer também o entendimento das interações desses sistemas com nanomateriais. Entender adequadamente essas interações é primordial para se atender os critérios mínimos exigidos pela indústria mineral para utilização de aglomerantes e/ou nanomateriais no processo de briquetagem. É importante nesse processo prestar atenção depois da briquetagem nas propriedades mecânicas, na composição química, na performance metalúrgica ou mesmo o custo. Por exemplo, espera-se que neste processo um bom aglomerante gere aglomerados a frio com boas propriedades mecânicas e resistência a fratura por impacto ou compressão e resistência a abrasão [https://doi.org/10.1016/S0927-7757(03)00264-4]. Neste processo, entender as forças de coesão dos aglomerantes utilizados, dos minérios de ferro e de forças de adesão entre estes é tarefa primordial. Se as características necessárias para uma boa briquetagem não forem obedecidas, diferentes falhas podemocorrer na ligação entre os sistemas. Neste sentido a utilização de simulação computacional é uma estratégia importante para descrição e propostas de modulação dessas propriedades.

A utilização de simulação computacional para o entendimento de fenômenos variados na natureza existe há muito tempo e tem evoluído constantemente. Há propostas que vão desde avanços na Mecânica Quântica, passando por descrições clássicas e atualmente até na utilização de inteligência artificial [https://www.mdpi.com/2075-163X/10/1/22#]. Desde a revolução dos nanomateriais, diferentes tipos de simulação alavancaram uma explosão na utilização de métodos como a Teoria do Funcional da Densidade (DFT), que é hoje uma das teorias mais citadas em ciência do mundo [https://www.nature.com/news/the-top-100-papers-1.16224]. Tanto a DFT quanto outros métodos como Dinâmica Molecular ou tight-binding podem ser empregadas em física da matéria condensada para o entendimento de diferentes fenômenos. Tais teorias vêm sendo empregada desde a década de 90 no estudo de fenômenos voltados para a indústria mineral [https://doi.org/10.1016/j.mineng.2021.107062]. No método científico devemos nos basear em experimentos, criar modelos e predições e

repetir os experimentos, até que tenhamos um entendimento apurado de um fenômeno físico. O modelo final para caracterização de materiais já é conhecido, passa pela utilização da DFT e há a necessidade de utilização de computadores para simulação computacional, e diferentes e variadas propriedades podem ser obtidas a partir desse modelo. O uso de computadores, portanto, é essencial para exploração desses modelos onde é possível, através das simulações, a descrição de propriedades emergentes que não estão disponíveis apenas em modelos teóricos. A teoria do Funcional da Densidade é uma implementação prática do modelo final para sistemas atômicos. É razoavelmente preciso e versátil e pode ser utilizada em diferentes contextos em ciência dos materiais. Por exemplo, na exploração e previsão de novas propriedades, por simular experimentos difíceis ou às vezes impossíveis em laboratórios. No esclarecimento e complemento de informações experimentais por meio de controle preciso de condições da simulação. Como por exemplo, tentar entender o papel de impurezas nos diferentes tipos de minérios de ferro ou o papel de diferentes tipos de aglomerantes no processo de briquetagem ou mesmo no papel de nanomateriais no processo de aumento de resistência mecânica desses sistemas. No design de novos materiais, pode ser aplicada com propostas de materiais com características desejadas e com a diminuição de processo de tentativa e erro experimental. É possível ainda a descrição de propriedades novas que estejam escondidas em materiais ainda não estudadas e que podem ser importantes em um processo físico dentro da indústria mineral.

Diferentes abordagens vêm sendo utilizadas na modelagem molecular aplicada, por exemplo, ao estudo de flotação mineral [https://doi.org/10.1016/j.mineng.2021.107062, https://www.mdpi.com/2075-163X/10/1/22, https://doi.org/10.3390/min10010022, https://doi.org/10.2138/rmg.2001.42.1, https://doi.org/10.1016/S0892-6875(00)00133-3]. Já existe na literatura modelos de potenciais para cálculos de dinâmica molecular para hematita, goethita, caulinita e quartzo e a suas interações com água e Cl- e Na+ [https://doi.org/10.1016/j.colsurfa.2022.129585]. Creutzburg et. Al. mostratam o papel da dinâmica molecular no estudo da interface da magnetita com o ácido oleico [https://www.nature.com/articles/s42004-022-00741-0]. Neste trabalho, que possui tanto uma parte teórica quanto experimental, a dinâmica molecular foi usada para descrever as condições de formação de monocamadas do ácido na superfície (001) da magnetita o que corrobora os resultados experimentais realizados com espectroscopia no infravermelho por transformada de Fourier (FT-IRRAS). O estudo da interação entre quartzo e nanotubos de carbono já foi realizada em diferentes contextos utilizando dinâmica molecular. Machado et. Al. [http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevLett.110.105502, https://doi.org/10.1557/opl.2011.220] estudaram o mecanismo de deposição de nanotubos de carbono em substratos de quartzo com degraus. A dinâmica foi realizada com milhões de átomos.

Cálculos utilizando DFT, bem como simulações de dinâmica molecular ab initio, vem sendo empregados de maneira regular nos mais variados problemas na área. Há um número razoável de trabalhos estudando as interfaces e os diferentes tipos de adsorção de moléculas orgânicas em superfícies de minerais [https://doi.org/10.1016/j.cis.2018.04.003]. Cálculos comparando a interação de ácido oleico com hematita, magnetita e goethita mostraram que o complexo mais estável dessa interação é feito entre o ácido oleico e a magnetita. Determinou-se as superfícies desses sistemas que eram mais estáveis para estudar a adsorção do ácido. Estudos similares com outros surfactantes como ácido carboxílico, amida, monoglicerídeo também já foram realizados [https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.8b05899]. Neste caso, foi possível estudar como a estrutura química dos diferentes surfactantes podem influenciar na adsorção na superfície α-Fe2O3(0001). Importante destacar que muitos estudos apresentam a associação entre teoria e experimento. Geralmente, experimentos utilizando AFM, difração de raio-X, entre outros [https://doi.org/10.1016/j.molliq.2023.121397, http://dx.doi.org/10.1016/j.apsusc.2014.01.014, https://doi.org/10.1016/j.apsusc.2019.02.224]. Também usando DFT é possível estudar as propriedades mecânicas dos óxidos de ferro [https://doi.org/10.1016/j.mineng.2019.106107, https://pubs.acs.org/doi/10.1021/acsomega.2c06101]. Neste caso, é possível determinar as constantes elásticas dos materiais bem como os módulos volumétrico e de cisalhamento. Hematita e a siderita, por exemplo, são mecanicamente estáveis e anisotrópicos. Uma análise morfológica da fratura de diferentes superfícies pode ser feita determinando qual superfície exposta é mais susceptível para fraturas [https://pubs.acs.org/doi/10.1021/acsomega.2c06101]. Estes tipos de cálculos podem ser realizados para, por exemplo, óxidos de ferro modificados, testando as mudanças em suas propriedades mecânicas. Cálculos para se determinar as propriedades eletrônicas dos minérios também podem ser realizados, além da análise do impacto nessas propriedades quando da adsorção de moléculas, modificações na superfície, interação com nanomateriais, os efeitos de hidratação e outros [https://doi.org/10.1016/j.ijmst.2021.10.001, https://doi.org/10.1021/acs.jpcb.9b02925, https://doi.org/10.1016/S0169-4332(02)01284-9]. O estudo da interação de Sílica com minério de ferro também é possível. Cálculos DFT já foram realizados para investigar a adsorção do segmento O-Si-O em diferentes superfícies do FeO. Foi possível determinar, por exemplo, quais sítios nas superfícies são mais favoráveis para a adsorção deste segmento. Devido a geometria da superfície FeO (110) é mais fácil formar o segmento Fe–O–Si devido sua energia de absorção nessa face. Um estudo com DFT sobre a interação de Hematita com nanomateriais, como o grafeno, calculou as propriedades eletrônicas, estruturais e químicas quando o grafeno é depositado na hematita. O estudo mostrou que dependendo da terminação da superfície da hematita que é exposta pode-se ter uma energia de ligação maior devido à transferência de carga entre os sistemas [https://doi.org/10.1021/jp501171t]. Além disso, se a superfície exposta é com oxigênio o sistema fica mais reativo e susceptível a adsorção de H, OH, H2 e H2O. Cálculos DFT foram realizados em conjunto com experimentos de espectroscopia Raman para estudar a interação de nanotubos de carbono com um substrato cristalino de SiO2 [https://doi.org/10.1021/nl103245q]. Os resultados mostram uma forte interação do nanotubo com o SiO2, com uma deformação considerável do nanotubo devido à essa interação. Esse efeito ajuda a entender alterações nas frequências de vibração observadas no nanotubo.

Dessa forma, é possível notar que, dentro do escopo da proposta, a simulação computacional em diferentes níveis pode ser utilizada para o estudo do minério de ferro, os aglomerantes e nanomateriais. É possível também notar que a descrição da interação entre esses sistemas pode ser descrita com essas técnicas. Há muitos trabalhos de revisão nessa área, mas pouca coisa documentada, até onde temos conhecimento, sobre os objetivos deste projeto.

OBJETIVOS (GERAIS E ESPECÍFICOS)

Desenvolver competência dentro do Centro de Tecnologia de Ferrosos da Vale para simulações computacionais mult-scale aplicada aos processos de aglomeração a frio. No primeiro estágio pretende-se atacar três linhas de investigação:

1. Modelagem Computacional do minério de ferro (minFe), aglomerante e nanomateriais utilizando a teoria do funcional da densidade (DFT) e dinâmica molecular;
2. Modelagem Computacional da Interação entre os aglomerantes com o minFe;
3. Modelagem Computacional da Interação entre os aglomerantes e minFe com os nanomateriais: grafeno, nanotubos de carbono, e outros materiais 2D de interesse;

Objetivos Específicos:

1. O primeiro objetivo é realizar uma reunião de alinhamento com todos os participantes do projeto. Neste momento serão apresentados, pela equipe da Vale, os diferentes materiais utilizados na produção dos aglomerados, concentrações, nanomateriais, etc. As equipes de simulação (UFOP/UNESP) farão uma explanação das metodologias de simulação e serão definidos os problemas específicos a serem abordados. Neste ponto, com os diferentes problemas apresentados por todos da equipe, faremos uma divisão dos problemas entre as instituições UFOP e UNESP. Na resolução dos problemas há uma parte metodológica computacional comum na modelagem e essa troca de conhecimento será feita entre as instituições e VALE. Também teremos colaborações entre os pesquisadores nas simulações dos projetos específicos de cada instituição.

2. Para primeira etapa computacional será necessário realizar testes de parâmetros computacionais para os cálculos DFT tais como: base numérica a ser utilizada, pseudopotencial, qual minério de ferro é importante modelar, qual modelo de Sílica se encaixa melhor na proposta dos objetivos seguintes, quais as principais propriedades precisam ser descritas com mais precisão, quais nanomateriais devem ser descritos; Sempre importante a reprodução de resultados existentes na literatura para corroborar os resultados. Modelos de superfícies dos minérios podem ser criados a fim de determinar qual superfície é mais favorável para um tipo específico de interação. O mesmo pode ser feito com os tipos de aglomerantes e nanomateriais. Na parte de Dinâmica molecular testes do LAMMPS e dos potenciais clássicos a serem utilizados precisam ser realizados com reprodução de resultados da literatura.

3. Na descrição da interação do aglomerante (sílica) com o minFe, do ponto de vista do DFT, pode-se estudar propriedades estruturais e energéticas dessa interação calculando, por exemplo, energias de ligação entre os dois materiais. É importante também destacar o papel da água nessa parte do trabalho o que pode ser considerado utilizando dinâmica molecular ab-initio ou dinâmica molecular clássica; para esse estudo, diferentes superfícies da sílica e do minFe podem ser estudados, determinando assim as diferentes maneiras de aglomeração dos materiais. Do ponto de vista do DFT, superfícies comensuráveis devem ser determinadas; diferentes tipos de minério de ferro podem ser testados e com diferentes concentrações de defeitos substitucionais e/ou vacâncias com

características típicas da região de extração do minério; Cálculos da variação da energia de formação dos defeitos e de coesão do minério pode ser feito a fim de se descrever a variação nas forças de coesão deste sistema. O mesmo procedimento pode ser adotado para o aglomerante como a sílica. O papel de moléculas adsorvidas nas superfícies na adesão do aglomerante e minFe pode ser avaliado. O cálculo da energia de ligação entre diferentes slabs do minério de ferro também pode ser avaliada a fim de determinar as forças de adesão entre as partes do minério. 4. O papel dos nanomateriais deve ser estudado também com a descrição de propriedades estruturais e energéticas que podem ser obtidas via DFT. A energia de ligação entre os nanomateriais e o aglomerante e minFe pode ser obtido através desses métodos. Pode-se pensar na descrição das propriedades mecânicas desse novo composto. A proposta de um modelo minFe+aglomerante+nanomateriais pode ser feita a fim de se identificar o melhoramento das propriedades de dureza e resistência a tração do composto; uma comparação com diferentes nanomateriais pode ser feita.

METODOLOGIA

No estudo de materiais e nanoestruturas é importante o emprego de métodos teóricos e de simulações computacionais a fim de entender os fenômenos e se consiga os modelos adequados para descrever os experimentos e processos. Com o avanço do estudo de materiais e da nanotecnologia essas técnicas de simulações computacionais ganharam maior sofisticação e alta reprodutibilidade, permitindo o entendimento de fenômenos cada vez mais complexos. Dependendo do tipo de propriedade que se queira descrever, diferentes técnicas podem ser utilizadas, desde técnicas de primeiros princípios à dinâmica molecular com potenciais clássicos. As simulações de dinâmica molecular envolvem a modelagem do movimento e comportamento de átomos ou moléculas individuais ao longo do tempo. Ela é baseada nas leis do movimento de Newton e emprega algoritmos de integração numérica para calcular as trajetórias das partículas individuais nos sistemas simulados. Nas simulações de MD, são determinadas as posições iniciais, velocidades e forças atuantes em cada partícula. As forças são geralmente derivadas de uma representação matemática das interações interatômicas, como campos de força ou potenciais. As equações de movimento são resolvidas iterativamente, avançando o sistema em pequenos intervalos de tempo e atualizando as posições e velocidades das partículas com base nas forças calculadas. Durante a simulação, as partículas interagem entre si, trocando energia e momento. As forças interatômicas determinam como as partículas se movem, vibram e rotacionam, permitindo que a simulação capture a dinâmica do sistema. O tempo de simulação pode variar de femtossegundos a microssegundos ou mais, dependendo do sistema específico e dos fenômenos de interesse.

No caso do minério de ferro e aglomerantes, as simulações de MD podem fornecer insights sobre os mecanismos de ligação ao examinar as interações em nível atômico entre as moléculas do aglomerante e as superfícies do minério de ferro. Essas simulações podem capturar a dinâmica do processo de ligação, incluindo a formação de ligações químicas, interações eletrostáticas e forças de van der Waals. Ao estudar diferentes moléculas ou cristais de aglomerantes e sua interação com as superfícies do minério de ferro, as simulações de MD podem ajudar a identificar os aglomerantes mais eficazes para a pelotização. Esse tipo de metodologia permite atacar problemas em que os modelos atômicos podem apresentar uma quantidade maior de átomos. Através de softwares como o LAMMPS, é possível modelar diferentes problemas em sistemas onde suas características estruturais e morfológicas podem variar com o tempo, mas pressão, temperatura e número de partículas, por exemplo, devam permanecer constantes. As simulações de dinâmica molecular podem ser realizadas utilizando-se o programa LAMMPS no ensemble NVT, NPT e/ou NVE. Adotaremos o algoritmo de velocidade de Verlet com diferentes passos de tempo a depender do problema. A interação entre os átomos poderá ser tratada com potenciais já existentes na literatura do tipo Tersoff, Airebo ou mesmo potenciais reativos como o reax/c. Os resultados das simulações de MD são analisados para obter médias estatísticas, como funções de distribuição radial, deslocamentos quadráticos médios, relações stress-strain, deformações nas estruturas ou distribuições de energia. Essas análises fornecem insights sobre o comportamento do sistema, permitindo que se compreenda e preveja suas propriedades e dinâmicas.

Por outro lado, os cálculos utilizando a mecânica quântica, como a teoria do funcional da densidade, permite o cálculo preciso de propriedades eletrônicas, estruturais, mecânicas e energéticas de moléculas e materiais. No contexto do minério de ferro e aglomerantes, os cálculos de DFT podem ser usados para investigar as energias de coesão e adesão entre minério de ferro e aglomerante e descrever questões relacionadas a estabilidade das ligações nos sistemas. Esses cálculos podem fornecer informações sobre as energias de adsorção, forças de ligação e estruturas eletrônicas das moléculas ou cristais do aglomerante nas superfícies do minério de ferro. Ao comparar as propriedades de ligação de diferentes aglomerantes por meio de cálculos de DFT, é possível obter insights sobre a estabilidade e desempenho dos aglomerantes nos processos de pelotização. Para uma parte de execução dos projetos utilizaremos a Teoria do Funcional da Densidade como implementada no método SIESTA para o estudo dos problemas propostos. A Teoria do Funcional da Densidade é uma teoria de primeiros princípios derivada da Mecânica Quântica, que tem sua origem em dois teoremas dos físicos Pierre Hohenberg e Walter Kohn, publicados em um artigo em 1964. Na DFT, toda informação referente aos átomos, moléculas ou sólidos está relacionada com a densidade de elétrons do sistema e, além disso, essa densidade que leva a menor energia é a densidade do estado fundamental deste sistema. Dessa forma, a DFT é poderosa porque substitui o problema que contém a busca por uma grandeza física de 3N variáveis por um problema de apenas três variáveis: a densidade eletrônica. Essa metodologia tem se mostrado eficiente na determinação de propriedades estruturais, eletrônicas, e na proposta de mecanismos para modulação dessas propriedades com vistas a aplicação em nanotecnologia. A utilização da DFT envolve cálculos numéricos extremamente complexos que exige sofisticados computadores para o estudo das propriedades das nanoestruturas. Apesar disso, nesse campo de estudo, a DFT é uma das mais poderosas teorias, com custos computacionais relativamente inferiores as teorias anteriores a ela. Em nossos cálculos, utilizaremos também a aproximação de gradiente conjugado para o funcional de troca-correlação ou funcionais que levem em conta as interações de vdW, e pseudopotenciais de norma conservadas de Troullier-Martins, na forma fatorizada de Kleinman-Bylander, como implementado no método SIESTA. A base de funções a ser utilizada consiste em pseudo-funções atômicas numéricas de alcance finito. Tais implementações permitem cálculos de estrutura eletrônica de sistemas com um número grande de átomos. As bases double-zeta com funções de polarização permitem uma boa precisão para o cálculo de geometrias, densidade de estados e estrutura de bandas, e energias deformação. Outros softwares que implementam o DFT também podem ser utilizados como o QE, VASP, ORCA, entre outros.

RESULTADOS ESPERADOS

Do ponto de vista geral, espera-se introduzir as simulações computacionais como parte fundamental no processo de desenvolvimento de produtos dentro da Vale. Do ponto de vista mais específico, primeiramente por meio do mapeamento de parâmetros das simulações atomísticas espera-se obter um conjunto de marcadores da qualidade do material para aplicações. A partir daí ambiciona-se desenhar novos aglomerantes e nanomateriais que possam ser utilizados na produção por aglomeração a frio.

INDICADOR GERAL - MENSURAÇÃO DO OBJETO

O projeto é teórico/computacional e visa desenvolver a capacidade de entendimento dos processos de aglomeração a frio utilizando técnicas de simulação computacional baseadas em dinâmica molecular, teoria do funcional da densidade (métodos por primeiros princípios) e machine learning. Dessa forma, pretende-se ao final dos dois anos do projeto possuir os parâmetros computacionais e entendimento do problema e da literatura a fim de entender e simular as condições envolvidos no processo de aglomeração de minérios. O projeto proposto se enquadra na área de pesquisa básica. Ela é a pedra fundamental para a compreensão microscópica dos produtos já desenvolvidos pela Vale. A partir daí poderemos propor novos materiais nanoscópicos a ser incorporados ao agregado para aumentar ainda mais a resistência do material. A partir das propostas teóricas, os diferentes grupos de pesquisa da Vale poderão sintetizar os materiais e realizar os testes necessários para utilização do produto.

7. Há necessidade de realizar adequação nas instalações da Universidade?
Não

8. Há possibilidade de geração de propriedade intelectual (marcas, patentes, softwares) passível de proteção?
Sim
Descrição da(s) inovação/inovações:

Enquanto a Vale já desenvolveu um produto de alto valor agregado, baseado em um aglomerante de silicato de sódio depois de anos de pesquisa aplicada, simulações computacionais podem ter um importante papel no desenvolvimento de novos aglomerantes com custo inferior e com menor produção de resíduos. Neste sentido, é importante construir o know-how de simulações na área, primeiramente compreendendo as propriedades microscópicas do aglomerante atualmente utilizado e, em seguida, testar novos materiais utilizando os conhecimentos adquiridos. Esta metodologia é inovadora, sendo que as simulações computacionais podem reduzir significativamente o tempo de desenvolvimento de novos produtos. O projeto proposto se enquadra na área de pesquisa básica. Ela é a pedra fundamental para a compreensão microscópica dos produtos já desenvolvidos pela Vale. A partir daí poderemos propor novos materiais

nanoscópicos a ser incorporados ao agregado para aumentar ainda mais a resistência do material. A partir das propostas teóricas, os diferentes grupos de pesquisa da Vale poderão sintetizar os materiais e realizar os testes necessários para utilização do produto.

9. Forma de partilhamento dos direitos envolvidos, nos termos da legislação aplicável e da Política de Inovação da Universidade:
Será definido numa etapa posterior por um orgão competente.
10. Atividades de pesquisa que serão realizadas em conjunto com os parceiros (lei de inovação - acordo de parceria):
A definir

Total de Meses
26
Valor Total do Aporte do Financiador
R$ 1.059.460,76
Valor Total do Aporte da UFOP
R$ 0,00
Valor Total do Aporte da Fundação
R$ 0,00

Valor Total do Projeto
R$ 1.059.460,76

REFERÊNCIAS

1. "The SIESTA method for ab initio order-N materials simulation - IOPscience." 08 Mar. 2002, https://iopscience.iop.org/article/10.1088/0953-8984/14/11/302.
2. "Phys. Rev. 136, B864 (1964) - Inhomogeneous Electron Gas." https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.136.B864.
3. "Phys. Rev. 140, A1133 (1965) - Self-Consistent Equations Including ...." https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.140.A1133.
4. "Phys. Rev. Lett. 77, 3865 (1996) - Generalized Gradient Approximation ...." 28 Oct. 1996, https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.77.3865.
5. "Phys. Rev. B 43, 1993 (1991) - Efficient pseudopotentials for plane ...." 15 Jan. 1991, https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.43.1993.
6. "Phys. Rev. Lett. 48, 1425 (1982) - Efficacious Form for Model ...." https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.48.1425.
7. "Phys. Rev. B 40, 3979 (1989) - Ab initio multicenter tight-binding ...." https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.40.3979.
8. "Fast Parallel Algorithms for Short-Range Molecular Dynamics." 01 Mar. 1995, https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S002199918571039X.
9. "LAMMPS Molecular Dynamics Simulator." https://www.lammps.org/.
10. "Phys. Rev. Lett. 56, 632 (1986) - New empirical model for the ...." 10 Feb. 1986, https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.56.632.
11. "Phys. Rev. B 39, 5566(R) (1989) - Modeling solid-state chemistry ...." https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.39.5566.
12. "Phys. Rev. Lett. 73, 676 (1994) - Structural Properties of a Carbon ...." 01 Aug. 1994, https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.73.676.
13. "A reactive potential for hydrocarbons with intermolecular interactions ...." 08 Apr. 2000, https://pubs.aip.org/aip/jcp/article/112/14/6472/473303/A-reactive-potential-for-hydrocarbons-with.
14. "A second-generation reactive empirical bond order (REBO) potential ...." 18 Jan. 2002, https://iopscience.iop.org/article/10.1088/0953-8984/14/4/312.
15. "AIREBO-M: A reactive model for hydrocarbons at extreme pressures." 13 Jan. 2015, https://pubs.aip.org/aip/jcp/article/142/2/024903/605174/AIREBO-M-A-reactive-model-for-hydrocarbons-at.
16. "ReaxFF Reactive Force Field for Molecular Dynamics Simulations of ...." 16 Jan. 2008, https://pubs.acs.org/doi/10.1021/jp709896w.
17. "Historical perspective and bibliometric analysis of molecular modeling ...." 15 Aug. 2021, https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0892687521002910.
18. "Functions and molecular structure of organic binders for iron ore ...." 29 Aug. 2003, https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0927775703002644.
19. "Trends in Modeling, Design, and Optimization of Multiphase Systems in ...." https://www.mdpi.com/2075-163X/10/1/22.
20. "The top 100 papers : Nature News & Comment." 29 Oct. 2014, https://www.nature.com/news/the-top-100-papers-1.16224.
21. "Molecular Modeling in Mineralogy and Geochemistry." 01 Jan. 2001, https://pubs.geoscienceworld.org/msa/rimg/article-abstract/42/1/1/312168/Molecular-Modeling-in-Mineralogy-and-Geochemistry.
22. "Molecular models of hematite, goethite, kaolinite, and quartz: Surface ...." 05 Oct. 2022, https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0927775722013401.
23. "Adsorption of oleic acid on magnetite facets - Nature." 23 Oct. 2022, https://www.nature.com/articles/s42004-022-00741-0.
24. "Dynamics of the Formation of Carbon Nanotube Serpentines." 08 Mar. 2013, https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.110.105502.
25. "On the Formation of Carbon Nanotube Serpentines: Insights from Multi ...." 01 Jan. 2011, https://link.springer.com/article/10.1557/opl.2011.220.
26. "Adsorption of organic molecules on mineral surfaces studied by first ...." 01 Jun. 2018, https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0001868618300149.
27. "Synergism of mixed cationic collectors in the flotation of quartz unveiled by AFM, solution chemistry and quantum chemical calculations." 15 Apr. 2023, https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0167732223002003.
28. "Molecular modeling studies of oleate adsorption on iron oxides." 15 Mar. 2014, https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0169433214000221.
29. "AFM and DFT study of depression of hematite in oleate-starch-hematite ...." 30 Jun. 2019, https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0169433219305811.
30. "Mechanical properties of siderite and hematite from DFT calculation ...." 15 Jan. 2020, https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0892687519305187.
31. "Insights into the Fracture Nature of Hematite from First Principles DFT ...." 21 Feb. 2023, https://pubs.acs.org/doi/10.1021/acsomega.2c06101.
32. "Insight into mineral flotation fundamentals through the DFT method ...." 01 Nov. 2021, https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S2095268621001105.
33. "Full potential calculations on the electron bandstructures of Sphalerite, Pyrite and Chalcopyrite." 15 Feb. 2003, https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0169433202012849.
34. "Graphene Supported on Hematite Surfaces: A Density Functional Study ...." 21 Mar. 2014, https://pubs.acs.org/doi/10.1021/jp501171t.
35. "Interfacial Design on Graphene–Hematite Heterostructures for Enhancing ...." 02 Jan. 2021, https://www.mdpi.com/2079-4991/11/1/81.
36. "Robust nanocomposites of α-Fe2O3 and N-doped graphene oxide ...." 01 Nov. 2019, https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0008622319305020.
37. “Modulating the Electronic Properties along Carbon Nanotubes via Tube−Substrate Interaction” 04 Nov, 2010, https://pubs.acs.org/doi/10.1021/nl103245q
38. “Adsorption of Surfactants on α-Fe2O3(0001): A Density Functional Theory Study” 21 Ago, 2018 https://pubs.acs.org/doi/10.1021/acs.jpcc.8b05899
39. “Simulating Surfactant–Iron Oxide Interfaces: From Density Functional Theory to Molecular Dynamics” 11 Jul 2019, https://pubs.acs.org/doi/10.1021/acs.jpcb.9b02925

PLANO DE TRABALHO

1. Instituições Participantes
Instituição **UFOP - Universidade Federal de Ouro Preto**
Valor Total do Aporte Financeiro**R$ 0,00**
Número de Parcelas**0**
Instituição Interveniente
A Instituição Interveniente deverá ser escolhida na fase de "Escolha da Fundação".
FUNDACAO GORCEIX (FG)

VALE S.A. (33.592.510/0001-54)
VALE

Endereço **Praia de Botafogo, 186, salas 701, 1101, 1601, 1701, 1801 e 1901, Botafogo, na cidade e estado do Rio de Janeiro**
Telefone **Não Informado**
Valor do Aporte Financeiro**R$ 1.059.460,76**
Parcelas Valor do Aporte Financeiro **26**
Contribui Cientificamente **SIM**
Responsável Lega l **ROGERIO TALES SILVA CARNEIRO**
E-mail do Responsável Legal **rogerio.carneiro@vale.com**
Telefone do Responsável Legal

UNIVERSIDADE ESTADUAL PAULISTA JULIO DE MESQUITA FILHO (48.031.918/0001-24)
Unesp
Endereço **R QUIRINO DE ANDRADE, 215, Centro, SAO PAULO, SP**
Telefone **(11) 5627-0233**
Valor do Aporte Financeiro **R$ 0,00**
Parcelas Valor do Aporte Financeiro **1**
Contribui Cientificamente **SIM**
Responsável Legal **Pasqual Barretti**
E-mail do Responsável Legal **rita.costoya@unesp.br**
Telefone do Responsável Legal **(11) 5063-3223**

2. Cronograma de Atividades e Marcos

#	Atividade	Início (mês)	Término (mês)
1	Reunião de alinhamento inicial (UNESP/Vale/UFOP)	1º	1º
2	Benchmarking de parâmetros computacionais para os cálculos utilizando DFT e dinâmica molecular – UNESP	2º	6º
3	Benchmarking de parâmetros computacionais para os cálculos utilizando DFT e dinâmica molecular – UFOP	2º	6º
4	Benchmarking de parâmetros computacionais para os cálculos utilizando Machine Learning – UNESP	2º	6º
5	Simulações Computacionais das propriedades dos materiais isolados - UNESP	6º	12º
6	Simulações Computacionais das propriedades dos materiais isolados - UFOP	6º	12º
7	Simulações Computacionais da interação do aglomerante atual com o minério de ferro - UFOP	6º	18º
8	Simulações Computacionais da interação do aglomerante atual com o minério de ferro - UNESP	6º	18º
5	Simulações Computacionais da interação dos materiais nanoscópicos atualmente utilizados com o aglomerante - UNESP	6º	18º
	Simulações Computacionais da interação dos materiais nanoscópicos atualmente utilizados com o aglomerante - UFOP	6º	18º
6	Simulações Computacionais da interação de diferentes propostas de aglomerante com o minério de ferro - UNESP	12º	24º
	Simulações Computacionais da interação de diferentes propostas de aglomerante com o minério de ferro – UFOP	12º	24º
7	Simulações Computacionais da interação de diferentes materiais nanoscópcios com o aglomerante	12º	26º
8	Participação em Eventos Científicos	12º e/ou 24º	12º e/ou 24º
9	Confecção de relatórios Científicos	9º	12º
10	Confecção de relatórios Científicos	22º	24º
11	Confecção de prováveis artigos Científicos para publicação (parte 1)	8º	12º
12	Confecção de prováveis artigos Científicos para publicação (parte 2)	20º	24º

13	Reuniões Mensais com Colaboradores da Vale e da UFOP	1º	26º
14	Prestação de Contas 1	11º	12º
15	Prestação de Contas 2	23º	26º

3. Produtos e Entregas

#	Produto	Descrição	Mês de Entrega	Responsável (Pessoa Jurídica)
1	Apresentações da primeira reunião de alinhamento do projeto.	Registro das informações da reunião de alinhamento do projeto através do arquivamento das apresentações dos participantes.	1	VALE/UFOP/UNESP
2	Determinação do Espaço de parâmetros	Obtenção dos descritores para os parâmetros de qualidade que determinam as características dos materiais	6	UNESP/UFOP
3	Relatório de pesquisa	Relatório dos resultados das Simulações computacionais dos materiais em sua forma isolada (minério de Ferro, aglomerantes, nanomateriais)	9	UNESP/UFOP/VALE
4	Relatório de pesquisa	Relatório dos resultados das Simulações Computacionais da interação do aglomerante atual com o minério de ferro e da interação de diferentes propostas de aglomerante com o minério de ferro	23	UNESP/UFOP/VALE
5	Relatório de pesquisa	Relatório dos resultados das Simulações Computacionais da interação de diferentes materiais nanoscópicos com o aglomerante	23	UNESP/UFOP
6	Resumos publicados em anais de evento	Resumos publicados em anais de evento da participação dos pesquisadores em eventos científicos.	12 e/ou 24	UNESP/UFOP
7	Artigo científico submetido para Congresso e/ou Periódico indexado	Artigos publicados em revistas científicas internacionais com participação dos pesquisadores envolvidos no projeto.	26	UNESP/UFOP/Vale
8	Prestação de Contas	Prestação de contas dos recursos utilizados durante a execução do projeto	10,26	UNESP/UFOP/VALE

4. Equipe

Na parte que compete à UFOP, os trabalhos serão coordenados e executados pelo professor Matheus Josué de Souza Matos (Departamento de Física) com participação de um posdoc a ser definido, o professor Alan Barros de Oliveira atuando como pesquisador e o Técnico de Laborátório Thiago Rodrigo, que auxiliará no correto funcionamento e manutenção do Cluster Dínamo do grupo Nano. A coordenação do projeto na UNESP ficará por conta do professor Alexandre Reily, com a participação de outro posdoc a ser alocado na UNESP. Na VALE o coordenador é o Dr. Fabrício Parreira, junto com 4 pesquisadores conforme tabela abaixo. Os voluntários indicados nas tabelas abaixo indicam pesquisadores e coordenadores que não são remunerados com bolsas utilizando verba do projeto.

#	Equipe executora vinculada a UFOP	Função
1	Matheus Josué de Souza Matos	Bolsista Coordenador Pesquisador
2	Alan Barros de Oliveira	Bolsista Pesquisador
3	Posdoc a definir	Bolsista Pesquisador

4	Thiago Rodrigo Gomes da Silva	Técnico Laboratório Voluntário

#	Equipe executora vinculada a UNESP	Função
1	Alexandre Reily Rocha	Bolsista Coordenador Pesquisador
2	Posdoc a definir	Bolsista Pesquisador

#	Equipe executora vinculada a VALE	Função
1	Fabrício Vilela Parreira	Coordenador Pesquisador Voluntário
2	Valdirene Resende	Pesquisador Voluntário
3	Flavio Dutra	Pesquisador Voluntário
4	Felipe Pimenta	Pesquisador Voluntário
5	Amaury Souza	Pesquisador Voluntário

5. Descrição das atividades das instituições participantes

#	Instituição	Descrição
1	VALE	Transferir os recursos financeiros acordados, segundo o Cronograma de Desembolso constante no Plano de Trabalho, por meio do aporte de recursos financeiros de sua responsabilidade; Colaborar, nos termos do plano de trabalho, para que o Acordo alcance os objetivos nele descritos; Designar técnicos do seu quadro de pessoal para acompanhamento da execução do objeto pactuado; Acompanhar a execução do plano de trabalho; Realizar Workshop para apresentação dos estudos e resultados. Pesquisadores participantes do projeto participarão das discussões nas modelagens e na apresentação dos problemas relacionadas com o objeto do estudo. Experimentos complementares podem ser requeridos para melhor entendimentos dos fenômenos e melhor modelagem. Cabe a esses pesquisadores a realização de tais atividades.
2	UFOP	Coordenar e executar o plano de trabalho, prestando as informações necessárias à sua continuidade; Gerar relatórios com os estudos e resultados; Designar bolsista posdoc para a execução do plano de trabalho e informar a VALE/Fundação sempre que houver alteração desses técnicos; Manter sigilo dos dados disponibilizados pela Vale; Prestar contas;
3	UNESP	Coordenar e executar o plano de trabalho, prestando as informações necessárias à sua continuidade; Gerar relatórios com os estudos e resultados; Designar bolsista posdoc para a execução do plano de trabalho e informar a VALE/Fundação sempre que houver alteração desses técnicos;

		Manter sigilo dos dados disponibilizados pela Vale; Prestar contas;
	Atividades conjuntas UFOP/UNESP/VALE	Realizar reuniões periódicas para acompanhar o andamento das atividades do projeto. Definir conjuntamente adequações do cronograma de atividades previsto inicialmente. Avaliar a necessidade de inserção ou adequação de objetivos específicos. Avaliar a necessidade de remanejamento de recursos, a depender do andamento das atividades do projeto. Acompanhamento técnico opinativo e colaborativo sobre a metodologia dos trabalhos a serem desenvolvidos por colaboradores designados de cada instituição.

6. Plano de trabalho dos bolsistas

Atividade	Início (Mês)	Término (Mês)	Descrição
1	1	1	Participação Workshop de alinhamento de Colaboradores da Vale e equipe de pesquisa; Definição do problema alvo das simulações computacionais; Nesta atividade todos os membros da equipe devem participar. Coordenadores dos projetos e pesquisadores estão responsáveis pela entrega das apresentações realizadas no dia do evento. (entrega #1)
2	2	4	Revisão bibliográfica sobre Simulação computacional nos diferentes tipos de minérios dentro da empresa e dos processos de aglomeração utilizados.. Bolsista de pós-doutorado ficará responsável pelo levantamento e junto com os Coodenadores e pesquisador/UFOP. Todos ficarão responsáveis pela Determinação do espaço de parâmetros; (entrega #2)
3	2	4	Revisão bibliográfica sobre Simulação computacional nos diferentes tipos de aglomerantes utilzados (silicados, orgânicos moleculares, etc) dentro da empresa e dos nanomateriais utilizados no processos de aglomeração. Bolsista de pós-doutorado ficará responsável pelo levantamento e junto com os Coodenadores e pesquisador/UFOP. Todos ficarão responsáveis pela Determinação do espaço de parâmetros; (entrega #2)
4	2	4	Revisão bibliográfica dos diferentes métodos de simulação computacional utilizada na simulação computacional na área de mineração. Bolsista de pós-doutorado ficará responsável pelo levantamento e junto com os Coodenadores e pesquisador/UFOP. Todos ficarão responsáveis pela Determinação do espaço de parâmetros; (entrega #2)
5	4	6	Teste e benchmarking de diferentes parâmetros computacionais na simulação computacional utilizando otimização DFT e/ou dinâmica molecular ab initio com SIESTA, QE ou VASP, a depender do tipo de propriedade a ser descrita Bolsista de pós-doutorado ficará responsável pelos testes e junto com os Coodenadores e pesquisadores. Todos ficarão responsáveis pela Determinação do espaço de parâmetros; (entrega #2)
6	4	6	Teste e benchmarking de diferentes parâmetros computacionais na simulação computacional utilizando dinâmica molecular clássica com LAMMPS, com testes de diferentes potenciais clássicos, e construção de input para estudo da propriedade alvo Bolsista de pós-doutorado ficará responsável pelos testes e junto com os Coodenadores e pesquisador/UFOP. Todos ficarão responsáveis pela Determinação do espaço de parâmetros; (entrega #2)
7	7	9	Construção e teste dos inputs das simulações com dinâmica molecular / LAMMPS; Construção dos modelos a serem empregrados na simulação das propriedades dos materiais isolados e de interação do aglomerante com o minério de ferro; Bolsista de pós-doutorado ficará responsável pelos testes e junto com os Coodenadores e pesquisador/UFOP. Todos ficarão responsáveis pela Determinação do espaço de parâmetros; (entrega #3 e #4)
8	7	9	Construção e teste dos inputs das simulações com DFT/SIESTA; Construção dos modelos a serem empregrados na simulação das propriedades dos materiais isolados e de interação do aglomerante com o minério de ferro; Bolsista de pós-doutorado ficará responsável pelos testes e junto com os Coodenadores e pesquisador. Todos ficarão responsáveis pela Determinação do espaço de parâmetros; (entrega #3 e #4)
9	9	24	Simulação, análise e tratamento dos dados (DFT/MD) As simulações, análises e tratamentos de dados serão realizadas por toda a equipe de simulação - bolsista, pesquisadores e coordenadores. (entrega #3 e #4)

10	10	10	Escrita da prestão de contas. Coordenadores e Bolsista responsáveis pela prestação de contas. (entrega #5)
11	11	12	Bolsista responsável pela elaboração do relatório científico com orientação dos coordenadores; (entrega #3)
12	20	26	Escrita de relatório, prováveis artigos, e resumos para participação em congressos; Bolsista responsável pela elaboração do relatório científico com orientação dos coordenadores; (entrega #4, #6 e #7)
13	23	26	Escrita da prestão de contas. Coordenadores e Bolsista responsáveis pela prestação de contas. (entrega #5)

7. Orçamento Detalhado

Abaixo um resumo do cronograma geral de desembolso das duas instituições (UNESP e UFOP) que será realizado pela VALE.

TOTAL GERAL - Cronograma de desembolso do projeto - UFOP e UNESP

	Ano 1	Ano 2	Ano 3	Ano 4	Ano 5	TOTAL
1. Bolsa de pesquisa	R$ 269,337.60	R$ 269,337.60	R$ -	R$ -	R$ -	R$ 538,6
2. Material de consumo	R$ -	R$ -	R$ -	R$ -	R$ -	
3. Material permanente nacional	R$ 35,146.82	R$ -	R$ -	R$ -	R$ -	R$ 35,1
4 Material permanente importado	R$ 95,500.00	R$ -	R$ -	R$ -	R$ -	R$ 95,5
5. Serviços de terceiros	R$ 64,100.00	R$ 40,000.00	R$ -	R$ -	R$ -	R$ 104,1
6. Obras e edificações cívis	R$ -	R$ -	R$ -	R$ -	R$ -	
7. Viagens e diárias	R$ 42,400.00	R$ 42,400.00	R$ -	R$ -	R$ -	R$ 84,8
8. Participação em congressos	R$ 12,000.00	R$ 12,000.00	R$ -	R$ -	R$ -	R$ 24,0
9. Outros	R$ -	R$ -	R$ -	R$ -	R$ -	
10. Taxas	R$ 108,861.98	R$ 68,376.76	R$ -	R$ -	R$ -	R$ 177,2
TOTAL GERAL	R$ 627,346.40	R$ 432,114.36	R$ -	R$ -	R$ -	R$ 1,059,4

Abaixo será discriminado os desembolso do projeto dentro da UFOP e UNESP separadamente, separando compras, bolsas e gastos com taxas. A seguir será apresentada as depesas dentro da UFOP:

TOTAL - Cronograma de desembolso do projeto - UFOP

	Ano 1	Ano 2	Ano 3	Ano 4	Ano 5	TOTAL
1. Bolsa de pesquisa	R$ 143,368.80	R$ 143,368.80	R$ -	R$ -	R$ -	R$ 286,7
2. Material de consumo	R$ -	R$ -	R$ -	R$ -	R$ -	
3. Material permanente nacional	R$ 20,146.82	R$ -	R$ -	R$ -	R$ -	R$ 20,1
4 Material permanente importado	R$ 95,500.00	R$ -	R$ -	R$ -	R$ -	R$ 95,5
5. Serviços de terceiros	R$ 24,100.00	R$ -	R$ -	R$ -	R$ -	R$ 24,1
6. Obras e edificações cívis	R$ -	R$ -	R$ -	R$ -	R$ -	
7. Viagens e diárias	R$ 18,400.00	R$ 18,400.00	R$ -	R$ -	R$ -	R$ 36,8
8. Participação em congressos	R$ 6,000.00	R$ 6,000.00	R$ -	R$ -	R$ -	R$ 12,0

9. Outros	R$ -	R$ -	R$ -	R$ -	R$ -	
10. Taxas	R$ 85,421.01	R$ 46,602.44	R$ -	R$ -	R$ -	R$ 132,0
TOTAL GERAL	R$ 392,936.63	R$ 214,371.24	R$ -	R$ -	R$ -	R$ 607,3

ORÇAMENTO DETALHADO - Bolsas de pesquisa					
Tipo de Bolsa	Justificativa	Quantidade	Duração (meses)	Custo Unitário	Custo Total
Bolsa de Pós-doutorado	Pós-doutorando para desenvolvimento do projeto na área de interação de ligantes com minério de ferro.	1	24	R$ 9,047.40	R 217,137.6
Bolsa de Pesquisador	Coordenação do Projeto	1	24	R$ 1,450.00	R$ 34,800.0
Bolsa de Pesquisador	Pesquisador Colaborador	1	24	R$ 1,450.00	R$ 34,800.0
TOTAL					R$ 286,737.60

ORÇAMENTO DETALHADO - Materiais, Serviços e Demais despesas				
Item	Descrição	Quantidade	Custo Unitário	Custo
Material permanente importado	Nó Computacional Dell PowerEdge R6525 Server/128 (cento e vinte e oito) cores em 2 (dois) sockets AMD EPYC 7713 2.0 GHz com 256 MB de cache; 512 GB de memória DDR4 3200 MT/s ECC Registrada (16x 32 GB RDIMM); 1 (um) SSD 480GB SATA 6Gbps de 2.5"; 1 (uma) interface para gerenciamento remoto iDRAC 1GbE; 2 (duas) interfaces 1GbE; 2 (duas) fontes redundantes de 1100W (1+1); 5 (cinco) anos de garantia ProSupport com atendimento 5x10 NBD on-site. (US$19,100.00) - proforma em anexo. Esse equipamento será adquirido com fins de realização de simulação computacional dentro da UFOP. Será uma máquina dedicada para o projeto da Vale.	1	R$ 95,500.00	95,5
Material permanente nacional	APC Smart-UPS X 3000VA/2700W, 230V - no break destinado ao Nó computacional acima para proteção contra quedas de energia.	1	R$ 10,521.00	10,5
Material permanente nacional	Rack APC 19" NetShelter SX 42U AR3100 https://www.apcloja.com.br/Rack-42u-Apc-Ar3100-Netshelter-Sx/p/356/ - este rack será adquirido para alocação de no-break e nó computacional acima.	1	R$ 9,625.82	9,6
Serviços de terceiros	Configuração de Softwares e Bibliotecas no Cluster - essa verba será utilizada para configuração e instalação de bibliotecas e softwares no cluster Dinamo indispensáveis para a execução do projeto.	1	R$ 5,000.00	5,0
Participação em congressos	Pagamento de taxa de inscrição nacionais e internacionais (estimativa de 1 evento nacional e 1 internacional) - gastos com participação em eventos	2	R$ 6,000.00	12,0
Viagens	Despesas viagens: passagens aéreas e despesas com viagem para participação em congressos nacionais e internacionais (estimativa de 1 evento nacional e 1 internacional) - - gastos com participação em eventos e workshops da vale	2	R$ 18,400.00	36,8
Serviços de terceiros	DESPESAS ACESSÓRIAS DE IMPORTAÇÃO - 20% - Nó Computacional	1	R$ 19,100.00	19,1
TOTAL				R$ 188,54
TOTAL GERAL (sem taxas)				R$ 475,28

ORÇAMENTO DETALHADO - Taxas		
Tipo de Taxa	Justificativa	Percentu Total
	DESPESAS OPERACIONAIS - Gorceix Resolução CUNI 2384 - Art. 4 - https://www.soc.ufop.br/public/files/RESOLUCAO_CUNI_2384_ANEXO_0.pdf	

	Taxa a título de retribuição e ressarcimento para UFOP - Resolução CUNI 2384 - Art. 26 https://www.soc.ufop.br/public/files/RESOLUCAO_CUNI_2384_ANEXO_0.pdf	
Valor das taxas por ano		
TOTAL GERAL DAS TAXAS		R$ 132,023
Total a ser desembolsado por ano		R$ 607,307

A seguir será apresentada as depesas dentro da UNESP:

TOTAL - Cronograma de desembolso do projeto - UNESP

		Ano 1	Ano 2	Ano 3	Ano 4	Ano 5	TOTAL
1. Bolsa de pesquisa		R$ 125,968.80	R$ 125,968.80	R$ -	R$ -	R$ -	R$ 251,9
2. Material de consumo		R$ -	R$ -	R$ -	R$ -	R$ -	
3. Material permanente nacional		R$ 15,000.00	R$ -	R$ -	R$ -	R$ -	R$ 15,0
4 Material permanente importado		R$ -	R$ -	R$ -	R$ -	R$ -	
5. Serviços de terceiros		R$ 40,000.00	R$ 40,000.00	R$ -	R$ -	R$ -	R$ 80,0
6. Obras e edificações cívis		R$ -	R$ -	R$ -	R$ -	R$ -	
7. Viagens e diárias		R$ 24,000.00	R$ 24,000.00	R$ -	R$ -	R$ -	R$ 48,0
8. Participação em congressos		R$ 6,000.00	R$ 6,000.00	R$ -	R$ -	R$ -	R$ 12,0
9. Outros		R$ -	R$ -	R$ -	R$ -	R$ -	
10. Taxas		R$ 23,440.98	R$ 21,774.31	R$ -	R$ -	R$ -	R$ 45,2
TOTAL GERAL		R$ 234,409.78	R$ 217,743.11	R$ -	R$ -	R$ -	R$ 452,1

ORÇAMENTO DETALHADO - Bolsas de pesquisa					
Tipo de Bolsa	Justificativa	Quantidade	Duração (meses)	Custo Unitário	Custo To
Bolsa de Pós-doutorado	Pós-doutorando para desenvolvimento do projeto na área de interação de ligantes com minério de ferro. (Valor de Referência: Bolsa de Pós-doutorado da Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de São Paulo - FAPESP)	1	24	R$ 9,047.40	217,13
Bolsa de coordenação	Bolsa do Coordenador do Projeto (Valor de referência: Projetos da Vale com outras Universidadades, eg UFMG)	1	24	R$ 1,450.00	34,80
TOTAL					R$ 251,937.

ORÇAMENTO DETALHADO - Materiais, Serviços e Demais despesas				
Item	Descrição	Quantidade	Custo Unitário	Custo Tota
Viagens	Ressarcimento de viagens para realização de visitas técnicas à Vale em Belo Horizonte (3x por ano de projeto)	6	R$ 2,000.00	12,000.
Participação em congressos	Pagamento de taxa de inscrição para participação em congressos internacionais	2	R$ 5,000.00	10,000.

Participação em congressos	Pagamento de taxa de inscrição para participação em congressos nacionais	2	R$ 1,000.00	R$ 2,000.
Serviços de terceiros	Pagamento de taxas de publicação em revistas internacionais	4	R$ 20,000.00	80,000.
Material permanente nacional	Tower R9 Ryzen 9 5950/ 64 Gb / 512 SSD / 2 x 4 TB / RTX - este equipamento será adquirido para utilização pelo bolsista no trabalho dentro do projeto.	1	R$ 15,000.00	15,000.
Viagens	Ressarcimento de passagens aéreas e custos de estadia para participação em congressos internacionais.	2	R$ 15,000.00	30,000.
Viagens	Ressarcimento de passagens aéreas e custos de estadia para participação em congressos nacionais	2	R$ 3,000.00	R$ 6,000.
TOTAL				R$ 155,000.00
TOTAL GERAL (sem taxas)				R$ 406,937.60

ORÇAMENTO DETALHADO - Taxas			
Tipo de Taxa	Justificativa	Percentual Total	Valor Ano 1
Despesas da Fundação	pagamento de despesas operacionais na Fundação de Apoio	11%	R$
Valor das taxas por ano			R$
TOTAL GERAL DAS TAXAS		R$ 45,215.29	
Total a ser desembolsado por ano		R$ 452,152.89	R$ 234,409

Documento assinado eletronicamente por **Matheus Josue de Souza Matos**, **PROFESSOR DE MAGISTERIO SUPERIOR**, em 12/12/2023, às 16:40, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no art. 6º, § 1º, do Decreto nº 8.539, de 8 de outubro de 2015.

Documento assinado eletronicamente por **Claudia Aparecida Marliere de Lima**, **REITOR(A)**, em 12/12/2023, às 16:51, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no art. 6º, § 1º, do Decreto nº 8.539, de 8 de outubro de 2015.

Documento assinado eletronicamente por **Cristovam Paes de Oliveira**, **Usuário Externo**, em 12/12/2023, às 17:08, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no art. 6º, § 1º, do Decreto nº 8.539, de 8 de outubro de 2015.

Documento assinado eletronicamente por **Alexandre Reily Rocha**, **Usuário Externo**, em 12/12/2023, às 17:10, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no art. 6º, § 1º, do Decreto nº 8.539, de 8 de outubro de 2015.

Documento assinado eletronicamente por **Fabrício Vilela Parreira**, **Usuário Externo**, em 13/12/2023, às 08:26, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no art. 6º, § 1º, do Decreto nº 8.539, de 8 de outubro de 2015.

Documento assinado eletronicamente por **FELIPE VIANA PIMENTA**, **Usuário Externo**, em 13/12/2023, às 08:34, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no art. 6º, § 1º, do Decreto nº 8.539, de 8 de outubro de 2015.

Documento assinado eletronicamente por **Pasqual Barretti**, **Usuário Externo**, em 14/12/2023, às 08:06, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no art. 6º, § 1º, do Decreto nº 8.539, de 8 de outubro de 2015.

Documento assinado eletronicamente por **ROGERIO TALES SILVA CARNEIRO**, **Usuário Externo**, em 14/12/2023, às 09:11, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no art. 6º, § 1º, do Decreto nº 8.539, de 8 de outubro de 2015.

A autenticidade deste documento pode ser conferida no site http://sei.ufop.br/sei/controlador_externo.php?acao=documento_conferir&id_orgao_acesso_externo=0 , informando o código verificador **0640634** e o código CRC **F4C688ED**.

R. Diogo de Vasconcelos, 122, - Bairro Pilar Ouro Preto/MG, CEP 35402-163
Telefone: (31)3559-1197 - www.ufop.br