

NOME	TÓPICOS EM CATÁLISE
Carga horária	10 créditos - 150 h
Docente Responsável	Profa. Lucia Noda
SIGLA	CTS22
Obrigatória	SIM
Ementa	<p>Módulo 1: Catálise Homogênea</p> <ul style="list-style-type: none"> - Conceitos gerais em catálise - Descrição de catalisadores - Ciclos catalíticos - Aspectos cinéticos e termodinâmicos em catálise - Teoria de taxa de reação - Propriedades de catalisadores: seletividade, rendimento, atividade e meia vida - Mecanismos de reação e tipos de reações catalíticas: ácida, básica e nucleofílica - Química de coordenação e organometálicos aplicados em sistemas catalíticos, mecanismos de reações catalíticas envolvendo complexos de metais de transição - Processos catalíticos: isomerização, hidrogenação, oligomerização, polimerização, carbonilação, oxidação e catálise assimétrica. <p>Módulo 2: Catálise Heterogênea</p> <ul style="list-style-type: none"> - Fundamentos da catálise heterogênea - Propriedades gerais de catalisadores sólidos - Acidez, estrutura e composição superficial dos catalisadores. - Adsorção, taxa de reação e modelos cinéticos para reações catalíticas heterogêneas - Atividade, seletividade e estabilidade do catalisador. - Quimissorção e fisissorção. - Reações: grau de avanço da reação e conversão, rendimento, reações sensíveis e insensíveis à estrutura, etapas elementares e etapa determinante da taxa de reação (RDS), mecanismo de reação e ciclo catalítico, reações em cadeia - Tipos de fase ativa, suporte e promotores - Transferência externa de massa e calor. - Transferência interna e velocidade global - Preparação e caracterização de catalisadores heterogêneos - Catalisadores óxidos - Peneiras moleculares - Fotocatálise heterogênea - Catalisadores nanoestruturados - Catálise ambiental - Catálise para produção e transformação de combustíveis <p>Módulo 3: Biocatálise</p> <ul style="list-style-type: none"> - Introdução e aspectos gerais da biocatálise - Considerações gerais sobre enzimas - Cinética enzimática - Magnitude de constantes cinéticas - Biocatalisadores em meio aquoso e em sistemas de solventes orgânicos. - Reações: Mecanismos de reações catalisadas. Reações de oxirredução com e sem coenzimas. Reações de Baeyer-Villiger. Reações de oxidação de sulfetos.

	<p>Reações de redução de compostos carbonílicos e desracemização de álcoois.</p> <ul style="list-style-type: none"> - Estereoquímica em reações enzimáticas - Produção de enzimas e sua recuperação do meio de fermentação (downstream processing) <p>Módulo 4: Interação enzima-substrato e a importância da energia de ligação em catálise por enzimas</p> <ul style="list-style-type: none"> - Especificidade em catálise enzimática - Uso de engenharia protéica para determinar o mecanismo de uma enzima - Algumas aplicações de enzimas na indústria - Catalisadores biomiméticos e engenharia de enzimas - Catálise de enzimas imobilizadas em matrizes sólidas
Bibliografia	<ol style="list-style-type: none"> 1. Catalysis: Concepts and Green Applications, Gadi Rothenberg, Wiley-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, 2008, ISBN: 9783527318247. 2. Concepts of Modern Catalysis and Kinetic, I. Chorkendorff, J.W. Niemantsverdriet, Wiley-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, Weinheim, 2003, ISBN: 3527305742. 3. Homogeneous Catalysis: Mechanisms and Industrial Applications, Sumit Bhaduri e Doble Mukesh, John Wiley & Sons, Inc., 2000, ISBN: 0471372218 . 4. Fundamentals of Molecular Catalysis, Hideo Kurosawa e Akio Yamamoto (Editores), Elsevier Science B.V, 2003, ISBN: 0444509216. 5. Organometallic Chemistry and Catalysis, Didier Astruc, Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 2007, ISBN: 9783540461289. 6. Adsorption, ion exchange and catalysis: Design of Operations and Environmental Applications, V. Inglezakis, S. Pouloupoulos, Elsevier, 2006, ISBN: 0444527834. 7. Handbook of Green Chemistry - Green Catalysis, P. T. Anastas, R. H. Crabtree, Wiley-VCH, 2009, ISBN: 9783527315772. 8. Zeólitos: Um nanomundo ao serviço da catálise, M. Guisnet, F. R. Ribeiro, Fundação Calouste Gulbenkian, 2004, ISBN: 9723110717. 9. March's Advanced Organic Chemistry: Reactions, Mechanisms, and Structure, Michael B. Smith e Jerry March, Wiley-Interscience, 2007, ISBN: 0471720917. 10. Advanced Inorganic Chemistry, F. Albert Cotton, Carlos A. Murillo, Manfred Bochmann, Geoffrey Wilkinson, Wiley-Interscience, 1999, ISBN: 0471199575.
Docentes envolvidos	<ol style="list-style-type: none"> 1. Romilda Fernández Felisbino 2. Lucia Kiyomi Noda 3. Adriana Karla 4. Andrea Aguilar 5. Carolina V. T. Giongo 6. Luciano Caseli 7. Marcos Augusto Bizeto 8. Tereza da Silva Martins 9. Alessandro Rodrigues 10. Cristiano Raminelli 11. João Valdir Comasseto

- | | |
|--|---|
| | <ol style="list-style-type: none">12. Rafael Carlos Guadagnin13. Sania Maria de Lima |
|--|---|