

IQU-847 Reatividade em Superfícies (30 horas)

Ementa:

A disciplina tem como objetivos discutir os parâmetros que afetam as reações químicas em uma superfície, seja sobre a ótica de catálise, mas também sobre a formação do catalisador; treinar o aluno para o tratamento de dados, construção e teste de modelos cinéticos. Será fornecida uma visão geral sobre o problema das reações em superfície nas aulas teóricas, enquanto dois sistemas específicos, na parte experimental, permitirão consolidar o conhecimento.

1 - Adsorção física e química uma visão macroscópica e molecular

2 - Transição estado sólido para duas dimensões.

3 – Grupos funcionais (presente nas superfícies) e seu efeito sobre as reações químicas.

4 – Superfícies de suporte usuais e a formação do catalisador.

5 - Modelos cinéticos e estudo de casos específicos:

5.1 O fenômeno de compensação em catálise.

5.2 reações sobre partículas metálicas.

5.3 reações sobre sítios ácidos.

5.4 reações sobre sítios básicos.

5.5 reações em sistema bifuncional.

6 – Parte experimental: realização de reações modelo, sensíveis e insensíveis a estrutura do catalisador.

Bibliografia:

1. J.H. de Bøer. The Dynamical Character of Adsorption Oxford, London, 2^o ed, 240 pp., 1968.
2. Gabor A. Somorjai. Introduction to Surface Chemistry and Catalysis, Wiley, NY, 667 pp., 1994.
3. Michel Boudart; G. Djéga-Mariadassou. Kinetics of Heterogeneous Catalytic reactions, Princeton University, New Jersey, 115 pp., 1982.
4. Roald Hoffmann. Solids and Surfaces: A Chemistry's View of Bonding in Extended Structures. Wiley, NY, 142 pp., 1988.
5. Gilbert F. Froment; Kenneth B. Bischoff. Chemical Reactor Analysis and Design, Wiley, NY, 664 pp., 1990.
6. Arthur W. Adamson; Alice P. Gast. Physical Chemistry of Surfaces, Wiley, NY, 784 pp., 1997.
7. Artigos científicos atuais.