

## SÚMULA DA DISCIPLINA

### 1. Identificação

Nome disciplina: QUP 018 - Catálise Homogênea e Heterogênea

Professores responsáveis: Michèle Oberson de Souza, Katia Bernardo-Gusmão e José Ribeiro Gregório

Nível: Mestrado e Doutorado

Carga horária: 45

Créditos: 3

Revisado e atualizado em: Agosto\_2019

### 2. Ementa

Catálise homogênea. Grandezas de reação. Química de coordenação e organometálicos em processos catalíticos. Principais classes de processos em catálise homogênea. Processos industriais em catálise homogênea. Catálise heterogênea. Fenômenos de adsorção. Suportes sólidos, modificação da superfície de suportes com grupos orgânicos, metais, óxidos e complexos. Métodos de caracterização. Principais processos industriais em catálise heterogênea. Catálise Ziegler-Natta. Estudo de sistemas catalíticos moleculares e de superfície: síntese, caracterização, propriedades e aplicações de precursores catalíticos homogêneos e heterogêneos.

### 3. Objetivo

A disciplina tem como objetivo apresentar/discutir sistemas catalíticos homogêneos e heterogêneos de interesse acadêmico e industrial.

### 4. Conteúdo Programático

4.1 Conceitos Gerais em Catálise. Catalisadores, co-catalisadores, promotores e modificadores. Grandezas de reação, conversão, seletividade, rendimento, atividade, número de rotação, frequência de rotação etc. Cinética de reações catalíticas. Ciclos catalíticos: principais características em sistemas homogêneos e heterogêneos.

4.2 Catálise Homogênea. 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. Metátese. Hidroformilação. Carbonilação. Oxidação. Reações de Acoplamento. Catálise assimétrica: principais conceitos. Processos industriais: Wacker, Shop, Dimersol, Monsanto, Du Pont, Reppe, etc. Processos industriais em química fina: Heck, hidrogenação assimétrica, epoxidação de Sharpless, ciclopropanação, etc. Ziegler-Natta homogêneo.

4.3 Catálise Heterogênea. Conceitos gerais em catálise heterogênea (quadro comparativo entre a catálise homogênea e heterogênea). Suportes orgânicos e inorgânicos: preparação, propriedades, ativação, funcionalização etc. Preparação de catalisadores heterogêneos: métodos de impregnação, troca iônica, precipitação, vaporização, "grafting", etc. Métodos industriais: "spraying", pastilhamento, etc. Zeólitas: classificação, propriedades, aplicações, etc.

## 5. Avaliação

Serão solicitados a confecção de documentos a serem postados no site Moodle da disciplina.

Será efetuado uma prova oral individual aplicada por cada um dos docentes da disciplina. A nota individual será composta de da média das avaliações dos trabalhos postados (30%) e da média das avaliações orais (70%).

Será considerado aprovado o aluno que obtiver conceito final A, B ou C, atribuídos conforme relação abaixo:

A – Ótimo: Nota superior ou igual a 8,5

B – Bom: Nota de 8,4 a 7,5

C – Regular: Nota de 7,4 e 6,0

D – Insuficiente: abaixo de 6,0

FF – Se participado em menos de 75% das atividades. Ou das atividades avaliativas.

## 6. Método de Trabalho/Ensino

Aulas teórico-expositivas.

## 7. Bibliografia

Será disponibilizada exemplares em pdf na plataforma Moodle da bibliografia necessária.

- G. W. Parshall e S. D. Ittel, Homogeneous catalysis, Wiley, Nova Iorque, 1992.
- C. Masters, Homogeneous Transition-Metal Catalysis: A Gentle Art, Chapman and Hall, Nova Iorque, 1981.
- B. Frémaux, Éléments de Cinétique et de catalyse, Technique et Documentation, Paris, 1989.
- G. Henrici-Olivé e S. Olivé, Coordination and Catalysis, VCH, Heidelberg, 1977.
- H. Brunner e Z. Zettlmeir, Handbook of Enantioselective Catalysis with Transition Metal Compounds, VCH, Nova Iorque, 1993.
- R. Noyori, Asymmetric catalysis in Organic Syntheses, Wiley, Nova Iorque, 1993.
- K. Weissmermel e J. H. Arpe, Chimie Organique Industrielle, Masson, Paris, 1981.
- R. B. Anderson e D. T. Dawson, Experimental Methods in Catalytic Research, vol. 1 a 3, Academic Press, Londres, 1976. - Artigos recentes de revistas especializadas.