



UNIVERSIDADE FEDERAL DE SANTA CATARINA
CENTRO DE CIÊNCIAS FÍSICAS E MATEMÁTICAS
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM QUÍMICA

PLANO DE ENSINO
SEMESTRE - 2017.2

IDENTIFICAÇÃO DA DISCIPLINA:

CÓDIGO	NOME DA DISCIPLINA	Nº DE HORAS-AULA	TOTAL DE HORAS-AULA SEMESTRAIS
		SEMANAIS	
QMC3423	Tópicos Especiais em Físico-Química. (Reações em fluxo: Reações sólido-gás. Cinética e Mecanismo).	04	60

PROFESSOR(ES) MINISTRANTE(S)

Eduardo Humeres

HORÁRIO

Segunda 15:10h:(Sala PG1) e Quinta 15:10h(Sala PG1)

EMENTA

Reações em fluxo; Reações sólido/gás; Cinética e mecanismo; Estequiometria da reação; Determinação da ordem; Condições de estado estacionário; Detecção de intermediários; Reatividade dos intermediários; Técnica do inventário de átomos.

CONTEÚDO PROGRAMÁTICO

- 1- Condições experimentais - Reator diferencial;
- 2- Técnicas de medidas (Glc.; UV-vis.; FTIR.; XPS.; ssNMR.; TGA-FTIR).
- 3- Análise e tratamento matemático;
- 4- Estequiometria da reação;
- 5- Determinação da ordem;
- 6- Condições de estado estacionário;
- 7- Detecção e estudo de intermediários;
- 8- Reatividade dos intermediários;
- 9- Técnica do inventário de átomos.

AVALIAÇÃO

A avaliação do desempenho na disciplina se dará através de prova e seminário. A média final será a média das duas avaliações. 1 prova e 1 seminário.

BIBLIOGRAFIA

1. The Chemical Physics of Surfaces, S.R. Morrison, Plenum, New York, 1990.
2. Kinetics and Mechanisms, Moore and Pearson, 1981.
3. Reduction of SO₂ on different carbons, E. Humeres, R. F.P.M. Moreira, M. G.B. Peruch, *Carbon*, 2002, 40, 751-760.
4. Reactive Intermediates of the Reduction of SO₂ on Activated Carbon, Eduardo Humeres, Maria da Gloria B. Peruch, Regina F.P.M. Moreira and Wido Schreiner, *J. Phys. Org. Chem.* 2003, 16, 824-830.
5. O enxofre como poluente. Remoção de dióxido de enxofre de efluentes gasosos, Eduardo Humeres, Regina F.P.M. Moreira and Maria da Gloria B. Peruch, Em: Química Verde en Latinoamérica, P. Tundo, R.H. de Rossi, editores. Green Chemistry Series N° 11, Argentina, 2004, pp. 317-334.
5. Reduction of Sulfur Dioxide on Carbons Catalyzed by Salts, Eduardo Humeres, Maria da Gloria B. Peruch, Regina F.P.M. Moreira and Wido Schreiner, *Int. J. Mol. Sc.*, 2005, 6, 130-142.
7. Chemisorption of SO₂ on graphite surface: A theoretical ab initio and ideal lattice gas model study, J.R. Pliego, S.M. Resende, E. Humeres, *Chem. Phys.* 2005, 314, 127-133.
8. Reactivity of the Thermally Stable Intermediates of the Reduction of SO₂ on Carbons and Mechanisms of Insertion of Organic Moieties in the Carbon Matrix. Eduardo Humeres, Karen Mendes de Castro, Regina de F.P.M. Moreira, Maria da Gloria B. Peruch, Wido H. Schreiner, Abil E. Aliev, Moisés Canle, J. Arturo Santaballa, Isabel Fernández. *J. Phys. Chem. C*, 2008, 112, 581-589.
9. The Use of XPS Spectra for the Study of Reaction Mechanisms: The Atom Inventory Method. Eduardo Humeres, Karen Mendes de Castro, Regina de F.P.M. Moreira, Wido H. Schreiner, Abil E. Aliev, Moisés Canle, J. Arturo Santaballa, Isabel Fernández. *J. Phys. Org. Chem.* 2008, 21, 1035-1042.

10. Kinetics and Mechanisms in Flow Systems: Reduction of SO₂ on Carbons. Eduardo Humeres, Regina de F. P. M. Moreira, *J. Phys. Org. Chem.* 2012, 25 1012–1026.
11. Reactivity of the Intermediates of the Reduction of SO₂. Functionalization of Graphite, Graphite Oxide and Graphene Oxide, Eduardo Humeres, Karen M. de Castro, Alessandra Smaniotto, Cristiane N. Lopes, Nito A. Debacher, Regina de F.P.M. Moreira, Wido H. Schreiner, Abil E. Aliev. *J. Phys. Org. Chem.* 2014, 27, 344–351. Special issue, 12th Latin-American Conference on Physical Organic Chemistry (CLAFQO 12).
12. Selective Insertion of the Sulfur Dioxide Reduction Intermediates on Graphene Oxide. E. Humeres, N. A. Debacher, A. Smaniotto, K. M. de Castro, L. O. B. Benetoli, E. P. de Souza, R. de F.P.M. Moreira, C. N. Lopes, W. H. Schreiner, M. Canle, J. A. Santaballa. *Langmuir* 2014, 30, 4301–4309.
13. Photolysis of Phenylalanine in the Presence of Oxidized Carbon Nanotubes, Eduardo Humeres, Eduardo Pinheiro de Souza, Nito Angelo Debacher, Regina de F.P.M. Moreira, Cristiane Nunes Lopes, M. Isabel Fernández Pérez, J. Arturo Santaballa, Moisés Canle L, Wido H. Schreiner, Abil E. Aliev. *Langmuir* 2015, 31, 164-170.
14. Interconversion and selective reactivity of sulfur dioxide reduction intermediates inserted on graphene oxide, Alessandra Smaniotto, Eduardo Humeres, Nito A. Debacher, Karen M. de Castro, Luís O. B. Benetoli, Wido H. Schreiner, Moisés Canle, J. Arturo Santaballa, *J. Phys. Org. Chem.* 2016, 29, 773–780, DOI: 10.1002/poc.3597, Special issue, European Symposium on Organic Reactivity, ESOR 2015, Kiel, Germany, August 2015.
15. Reactive Site Model of the Reduction of SO₂ on Graphite, Eduardo Humeres, Nito Angelo Debacher, Regina de F. P. M. Moreira, J. Arturo Santaballa, Moisés Canle. *J. Phys. Chem. C.*