



Universidade Federal do Oeste da Bahia

Centro das Ciências Exatas e das Tecnologias
Programa de Pós-Graduação em Química Pura e Aplicada



Tipo do Componente Curricular: Disciplina	
Unidade Responsável: Programa de Pós-Graduação em Química Pura e Aplicada	
Nome: Tópicos avançados em Físico-Química teórica e prática	
Código: QUI0028	
Carga Horária Teórica: 30 h.	Carga Horária Prática: 30 h.
Carga Horária Total: 60 h.	Excluir da Avaliação Institucional: Não
Matriculável On-Line: Sim	Horário Flexível da Turma: Não
Horário Flexível do Docente: Sim	Obrigatoriedade de Conceito: Sim
Pode Criar Turma Sem Solicitação: Não	Necessita de Orientador: Não
Exige Horário: Sim	Permite CH Compartilhada: Não
Quantidade de Avaliações: 3	
Ementa/Descrição: Considerações gerais sobre catalisadores e enzimas e o uso de reações biomiméticas em Química Fina; Breve descrição dos sistemas catalíticos mais comuns: catalisadores ácidos e básicos; Catálise homogênea e heterogênea; Enzimas: o citocromo P450; Metaloporfirinas como modelos biomiméticos; Sistemas reacionais empregando Metaloporfirinas: histórico, princípio, ciclo catalítico, oxidantes e substratos estudados e alterações do espectro eletrônico; A espécie catalítica ativa: as hipóteses existentes Uma análise baseada no espectro eletrônico e na teoria dos 4 orbitais.	
Referências: 1. M. Gouterman, <i>The porphyrins, Part A - Physical Chemistry</i> , Academic Press, New York, 197. 2. L.R. Milgrom, <i>The colours of life</i> , Oxford University Press, New York, 1997. 3. P.R. Ortiz de Montellano, <i>Cytochrome P450: structure, mechanism and biochemistry</i> , 3 rd ed., Kluwer Academic/Plenum Publisher, New York, 2005. 4. R.A. Sheldon, <i>Metalloporphyrins in catalytic oxidations</i> , Marcel Dekker, Inc., New York, 1994. 5. H.A. Wittcoff, B.G. Reuben, J.S. Plotkin, <i>Industrial organic chemicals</i> , 2 nd ed., Wiley-Interscience, New Jersey, 2004. 6. D. Wöhrle, A.D. Pomogailo, <i>Metal complexes and metals in macromolecules: synthesis, structure and properties</i> , WILEY, Weinheim, 2003. 7. M.C. Curet-Arana, R.Q. Snurr, L.J. Broadbelt, <i>Mechanism in homogeneous and</i>	



Universidade Federal do Oeste da Bahia

Centro das Ciências Exatas e das Tecnologias
Programa de Pós-Graduação em Química Pura e Aplicada



heterogeneous epoxidation catalysis, Elsevier, Amsterdam, 2008

8. B. Meunier, *Biomimetic oxidations catalyzed by transition metal complexes*, Imperial College Press, London, 1999.

9. F. Montanari, L. Casella, *Metalloporphyrins catalyzed oxidations*, Kluwer Academic Publishers, Dordrecht, 1994.

10. J.-E. Backvall, *Modern oxidation methods*, Wiley-VCH, Weinheim, 2004.

11. A.M.V. Cavaleiro, *Química Inorgânica Básica*, 2nd ed., Universidade de Aveiro, Aveiro, 1999.