

SÚMULA DA DISCIPLINA

1. Identificação

Código e nome da disciplina: QUP 053 – Fotoquímica. Princípios e Aplicações

Professor responsável: Daniel Eduardo Weibel

Nível: Mestrado e Doutorado

Carga horária: 45 h

Créditos: 3 (três)

Revisado e atualizado em: Agosto_2019

2. Ementa

Princípios básicos e aplicações da fotoquímica em sistemas homogêneos e heterogêneos. Mecanismos fotoquímicos. Desativações físicas e químicas de estados excitados. Fotocatálise. Fotossíntese. Laser e radiação Síncrotron. Fotoquímica resolvida no tempo.

3. Objetivo

Introduzir os alunos à ciência fotoquímica com abordagem nas principais aplicações atuais.

4. Conteúdo Programático

- Conceitos básicos em fotoquímica, estados eletrônicos fundamentais e excitados. Absorção de luz e fontes de excitação. Desativação de estados excitados e diagrama de Jablonski. Conversão interna e cruzamento de sistema. Fluorescência e fosforescência. Tempo de vida de estados excitados. Transições eletrônicas inter e intramoleculares. Princípio de Franck-Condon, regras de seleção de El-Sayed, desativação (*quenching*) física e química. Transferência de energia de longo alcance (dipolo-dipolo, Colombiana), transferência de energia de curto alcance. Teoria de Marcus.
- Fotoquímica atmosférica e estratosférica. Diferencia entre reações térmicas e fotoquímicas. Camada de ozônio. Poluição fotoquímica (*Smog*).
- Fotoquímica de alquenos e compostos carboxílicos. Geometria de estados excitados. Reações Norrish tipo I e II. Reações de abstração de hidrogênio. Mecanismos fotoquímicos de decomposição primários e secundários. Rendimentos quânticos, desativação, sensibilização fotoquímica.
- Estudos cinéticos de espécies transitórias, Fotólise flash, Métodos pump-probe: lasers. Espectroscopia resolvida no tempo (ps e fs).
- Conversão de energia solar: células fotovoltaicas e células fotovoltaicas sensibilizadas por corantes. Fotocatálise, fotossíntese artificial e fotoeletroquímica. Desafios na fotogeração de hidrogênio.
- Processos Oxidativos Avançados: homogêneos e heterogêneos. Reagentes tipo Fenton, ozônio, TiO₂ e sistemas híbridos.
- Fotoquímica em superfícies.

5. Avaliação

Apresentação de seminários. Provas via Plataforma Moodle com discussão dos resultados em grupo. Ensino dirigido com material e questões de estudo. Será considerado aprovado o aluno que obtiver conceito final A, B ou C, atribuídos conforme relação abaixo:

A - Ótimo (90 a 100%)

B - Bom (75% a 89%)

C - Regular (60 a 74%)

D - Insuficiente (abaixo de 60%)

FF - Sem frequência

6. Método de Trabalho/Ensino

Aulas de caráter teórico-expositivo e uso de recursos Moodle para apoio à aprendizagem.

7. Bibliografia

- B. Wardle, Principles and applications of Photochemistry, Chishester, UK, 2009, 250.
- J. N. Turro, Modern Molecular Photochemistry, The Benjamin/Cummings Publishing Company, Inc., California, 1991.
- H. Okabe, Photochemistry of Small Molecules, John Wiley & Sons, New York 1978.
- R. P. Wayne, Chemistry of Atmospheres; Oxford University Press: Oxford, 1992.
- J. G. Calvert e J. N. Pitts, Photochemistry John Wiley: New York, 1966.
- C. A. Grimes, O. K. Varghese e S. Ranjan, Light, Water, Hydrogen. The Solar Generation of Hydrogen by Water Photoelectrolysis, Springer, 2008.
- T. Oppenländer, Photochemical Purification of Water and Air: Advanced Oxidation Processes (AOPs): Principles, Reaction Mechanisms, Reactor Concepts. Weinheim, Wiley-Verlag, Germany, 2003.
- N. S. Allen, Handbook of Photochemistry and Photophysics of Polymeric Materials, John Wiley & Sons, New Jersey, Canada, 2010.
- S. Parsons, Advanced Oxidation Processes for Water and Wastewater Treatment, IWA Publishing, London, UK, 2004.
- M. Kaneko e I. Okura, Photocatalysis: Science and Technology. Tokyo, Japam, Springer, 2002.