

Projetos COQ875 - 2025-2

Moléculas

- Quebra de ligação C-H em haloalcanos (<https://pubs.acs.org/doi/full/10.1021/jp001815x>)
- Reação de nitração do benzeno (<https://pubs.acs.org/doi/10.1021/jp030167p>)
- Reações de sulfonação de aromáticos (<https://pubs.rsc.org/en/content/articlepdf/2002/p2/b109338j>)
- Reações de hidratação em alcenos (<https://chemistry-europe.onlinelibrary.wiley.com/doi/10.1002/slct.201701407>)
- Interação entre CO₂ e aminas (<https://pubs.rsc.org/en/content/articlepdf/2014/cp/c4cp02254h>)
- Solvatação de íons Na em água (<https://pubs.acs.org/doi/pdf/10.1021/acs.jctc.5b00357>)

Adsorção e Catálise

- Adsorção de água em superfícies metálicas (<https://doi.org/10.1103/PhysRevB.69.195404>)
- Adsorção de mistura de etanol+água em Pt (<https://doi.org/10.1021/jp403352u>)
- Adsorção de água em zeólitas (<https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.1c04270>)
- Adsorção de CO₂ em grafeno (<https://doi.org/10.1007/s00894-022-05105-y>)
- Adsorção de íon Ag em celulose e seus derivados (<https://pubs.acs.org/doi/full/10.1021/acs.langmuir.5b03228>)
- Reforma do CH₄ em catalisador de Ni (<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0920586109006105>)
- Reações do Etanol em catalisador de Co (<https://pubs.acs.org/doi/pdf/10.1021/acs.jpcc.6b04036>)
- Reações de Etanol em catalisador Pd-Au (<https://pubs.rsc.org/en/content/articlehtml/2017/cp/c7cp05097f>)
- Hidrogenação de CO₂ em superfície de InZr₃ (<https://pubs.rsc.org/en/content/articlepdf/2017/cp/c7cp03859c>)

Espectroscopia

- Espectro Raman de pirimidina e pirimidina + água (<https://doi.org/10.1021/jp101267w>)
- Espectro IR de aspirina e aspirina + água (<https://link.springer.com/article/10.1007/s00894-022-05258-w>)
- Espectro IR de cafeína e cafeína + água (<https://link.springer.com/article/10.1007/s00894-022-05258-w>)

- Espectro IR de paracetamol e paracetamol + água
(<https://link.springer.com/article/10.1007/s00894-022-05258-w>)
- Espectro IR de hidrato de gás (<https://pubs.acs.org/doi/pdf/10.1021/acs.jpcb.8b10223>)
- Espectro IR de cristal de ácido nítrico (<https://pubs.acs.org/doi/pdf/10.1021/jp047249d>)