

IQU-832 Cinética Química (60 horas)

Ementa:

Conceitos básicos de cinética química.

Definição de lei de velocidade. Ordem, molecularidade, leis de velocidade. Reação elementar e reação complexa. Equação de Arrhenius.

Reações complexas.

Soluções analíticas exatas e aproximadas. Soluções numéricas. Programas de integração numérica.

Mecanismos de reações e sistemas multicomponentes. Reações de combustão e reações na atmosfera.

Superfícies de energia potencial e dinâmica de reação.

A transição do nível microscópico para o macroscópico e vice-versa. Superfícies de energia potencial.

Coordenadas de reação. Modelos colisionais e modelos estatísticos.

Teoria do estado de transição.

Teoria convencional. Teoria variacional. Teoria generalizada. Constantes de velocidade micro e macrocanônicas.

Teorias de reações unimoleculares.

Reações de decomposição, isomerização e dissociação. Ativação colisional, fotoquímica e química.

Teoria RRKM. Constantes de velocidade micro e macrocanônicas.

Bibliografia:

1. R. G. Gilbert, S. C. Smith, Theory of Unimolecular and Recombination Reactions, Blackwell Scientific Publications, Oxford, 1990.

2. J. I. Steinfeld, J. S. Francisco, W. L. Hase, Chemical Kinetics and Dynamics, Englewood Cliffs, New Jersey, 1989.

3. Publicações científicas em revistas internacionais, Dissertações de Mestrado e Teses de Doutorado recentes.

4. Manuais e material de apoio dos diversos programas computacionais usados nos trabalhos práticos (GAUSSIAN, POLYRATE, UNIMOL e KINAL).