

UNIVERSIDADE FEDERAL DA PARAÍBA  
CENTRO DE CIÊNCIAS EXATAS E DA NATUREZA  
DEPARTAMENTO DE QUÍMICA

**Componente Curricular:** CINÉTICA QUÍMICA

**Carga Horária:** 60 horas

**Numero de Créditos:** 04

**Pré-Requisitos:** TERMODINÂMICA QUÍMICA II

**Público-alvo:** Bacharelado em Química e Licenciatura em Química

**OBJETIVOS:** Determinar a lei de velocidade de uma reação química. Determinar os parâmetros experimentais da lei de velocidade: ordem de reação e constante de velocidade. Determinar a meia-vida de uma reação química. Definir o mecanismo de reação baseado na lei de velocidade. Entender a influência da concentração, da temperatura e do catalisador sobre a velocidade de uma reação química. Compreender o conceito da energia de ativação de uma reação química e sua determinação experimental. Entender os conceitos de superfície de energia potencial, coordenada de reação, estado de transição e complexo ativado. Conhecer os principais tipos de catálise e os fenômenos de superfície. Estudar os principais fenômenos envolvidos nas reações fotoquímicas. Dar início ao uso de ferramentas computacionais para resolução de problemas numéricos e algébricos.

**HABILIDADES E COMPETÊNCIAS:** Compreender a influência da concentração, temperatura e catalisador sobre a velocidade de uma reação química. Saber propor o mecanismo de uma reação química baseado na lei de velocidade. Determinar os parâmetros de Arrhenius e compreender os conceitos de superfície de energia potencial, coordenada de reação, estado de transição e complexo ativado. Saber distinguir os principais tipos de catálise. Entender os fenômenos envolvidos nas reações fotoquímicas. Saber usar ferramentas computacionais para resolução de problemas numéricos e algébricos.

#### **EMENTA/PROGRAMA**

**CINÉTICA QUÍMICA:** Definição dos termos cinéticos; Efeito da concentração sobre a velocidade da reação; Leis de velocidade e sua determinação empírica: Métodos para determinação das leis de velocidade: Método do isolamento, Velocidades iniciais e método de integração; Meia-vida; Reações nas vizinhanças do equilíbrio; Técnicas experimentais para o estudo de reações lentas; Técnicas experimentais para o estudo de reações rápidas e muito rápidas; Mecanismos de reação: Molecularidade e Ordem de reação, Etapa determinante da velocidade de reação; Mecanismo de Michaelis-Menten; Efeito da temperatura sobre a velocidade da reação: a equação de Arrhenius, parâmetros de Arrhenius e sua determinação experimental; Teoria das colisões para reações gasosas elementares bimoleculares; - Teoria do complexo ativado: Superfície de energia potencial, Coordenada de reação, Estado de transição, Complexo ativado, Equação de Eyring.

**SUPERFÍCIES E CATÁLISE HETEROGÊNEA.** Tensão Superficial e sua determinação experimental. Adsorção. Tipos de isotermas de adsorção. Princípios básicos da catálise: Definição, Tipos e Propriedades de catalisadores; Mecanismo geral da catálise; Energia de ativação para reações catalíticas; Catálise Homogênea.

**FOTOQUÍMICA:** Processos fotoquímicos; Rendimento quântico; Diagrama de Jablonski: Fluorescência, Fosforescência, Cruzamento inter-sistemas; Reações fotoquímicas.

#### **METODOLOGIA:**

Aulas expositivas e de exercícios. Uso de programas específicos para resolução de problemas. Apresentação de seminários..

#### **AVALIAÇÃO:**

Realização de exercícios e seminários, provas escritas e participação nas aulas.

#### **BIBLIOGRAFIA:**

1. ATKINS P. e De Paula, J, "Físico-Química", Vol 3, Editora LTC, 7ª ed., (2004).
2. ATKINS P., "Físico-Química: Fundamentos", Editora LTC, 3ª ed., (2003).
3. MOORE W. J., "Físico-Química", Vols. 1 e 2, Editora Edgard Blucher, 4ª ed., (2000).
4. BARROW, G. M., "Physical Chemistry", 6ª Ed., McGraw-Hill, N.Y., 1996.
5. LAIDLER K. J., "Chemical Kinetics", Harper Collins Publishers, 3ª ed., (1987).
6. CROPPER, W.H., "Mathematica Computer Programs for Physical Chemistry", Springer, 1998.
7. ANDRADE L. N., "Introdução à Computação Algébrica com o MAPLE", 1ª Ed., Editora da Sociedade Brasileira de Matemática, 2004.