



Plano de ensino 2022/2

Nome do Curso: Ciências Moleculares

Nome da Disciplina: Cinética e Dinâmica de Processos Reativos

Ano / Período: 2022/2

Nome Professor (a): Valter Henrique Carvalho Silva

Homepage: [www.mphyschem.com/disciplinas](http://www.mphyschem.com/disciplinas)

Código:	Horas-aula/ Semana: 4	Horas-aula prática: 0	Horas-aula teórica: 60	C H anual/semestral: 60
---------	--------------------------	--------------------------	---------------------------	----------------------------

### 1. Ementa

Conceitos Básicos de Cinética: Leis de Velocidade: Leis de Velocidade, Reações Elementares e Compostas, Efeito da Temperatura. Teoria Cinética dos Gases: Temperatura, Pressão, Energia, Distribuição de velocidades e energia de Maxwell, . Teoria de Colisões: Esferas Rígidas: Trautz e Lewis, Seção de Choque e Constante Cinética. Superfície de Energia Potencial (SEP): Reações com Troca de Átomo, Coordenadas Ponderadas pela Massa, Características da SEP, Interseções Cônicas. Teoria do Estado de Transição (TST): Fundamentos, Derivação da Constante Cinética, Formulação Termodinâmica, Formulação Variacional. Tunelamento Quântico: Fundamentos e Modelos Unidimensionais, Efeitos Cinéticos Isotópicos, Splitting e Tunelamento Multidimensional. Reações Unimoleculares: Mecanismo de Lindemann-Christiansen, Tratamento de Hinshelwood, formulações RRK e RRKM. Conceitos Básicos de Teoria de Transporte: Fundamentos, Visão Microscópica da Lei dos Transportes, Viscosidade e Difusão. Dinâmica dos Efeitos do Solvente: Difusão em Reações Bimoleculares, Teorias de Kramers e Grote-Hynes. Colisões Moleculares Reativas: Fundamentos, Interações Interatômicas, Visão Macroscópica da Seção de Choque. Estereodinâmica

### 2. Objetivos

#### Geral:

Introdução das teorias atualmente empregadas em cinética química e dinâmica de reações. Descrição de várias técnicas e aplicação em reações químicas em vários ambientes moleculares. Familiarização com softwares e seu emprego na solução de problemas práticos de cinética química e dinâmica de reações.

### 3. Conteúdos/Cronograma das atividades

<b>DISCIPLINA:</b> Química Computacional Avançada		<b>DOCENTE:</b> Valter Henrique Carvalho Silva	<b>PERÍODO:</b> 2022/2
Semana	Data	DESCRIÇÃO DO CONTÉUDOS/ATIVIDADES	
1.	22-09	Apresentação do Plano de Ensino. Utilizando softwares de simulação matemática.	
2.	29-09	Conceitos Básicos de Cinética: Leis de Velocidade: Leis de Velocidade, Reações Elementares e Compostas, Efeito da Temperatura	



3.	06-10	Teoria Cinética dos Gases: Temperatura, Pressão, Energia, Distribuição de velocidades e energia de Maxwell, Teoria de Colisões: Esferas Rígidas: Trautz e Lewis, Seção de Choque e Constante Cinética
4.	13-10	Superfície de Energia Potencial (SEP): Energia de Ativação e Teorema de Tolman, Reações com Troca de Átomo, Coordenadas Ponderadas pela Massa, Características da SEP, Intersecções Cônicas
5.	20-10	Teoria do Estado de Transição (TST): Fundamentos, Derivação da Constante Cinética, Formulação Termodinâmica, Formulação Variacional
6.	27-10	Tunelamento Quântico: Fundamentos e Modelos Unidimensionais, Efeitos Cinéticos Isotópicos, Splitting e Tunelamento Multidimensional
7.	03-11	Reações Unimoleculares: Mecanismo de Lindemann-Christiansen, Tratamento de Hinshelwood, formulações RRK e RRKM
8.	17-11	Reações Unimoleculares: Mecanismo de Lindemann-Christiansen, Tratamento de Hinshelwood, formulações RRK e RRKM
<b>9.</b>	<b>24-11</b>	<b>Avaliação – 1VA</b>
10.	01-12	Conceitos Básicos de Teoria de Transporte: Fundamentos, Visão Microscópica da Lei dos Transportes, Viscosidade e Difusão
11.	08-12	Dinâmica dos Efeitos do Solvente: Difusão em Reações Bimoleculares, Teorias de Kramers e Grote-Hynes
12.	12-01	Colisões Moleculares Reativas: Fundamentos, Interações Interatômicas, Visão Macroscópica da Seção de Choque
13.	19-01	Colisões Moleculares Reativas: Fundamentos, Interações Interatômicas, Visão Macroscópica da Seção de Choque
14.	26-01	Estereodinâmica
<b>15.</b>	<b>02-02</b>	<b>Avaliação – 2VA</b>

---

#### 4. Estratégias de ensino-aprendizagem, procedimentos e recursos didáticos

Aulas expositivas e aulas demonstrativas. Recurso didático: retroprojeto, computador, quadro negro, giz, apagador e simulações computacionais. Utilização do código computacional: Transitivity v.1.0.2

---

#### 5. Métodos e instrumentos avaliativos

A nota final do aluno será dada pela fórmula

N1 → Avaliação Escrita (Questões e Simulações computacionais no Maple/Origin).

N2 → Avaliação Escrita (Questões e Simulações computacionais no Maple/Origin).

PS → Atividades (Apresentação de Artigos e Simulações computacionais no Maple/Origin).



$$NF = \frac{(0,30 * PS + 0,7 * N1) + (0,30 * PS + 0,7 * N2)}{2}$$

Se  $NF \geq 6,0$ , então, aluno(a) aprovado(a). Se não, aluno(a) reprovado(a).

---

#### 6. Prática como componente curricular – Registrar como será desenvolvida

Aulas expositivas, seminários, estudos dirigidos e aulas demonstrativas. Recurso didático: datashow, computador, quadro negro, giz, apagador e simulações Computacionais.

#### 7. Bibliografia

1. PAUL L HOUSTON. Chemical Kinetics and Reaction Dynamics. Dover Publications, INC. New York. 2001.
2. BARON PETERS. Reaction Rate Theory and Rare Events. Elsevier. Amsterdam. 2017.
3. NIELS E. HENRIKSEN; FLEMMING Y. HANSEN. Theories of Molecular Reaction Dynamics: The Microscopic Foundation of Chemical Kinetics. Oxford. New York. 2008.
4. RAPHAEL D. LEVINE. Molecular Reaction Dynamics. Cambridge University Press. Cambridge. 2005.
5. KEITH J. LAIDLER. Chemical Kinetics. Pearson. 3. Ed. New York. 2014.
6. SIDNEY W. BENSON. The Foundations of Chemical Kinetics. McGRAW-HILL. New York. 1960.