

FQ-223 - Dinâmica Química

Requisito recomendado: não há. Requisito exigido: não há. Horas semanais: 4-0-0-7. Princípios básicos de cinética, leis de velocidade, ordem molecularidade das reações, equação de Arrhenius e energia de ativação. Superfícies de energia potencial: superfícies obtidas através de métodos semi-empíricos e ab initio. Teoria estatísticas das velocidades de reação: teoria do estado de transição e teoria RRKM. Dinâmica molecular: teoria cinética das colisões, métodos da dinâmica clássica e quântica das colisões. Espectroscopia de estado de transição. Bibliografia: STEINFELD, J.I. et al., Chemical Kinetics and Dynamics, Prentice, Hall, New Jersey, 1989. LAIDLER, K. J., Chemical Kinetics and Dynamics of Elementary, Gas Reactions, Butterworth, London 1980.