



EQ712 – Cinética Química Aplicada

Ementa:

Cinética química. Cinética das reações homogêneas. Teoria da cinética de reações elementares em fase gasosa e líquida. Reações complexas. Catálise homogênea. Adsorção e catálise heterogênea.

Vetor: OF:S-5 T:03 P:01 L:00 O:00 D:00 E:00 HS:04 SL:04 C:04 EX:S

Pré-requisito(s): *EQ515

Carga horária total: 60 horas (4 créditos)

Programa Detalhado

1. Introdução (Tempo sugerido: 8 horas)

- 1.1) Estequiometria
- 1.2) Independência das reações
- 1.3) Variação da composição numa transformação química
- 1.4) Concentração e sua variação numa transformação química
 - 1.4.1 – Medidas de concentração
 - 1.4.2 – Variação da concentração

2. Cinética Química (Tempo sugerido: 12 horas)

- 2.1) Introdução
- 2.2) Taxa de uma reação química
- 2.3) Influência da composição sobre a taxa da reação
- 2.4) Reações reversíveis e irreversíveis
- 2.5) Cinética e mecanismo
- 2.6) Ordem e molecularidade
- 2.7) Influência da temperatura sobre a taxa da reação
- 2.8) Teoria da cinética das reações elementares em fase líquida e gasosa

3. Coleta e Análise de Dados Cinéticos (Tempo sugerido: 12 horas)

- 3.1) Introdução
- 3.2) Balanço de massa e coleta de dados em reatores ideais isotérmicos
 - 3.2.1 – Reator tanque descontínuo (BSTR)
 - 3.2.2 – Reator tanque de mistura contínuo (CSTR)
 - 3.2.3 – Reator tubular (PFR)
- 3.3) Métodos de análise e ajuste dos dados cinéticos
 - 3.3.1 – Métodos diferencial e integral para o BSTR
 - 3.3.2 – Método para o CSTR
 - 3.3.3 – Métodos para PFR diferencial e integral
 - 3.3.4 – Método das taxas iniciais
 - 3.3.5 – Método da meia vida
 - 3.3.6 – Método da pressão total

4. Cinética das Reações Complexas (Tempo sugerido: 14 horas)

- 4.1) Introdução
- 4.2) A aproximação do estado estacionário (princípio de Bodenstein)
- 4.3) A etapa determinante da taxa
- 4.4) Reações em cadeia em fase gasosa
 - 4.4.1 – Radicais
 - 4.4.2 – A pirólise de compostos orgânicos (mecanismo de Rice-Herzfeld)
 - 4.4.3 – Inibidores, iniciadores e período de indução
 - 4.4.4 – Reações em cadeia ramificada

5. Catálise (Tempo sugerido: 14 horas)

- 5.1) Introdução
 - 5.1.1 – Catálise homogênea
 - 5.1.2 – Catálise heterogênea
 - 5.1.2 – Catálise enzimática
- 5.2) Cinética das reações catalíticas heterogêneas
 - 5.2.1 – Mecanismos de Langmuir-Hinshelwood
 - 5.2.2 – Mecanismos de Eley-Rideal

BIBLIOGRAFIA RECOMENDADA:

- Fogler, H. S.; "Elementos de Engenharia das Reações Químicas", 3ª edição, LTC Editora, Rio de Janeiro, 2002.
- Levenspiel, O.; "Chemical Reaction Engineering"; 3ª edição, John Wiley & Sons, New York, 1998.
- Hill, C.G. An Introduction to Chemical Engineering Kinetics and Reactor Design, John Wiley&Sons, 1977.
- Smith, J.M. Chemical Engineering Kinetics, McGraw-Hill, 3rd Ed., 1981.
- Benson, S.W. The Foundations of Chemical Kinetics, New York, N.Y. McGraw-Hill, 1960.
- Denbigh, K. and Turner, R. Introduction to Chemical Reaction Design, Cambridge: Cambridge University Press, 1970.
- Boudart, M. Kinetics of Chemical Processes, Englewood Clis, N.J.:Prentice-Hall, Inc., 1968.
- Froment, G.F. and Bischoff, K.B. Chemical Reactor Analysis and Design, 2nd Ed. John Wiley & Sons, Inc. 1990.