

QUI 2324

Físico-Química Avançada

Tipo de Disciplina: Obrigatória

Carga Horária Total: 4 h semanais

Créditos: 4

OBJETIVOS

O objetivo desta disciplina é complementar a formação acadêmica dos pós-graduandos, fornecendo os conceitos básicos e avançados da Físico-Química aplicados a problemas importantes em química em um enfoque clássico e a nível molecular.

EMENTA

Termodinâmica molecular: distribuição de Boltzmann, função de partição, 1ª e 2ª leis da termodinâmica, equilíbrio físico, misturas simples, equilíbrio químico, termodinâmica estatística. Cinética química: mecanismos de reação, teorias da constante de velocidade, mecanismos de reações complexas, catálise, fotoquímica.

PROGRAMA

Distribuição de Boltzmann, função de partição, energia média. 1ª lei da termodinâmica, calor, trabalho, energia interna, entalpia, funções de estado. 2ª lei da termodinâmica, entropia, entropia estatística, energia de Gibbs. Diagramas de fases, potencial químico, equilíbrio em sistemas multicomponentes, equilíbrio químico, constante de equilíbrio termodinâmica. Cinética química empírica, leis de velocidade, mecanismos de reação. Dependência de k com a temperatura, teoria das colisões e do estado de transição. Mecanismos de reações complexas: catálise homogênea e heterogênea, catálise enzimática, transições eletrônicas, fotoquímica.

AVALIAÇÃO

Média = (P1 + P2)/2
P1, P2 = Avaliações

**BIBLIOGRAFIA
PRINCIPAL**

- 1) Peter Atkins, Júlio de Paula, Ronald Friedman. Quanta, matéria e mudança: uma abordagem molecular para a físico-química. 1ª Edição, volume 2, LTC, 2011
- 2) Peter Atkins e Júlio de Paula. Físico-Química. 8ª Edição, LTC, 2008
- 3) Donald A. McQuarrie, John D. Simon, Physical Chemistry: A Molecular Approach, University Science Books, 1997.

**BIBLIOGRAFIA
COMPLEMENTAR**

- 1) Predrag-Peter Ilich. Selected Problems in Physical Chemistry, Springer, 2010
- 2) Raymond Chang. Físico-Química, Vol. 1, Editora MaGraw
- 3) Ira N Levine, Physical Chemistry, McGraw-Hill Science/Engineering/Math; 5th ed., 2001.
- 4) Gilbert Castellan, Fundamentos de Físico-Química, LTC, 1996.
- 5) R. Stephen Berry, Stuart A. Rice, John Ross, Physical Chemistry, Oxford University Press, 2nd ed., 2001