

## QMC 923 - Físico Química Avançada

[45 horas/03 créditos]

### Ementa da Disciplina:

Aprofundar conceitos básicos aplicados às áreas de interesse.

### Programa Detalhado:

#### I. Termodinâmica

Propriedades de gases, Leis da termodinâmica, Entalpia e entropia de Processos Químicos e Físicos, Energias Livres de Gibbs e Helmholtz, Potencial químico, Equilíbrio químico.

#### II. Equilíbrio entre fases

Dissoluções de gases em líquidos, Solubilidade de gases em soluções aquosas- Lei de Raoult, Equilíbrio de fases

#### II. Estrutura Atômica e Molecular

Princípios de mecânica quântica, Estrutura de átomos hidrogenóides e multieletrônicos, Teoria de ligação de valência e de orbital molecular, Orbitais moleculares em sistemas poliatômicos, Simetria molecular, Cálculos de orbitais moleculares numéricos

#### IV. Cinética Química

Leis empíricas de velocidade, Influência de temperatura na velocidade das reações, Mecanismo de reações químicas, Catálise homogênea, Teoria das colisões e complexo ativado.

#### V. Eletroquímica

Funções termodinâmicas de reações de oxi-redução, Semi-reações e eletrodos, Potencial padrão e série eletroquímica, Atividade, pH, pK e constante de solubilidade, Processos de eletrodos

## LITERATURA

1. P.W. ATKINS- Physical Chemistry – 6th edition – Oxford, 1998
2. G.W. CASTELLAN – Fundamentos de Físico-Química – 1a edição – LTC, 1996.
3. A.V. BUNGE – Introdução à química quântica – Edgard Blücher, 1977.
4. W.J. MOORE – Físico-Química – 4a edição - Edgard Blücher, 1976, volumes 1 e 2.
5. LUIZ PILLA Físico Química — Volumes 1 e 2 – Pearson Makron Books, 2002.