



**MEC - UNIVERSIDADE FEDERAL RURAL DO RIO DE JANEIRO  
DECANATO DE PÓS-GRADUAÇÃO E PESQUISA**

## **PROGRAMA ANALÍTICO**

### **DISCIPLINA**

<b>CÓDIGO: IC 1346</b> <b>CRÉDITOS: 6</b> <b>(T 6)</b>	<b>NOME: FÍSICO-QUÍMICA AVANÇADA</b>  <b>Cada crédito corresponde a 15 horas de aula</b>
--	--

**DEPARTAMENTO DE QUÍMICA**

**INSTITUTO DE CIÊNCIAS EXATAS**

**OBJETIVOS DA DISCIPLINA:** Apresentar os conceitos da área de físico-química e desenvolvê-los no nível de pós-graduação, de um forma a nivelar os conhecimentos entre alunos com formações variadas em química. Apresentar e desenvolver os conceitos das subáreas de Termodinâmica Clássica, Cinética Química e Química Quântica que possibilitem aos alunos estabelecer correlações entre os mais diversos fenômenos químicos e modelos físico-matemáticos que os descrevam.

#### **EMENTA:**

1. Termodinâmica Clássica: apresentar e aprofundar os conceitos envolvidos nas diversas transformações físico-químicas da matéria que envolvam variações de seu conteúdo energético, de forma independente do tempo.
2. Cinética Química: apresentar e aprofundar os conceitos envolvidos nas diversas transformações físico-químicas da matéria de forma dependente do tempo.
3. Química Quântica: apresentar os conceitos e modelos matemáticos fundamentais para a descrição quântica de sistemas atômicos e moleculares.

#### **PROGRAMA ANALÍTICO:**

##### **1. Termodinâmica Clássica**

- 1.1. Coordenadas e Funções de Estado
- 1.2. Gases Ideais e não-Ideais
- 1.3. Calor, Trabalho e 1ª Lei da Termodinâmica
- 1.4 Entropia e 2ª Lei da Termodinâmica
- 1.5 Potenciais Termodinâmicos: G e A

1.6 Soluções Ideais e não-Ideais

1.7 Equilíbrio Químico

## **2. Cinética Química**

2.1. Velocidade de Reação

2.2. Lei de velocidade: conceito de  $k$  e ordem de reação

2.3. Equações de velocidade: lei cinética integrada

2.4 Mecanismos: aproximações da etapa lenta e do estado estacionário

2.5 Fatores que afetam a velocidade de reação:  $T$  (eq. Arrhenius) e catálise

## **3. Química Quântica**

3.1 Modelos Ondulatórios e Corpusculares para Luz e Matéria

3.2 Operadores, Propriedades e Equação de auto-valor

3.3 Postulados da Mecânica Quântica

3.4 Átomo de hidrogênio

3.5 Átomos de polieletrônicos : spin e antissimetria da função de onda

3.6 Moléculas e LCAO

## **BIBLIOGRAFIA:**

- Físico-Química, Peter Atkins , Vols 1, 2 e 3 (2003).
- Thermodynamics and an Introduction to Thermostatistics, H. Callen, 2 Ed. John Wiley & Sons (1985)
- Quantum Chemistry, I Levine, 4 Ed., prentice hall Int. (1991)
- Chemical Kinetics and Dynamics, J. I. Steinfeld, J. S. Francisco, W. L. Hase, 2 Ed., Prentice Hall (1998)