

**PLANO DE ENSINO**

*Campus funcionamento:* Toledo

*Centro responsável:* Centro de Engenharias e Ciências Exatas

*Programa:* Química

*Carga horária:* 60

*Turno:*

*Creditos:* 4

*Nível:*

Mestrado

*Data de Fechamento do PE:* 20/03/2024 *Prd. Letivo:* 2024/1

*Aprovação:* 21/03/2024 *Ata n° 02/2024-PPGQUI*

*Homologação (Conselho de Centro):* 09/04/2024 *Ata n° 02/2024-CECE*

**Disciplina**

Físico-química avançada

**Ementa**

Resolução: 065/2016-CEPE

Leis da Termodinâmica – formalismo matemático. Diagramas de Fases. Termodinâmica de Misturas e Soluções. Cinética Química – leis de velocidade, mecanismos de reação e catálise. Química de Su-perfície e Catálise Heterogênea. Química Quântica e Termodinâmica Estatística.

**Objetivo geral**

**Objetivos Específicos**

**Metodologia**

Os procedimentos didáticos são baseados em aulas expositivas e práticas ilustradas com recursos audiovisuais. As aulas são complementadas com atividades de leitura e discussões de artigos científicos e de textos relacionados aos temas da disciplina. Além destas atividades os conteúdos são ainda abordados de forma complementar por desenvolvimento de pesquisas e apresentação de trabalhos escritos e seminários individuais ou em grupo.

**Atividades Práticas**

Poderá ser realizada atividades práticas mediante a disponibilidade de equipamentos e laboratório.

**Avaliação**

A avaliação da disciplina consistirá em instrumentos (prova escrita ou trabalho ou lista de exercício ou resolução de problema sob a forma de desafio) durante o semestre, todos com igual peso, perfazendo a nota final com a somatória total de 100.

**Docentes**

Nome	C/H
Douglas Cardoso Dragunski	20

**Docentes**

Nome	C/H
Reinaldo Aparecido Bariccatti	20

**PLANO DE ENSINO**

**Docentes**

Nome	C/H
Sandro Fernando Stolf	20

**Conteúdo Programático**

Título	C/H
1. Introdução a Sistemas Termodinâmicos.	
1. O sistema, vizinhança e fronteira.	
2. Estados de equilíbrio.	
3. Fases e estados da matéria.	
4. Propriedades básicas da matéria.	
5. Temperatura: Lei zero.	
6. O estado de um sistema.	
7. Equação de estado.	
8. Processos termodinâmicos.	
2. 1a lei da termodinâmica.	
1. Quantidades termodinâmicas: intensivas e extensivas.	
2. Energia e sistema de referência.	
3. Energia interna.	
4. 1a lei da termodinâmica.	
5. Calor e trabalho.	
6. Processos reversíveis, irreversíveis e espontâneos.	
7. Experimentos de Joule e Joule-Thomson.	
8. Entalpia.	
9. Termoquímica.	
3. 2a e lei da termodinâmica.	
1. Máquinas térmicas: ciclo de Carnot.	
2. Escala termodinâmica de temperatura.	
3. Entropia.	
4. Variações de entropia: processos reversíveis e irreversíveis.	
5. Degradação da energia.	
6. Entropia e equilíbrio.	
7. Relações de Maxwell.	
8. Cálculo das variações das funções de estado: S,H,A,G.	
4. Potencial químico e equilíbrio material.	
1. Equilíbrio de fases.	
2. Equilíbrio químico.	
5. Cinética Química	
1. Velocidade e leis de velocidade	
2. Características de Leis de Velocidade inicial específica	
3. Equilíbrio para uma reação simples	
4. Reações paralelas e consecutivas	
5. Dependência da Temperatura	
6. Mecanismos e processos elementares	
7. Aproximação do estado estacionário	
8. Reações em cadeia e reações oscilantes	
9. Teoria do estado de transição	
10. Catálise	
11. Catálise enzimática	
12. Catálise heterogênia	
6. Química de superfície	
1. Capilaridade	
2. Interface de Líquidos	
3. Superfície de sólidos	
4. Adsorção	
7. Mecânica quântica e Termodinâmica estatística.	
1. Operadores, função de onda e normalização das funções de onda	
2. Partícula na caixa, estrutura atômica e molecular segundo a mecânica quântica.	
3. Espectroscopia molecular eletrônica.	

**PLANO DE ENSINO**

**Conteúdo Programático**

**Título** **C/H**

4. Processos fotoquímicos e fotofísicos uni e bi-moleculares.
5. Termodinâmica estatística conceitos e aplicações.

***bibliografia básica***

1. LEVINE, I.N.; Physical Chemistry, 6a ed., MacGrawHill, 2008.
2. ATKINS, P.W.; DE PAULO, J.; Físico-Química. 9. ed. v. 1 e 2. Rio de Janeiro:LTC, 2009.
3. BALL, D.W. Físico-química, 1ed. São Paulo: Thomson, 2005. 2v.

***bibliografia complementar***

1. CASTELLAN, G.; Fundamentos de Físico-Química. Rio de Janeiro: LTC, 1986.
2. CALLEN H, Thermodynamics and in introduction to thermostatics, ed 2, Wiley, 1985.
3. MOORE, W. J. Físico-Química. 1. ed. São Paulo: Edgard Blucher, 1976, 2v.
4. ADAMSON, A. W. Physical Chemistry of Surfaces, Fifth edition, John Wiley & Sons, Inc, Canada, 1990
5. HOUSE, J. E. Principles of chemical kinetics, Second edition, Elsevier, USA, 2007.